

Échantillonnage des transitions

1 Introduction

Les calculs de transfert radiatif en atmosphère terrestre gazeuse sont souvent complexes et lourds à calculer. La méthode de Monte-Carlo, adaptée à ces problèmes, permet d'évaluer des grandeurs radiatives à partir de formulations statistiques. Le plus souvent, il s'agira de calcul de la luminance, grandeur caractéristique du transfert radiatif, ou de flux. De nombreux codes ont été formulés en Monte-Carlo dans l'atmosphère et des méthodes récentes permettent de limiter au maximum les concessions physiques du modèle. Une de ces méthodes, développée par [Galtier, 2014], consiste à formuler le coefficient d'absorption de manière statistique et d'introduire cette formulation à un calcul de transfert radiatif. Ainsi, il est possible de s'affranchir d'approximations le caractérisant.

De nombreuses possibilités existent en terme de formulation de ce coefficient d'absorption. Par la suite nous allons énumérer deux de ces possibilités. Le but de cette étude est d'évaluer le temps calcul et la variance induite par ces deux méthodes. Une de ces méthodes applique le principe de réduction de la variance. Nous verrons par la suite que deux choix sont présentés pour celle-ci. La seconde méthode utilise une méthode de clusters hiérarchiques.

2 Problématique

2.1 Expression du coefficient d'absorption

Le calcul du coefficient d'absorption est effectué par une méthode raie-par-raie, Line-By-Line ou LBL, réputée plus précise que d'autres méthodes statistiques (k distribution, c-k distribution, ...). Dans cette approche, les raies sont considérées indépendantes les unes des autres (contrairement au line-Mixing [Hartmann *et al.*, 2008]). Nous donnons une description rapide sur comment les caractériser et les calculer.

Le coefficient d'absorption pour une fréquence donnée, $k_{a,\nu}(\mathbf{x})$, est la somme de toutes les transitions moléculaires j . Ces transitions sont qualifiées aussi de raies d'absorption, notées $h_{a,\nu,j}(\mathbf{x})$. Ces raies d'absorption sont définies comme le produit d'une intensité, $S(j, T(\mathbf{x}))$ en [$\text{cm}^{-1}/(\text{molécule}.\text{cm}^{-2})$], par la densité moléculaire de l'espèce, $\rho(\mathbf{x})$, et d'un profil de raie.

$$k_{a,\nu}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_t} \rho(\mathbf{x}) S(j, T(\mathbf{x})) f(\nu - \nu_c(j, \mathbf{x}), \gamma(j, \mathbf{x})). \quad (1)$$

Les calculs spectroscopiques sont effectués par convention avec le nombre d'onde, η , qui est la fréquence divisée par la vitesse de la lumière dans le vide, $\eta = \nu/c$. Les paramètres spectroscopiques pour une espèce choisie sont disponibles sur la banque de données Hitran[Rothman *et al.*, 1987] pour une température inférieure à 500K . Pour de hautes températures qui interviennent souvent dans le phénomènes de combustion, il convient d'utiliser la banque de données Hitemp [Rothman *et al.*, 2010] qui contient un nombre beaucoup plus important de raies. Il existe d'autres bases de données : CDS 4000 [Tashkun et Perevalov, 2011] ou encore GEISA [Jacquinet-Husson *et al.*, 2011].

L'intensité de la raie j , à une température $T(\mathbf{x})$:

$$S(j, T(\mathbf{x})) = S(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T(\mathbf{x}))} \frac{\exp(-\frac{C_2 E_{low}}{T(\mathbf{x})})}{\exp(-\frac{C_2 E_{low}}{T_{ref}})} \left(\frac{1 - \exp(-\frac{C_2 \eta_0}{T(\mathbf{x})})}{1 - \exp(-\frac{C_2 \eta_0}{T_{ref}})} \right). \quad (2)$$

- E_{low} est l'énergie du niveau bas de la transition.
- $C_2 = 100 h c_0/k_b \approx 1.4388 K.cm$.
- La température de référence, T_{ref} , est fixée à $296K$.
- Le nombre d'onde central de la transition j : $\eta_0(j, \mathbf{x}) = \eta_c(j, \mathbf{x}) + \delta_p(j) \times P(\mathbf{x})$.
- $Q(T)$ est la fonction de partition de l'isotope de l'espèce considérée à la température d'intérêt T (valeurs données sur Hitran).

De nombreux profils de raie existent mais nous ne considérerons que le profil de raie de Lorentz :

$$f_L(\nu, \nu_c(j, \mathbf{x}), \gamma(j, \mathbf{x})) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(j, \mathbf{x})}{\gamma(j, \mathbf{x})^2 + (\eta - \eta_{c,0}(j, \mathbf{x}))^2} \quad (3)$$

- $\gamma(j, \mathbf{x}) = \left(\frac{T_{ref}}{T(\mathbf{x})} \right)^{n_{air}(j)} [\gamma_{self}(j) P_s(\mathbf{x}) + \gamma_{air}(j) (P(\mathbf{x}) - P_s(\mathbf{x}))]$, qui s'exprime en cm^{-1} .
- $P_s(j, \mathbf{x}) = \chi(z, j) P(\mathbf{x})$, $\chi(z, j)$ étant la concentration de l'espèce à la position z pour la transition j .
- En connaissant $P_s(j, \mathbf{x})$, la densité moléculaire de l'espèce a pour expression :
 $\rho(\mathbf{x}) = 10^{-6} \times (6.02214076 \times 1e23 \times P_s(j, \mathbf{x})) / (8.2057 \times 10^{-5} \times T)$

Le profil de raie de Lorentz rend compte de l'élargissement collisionnel, c'est-à-dire de l'effet des collisions sur l'absorption d'un atome ou d'une molécule. Entre deux collisions, la molécule reste dans un état énergétique donné. Moins il y a de collisions, plus la molécule reste dans cet état et plus l'élargissement de Lorentz est important.

A partir de ces données, il est possible de calculer le coefficient d'absorption pour n'importe quelle fréquence, température, pression et concentration. Les espèces moléculaires dépendent de la richesse de la base de données.

2.2 Formulation par Monte-Carlo

Considérons une variable aléatoire continue X :

$$A = \sum_i y_i = \sum_i \frac{y_i}{P_Y(y_i)} P_Y(y_i) = \mathbb{E}[Y]. \quad (4)$$

L'espérance est définie comme :

$$\mathbb{E}[Y] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \right)$$

Ainsi, selon l'expression de l'espérance, la valeur moyenne de A est :

$$\tilde{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{y_i}{P_Y(y_i)}. \quad (5)$$

Nous pouvons formuler $k_{a,\nu}$ selon :

$$k_{a,\nu}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_t} h_{a,\nu,j}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_t} P_{a,\nu,J}(j) \frac{h_{a,\nu,j}(\mathbf{x})}{P_{a,\nu,J}(j)} \quad (6)$$

Le but est donc de trouver l'expression de $P_{a,\nu,J}(j)$ qui minimise la variance et le temps de calcul.

3 Présentation des méthodes

La probabilité de choisir une transition $h_{a,\nu,j}$, parmi toutes les transitions N_t , est définie par :

$$P_{a,\nu,J}(j) = \frac{h_{a,\nu,j}}{\sum_i^{N_t} h_{\nu,i}} = \frac{h_{a,\nu,j}}{k_{a,\nu}} \quad (7)$$

Le but étant de contourner le calcul du coefficient d'absorption, une telle formulation n'a pas de sens. L'objectif est ici, en nous basant sur l'hypothèse que le profil est lorentzien, de trouver une expression de $P_{a,\nu,J}(j)$, tout en obtenant une variance et un temps d'exécution raisonnable.

3.1 Réduction de la variance

A cette fréquence ν , il faut choisir statistiquement les transitions qui compteront le plus dans l'estimation de $k_{a,\nu}(\mathbf{x})$. Ces transitions peuvent avoir un centre de raie plus ou moins proche de la fréquence considérée. Pour choisir judicieusement une transition, la bande de fréquence est découpée en plusieurs intervalles u de largeur "suffisamment" petite et nous avons :

$$P_{a,\nu,J}(j) = P_T(u)P_Q(u, j) \quad (8)$$

Avec $P_T(u)$ la probabilité de choisir un intervalle u et $P_Q(u, j)$ la probabilité de choisir une intensité dans l'intervalle u . Pour cette méthode deux choix existent pour la probabilité de choisir un intervalle u .

Un premier choix est d'échantillonner selon un profil lorentzien sur l'intervalle de fréquence total $[\nu_{db,min}; \nu_{db,max}]$, pour en déduire la bande u , de largeur fréquentielle $[\nu_{min,\beta}; \nu_{max,\beta}]$, à retenir :

$$P_T(u) = \frac{\text{atan}\left(\frac{\nu_{max,\beta} - \nu}{\gamma_Q}\right) - \text{atan}\left(\frac{\nu_{min,\beta} - \nu}{\gamma_Q}\right)}{\text{atan}\left(\frac{\nu_{db,max} - \nu}{\gamma_Q}\right) - \text{atan}\left(\frac{\nu_{db,min} - \nu}{\gamma_Q}\right)}. \quad (9)$$

Un second choix consiste à échantillonner selon un profil lorentzien et de tenir compte de l'intensité moyenne dans chaque intervalle :

$$\left\{ \begin{array}{l} P_T(u) = \frac{f(\bar{u}) \sum_{j=1}^{N_t(u)} S(j(u))}{\sum_{u=1}^{N_u} f(\bar{u}) \sum_{j=1}^{N_t(u)} S(j(u))} \\ f(\nu - \nu_c(j_u)) = \frac{\text{atan}\left(\frac{\nu_{max,\beta} - \nu}{\gamma_Q}\right) - \text{atan}\left(\frac{\nu_{min,\beta} - \nu}{\gamma_Q}\right)}{\pi [\nu_{max,\beta} - \nu_{min,\beta}]} \end{array} \right. \quad (10)$$

Dans les deux cas la probabilité d'échantillonner, une intensité dans un intervalle u est :

$$P_Q(u, j) = \frac{S(j(u))}{\sum_{j=1}^{N_t(u)} S(j(u))} \quad (11)$$

3.2 Cluster hiérarchique

On va donc chercher un moyen de choisir une transition avec une probabilité qui s'approche de $P_{a,\nu,J}(j)$. On note qu'il est essentiel de ne pas ajouter de biais, c'est-à-dire que toute transition non tronquée doit avoir une probabilité non nulle d'être choisie. Tant qu'on respecte cette condition, le calcul convergera vers le bon résultat et notre approximation déterminera uniquement la vitesse de convergence.

Notre méthode est basée sur le principe de clustering : on va rassembler les transitions qui "se ressemblent" en paquets et on va travailler sur ces paquets (clusters) plutôt que sur ces transitions. L'avantage est de réduire le nombre de données à considérer et surtout de supprimer des calculs redondants : des transitions de paramètres proches ont quasiment le même comportement donc on perd peu d'information en les considérant comme une seule entité.

En particulier, nous utilisons la méthode de clustering hiérarchique : nos paquets sont composés d'autres paquets plus petits, qui contiennent à leur tour d'autres paquets, etc. De cette manière se forme un arbre de clusters. C'est cette structure qui nous permet d'échantillonner très rapidement. On descend dans l'arbre jusqu'à trouver une feuille, ce qui prend un temps proportionnel à la hauteur de l'arbre qui grandit comme le logarithme du nombre de transitions.

3.2.1 Construction de l'arbre

Cette partie se fait en pré-calcul : notre arbre est construit une fois pour toute et ne dépend pas de la fréquence, ν . Comme écrit au-dessus, un cluster regroupe des transitions "similaires". Pour caractériser cette similarité on a besoin d'une notion de distance entre deux transitions.

On sait maintenant comment fabriquer nos clusters. Pour construire l'arbre, on part d'un cluster racine qui contient toutes les transitions. On divise son contenu en sous-paquets avec l'algorithme des K-moyennes en utilisant la distance décrite au-dessus. Chaque sous-paquet constitue un fils de notre cluster racine. On répète l'opération : on divise chaque sous-paquet en clusters plus petits qui constituent ses fils. On arrête les subdivisions quand le nombre de transitions contenues dans un cluster est inférieur à un nombre arbitraire (20 par exemple).

Choix de la distance : le choix de la distance dépend de l'approximation qu'on va faire plus loin de la contribution des clusters. Pour l'approximation linéaire par morceaux de la contribution qui est la méthode que l'on utilise, la distance qui serait pertinente n'est pas précisée pour le moment, voire même si le clustering a un vrai impact sur notre approximation (peut-être que celle-ci marcherait aussi bien avec des subdivisions aléatoires plutôt que kmeans). Pour l'instant, on a choisi d'utiliser la distance entre les fréquences centrales des transitions comme distance. De ce fait les clusters correspondent à des intervalles de fréquences et il est plus facile de choisir les fréquences de pré-calcul (par exemple prendre les fréquences entre deux transitions adjacentes).

On a aussi besoin, pour chaque cluster, d'une fonction associée qui va nous permettre d'approximer son importance : plus un cluster contient des transitions importantes, plus cette fonction doit être élevée. Il s'agit bien d'une fonction et non d'une constante fixée car l'importance des transitions (donc des clusters) dépend de ν alors que notre arbre est construit une fois pour toute. Le choix de cette fonction est l'objet de la section 3.

Pour récapituler, chaque cluster C est caractérisé par :

- Une fonction $f_C(\nu)$ qui caractérise l'importance du cluster.
- Un parent $P(C)$ sauf pour le cluster racine.

- Si le cluster est une feuille de l'arbre : une liste de transitions.
- Sinon : une liste de clusters fils

3.2.2 Choix de f_C

Un résultat important est que la forme optimale de f_C est :

$$f_C = \sum_{j \in C} h_{a,\nu,j} \quad (12)$$

Si pour tout cluster C on a $f_C = \sum_{j \in C} h_{a,\nu,j}$ alors pour tout $j \in \{1, \dots, N_t\}$,

$$P(X = j) = \frac{h_{a,\nu,j}(\nu)}{\sum_{i=1}^{N_t} h_{a,\nu,i}(\nu)} \quad (13)$$

Autrement dit, dans ce cas, notre méthode choisit des transitions de manière optimale.

Cette observation n'est pas utilisable en pratique : pour calculer cette fonction on devrait faire la somme de toutes les transitions du cluster ce qui serait plus long que de calculer directement les probabilités optimales. Au contraire, on doit trouver f_C qui se calcule rapidement et qui approxime le mieux possible $\sum_{j \in C} h_{a,\nu,j}$.

La méthode retenue est de construire pour chaque cluster C une approximation linéaire par morceaux de $\sum_{j \in C} h_{a,\nu,j}$. Pour cela, on va pré-calculer cette valeur à certaines fréquences de pré-calcul choisies et ensuite on viendra interpoler entre ces valeurs pré-calculées pour calculer notre approximation. Les fréquences de pré-calcul sont les suivantes :

- les fréquences centrales de ses transitions
- les fréquences intermédiaires entre deux transitions
- des fréquences espacées régulièrement autour de la fréquence centrale de chaque transition : pour tout $j \in C, \nu_j \pm 0.1, 0.2, \dots, 1$
- les fréquences autour de la troncature de chaque transition : pour tout $j \in C, \nu_j \pm 24.9999, 25.0001$
- les fréquences avant la première transition et après la dernière : $\nu_{prem} - 0.2, 0.5, 1, 2, \dots, 25, \nu_{der} + 0.2, 0.5, 1, 2, \dots, 25$

Note : il serait certainement judicieux de choisir ces fréquences de pré-calcul en fonction des largeurs de raies plutôt qu'à des distances fixées des centres de raie comme c'est le cas maintenant.

Pour chacune de ces fréquences, on calcule et on stocke la contribution de C . LA quantité de calcul étant importante, nous nous sommes consacré à son optimisation.

Premièrement, on se place dans le cas où chaque cluster a 2 fils parce que ça va nous permettre de diviser le nombre de calculs par 2 grâce à une optimisation algorithmique. Ensuite on remarque que les fréquences de pré-calcul de C correspondent à l'union des fréquences de pré-calcul de ses fils C_1 et C_2 . Si on commence par pré-calculer les contributions des feuilles et qu'ensuite on remonte dans l'arbre, on va pouvoir réutiliser les contributions de C_1 et C_2 sans les recalculer et diviser par 2 le nombre total de calculs.

Ensuite, on peut paralléliser la boucle sur les fréquences de pré-calcul, ce qui nous fait aussi gagner beaucoup de temps.

Algorithm 1 pré-calcul des contributions

```

procédure PRECALCULCONTRIBUTION( $C$ )
  if  $C$  est une feuille then
    Soit  $L$  la liste de ses fréquences de pré-calcul comme définie ci-dessus
    for  $\nu \in L$  do ▷ on parallélise cette boucle
      On calcule la contribution de  $C$  à la fréquence  $\nu$ 
    end for
  else
    Soient  $C_1$  et  $C_2$  les fils de  $C$ 
    Soit  $L_1$  la liste des fréquences de pré-calcul de  $C_1$ 
    Soit  $L_2$  la liste des fréquences de pré-calcul de  $C_2$ 
    for  $\nu \in L_1$  do ▷ on parallélise cette boucle
      Soit  $v_1$  la contribution de  $C_1$  à la fréquence  $\nu$  (déjà calculée)
      Soit  $v_2$  la contribution de  $C_2$  à la fréquence  $\nu$  (on doit la calculer ici)
      La contribution de  $C$  à la fréquence  $\nu$  est égale à  $v_1 + v_2$ 
    end for
    for  $\nu \in L_2$  do ▷ on parallélise cette boucle
      Soit  $v_1$  la contribution de  $C_1$  à la fréquence  $\nu$  (on doit la calculer ici)
      Soit  $v_2$  la contribution de  $C_2$  à la fréquence  $\nu$  (déjà calculée)
      La contribution de  $C$  à la fréquence  $\nu$  est égale à  $v_1 + v_2$ 
    end for
  end if
  Effectuer la simplification de notre polyligne
end procédure

```

Une fois qu'on a calculé la contribution de C à toutes les fréquences de pré-calcul on obtient effectivement une polyligne qui va nous servir d'approximation de la contribution de C à toutes les fréquences. Comme les transitions sont parfois très proches, il se peut que l'on ait calculé la contribution de C pour des fréquences voisines et qu'on n'ait pas vraiment besoin de ces points pour notre approximation. Pour supprimer ces points superflus, on utilise un algorithme de simplification de polyligne. Plus précisément on utilise l'algorithme de [Douglas et Peucker, 1973] qui va supprimer des points de notre polyligne tout en garantissant une erreur inférieure à ε par rapport à notre polyligne originale. Dans notre cas, on prend

$$\varepsilon = 0.1 \times (\text{minimum des contributions pré-calculées non nulles})$$

3.2.3 Procédure d'échantillonnage

Dans cette partie, on fixe une fréquence d'échantillonnage ν . Pour échantillonner, on descend dans l'arbre en choisissant parmi les fils selon leurs contributions. L'algorithme d'échantillonnage est comme suit :

3.2.4 Paramètres / Tradeoffs

Taille des feuilles Le nombre de transitions dans les feuilles est un paramètre important : si les feuilles contiennent beaucoup de transitions, alors on obtient un arbre plus petit qui demande moins de mémoire, mais la dernière étape de l'échantillonnage peut prendre longtemps (car on doit parcourir les transitions de la feuille choisie). Inversement, si les feuilles contiennent peu de transitions, l'arbre obtenu est plus profond et donc plus large mais l'échantillonnage devrait être plus efficace.

Erreur ε de la simplification Plus celle-ci est faible plus la simplification est grossière et donc plus notre approximation est grossière (et donc l'échantillonnage) mais plus on gagne en espace.

Algorithm 2 Échantillonnage

```

procédure CHOISIRTRANSITION( $C, \nu$ )
  if  $C$  est une feuille then
    Calculer les contributions de toutes ses transitions à la fréquence  $\nu$  et en choisir une selon ces contributions
    return  $(j, p)$  avec  $j$  la transition choisie et  $p$  sa probabilité
  else
    Soient  $C_1$  et  $C_2$  ses fils
     $p_1 \leftarrow \frac{f_{C_1}(\nu)}{f_{C_1}(\nu)+f_{C_2}(\nu)}$ 
     $p_2 \leftarrow \frac{f_{C_2}(\nu)}{f_{C_1}(\nu)+f_{C_2}(\nu)}$ 
    Choisir un fils  $C_j$  avec  $j \in \{1, 2\}$  selon les probabilités  $\{p_1, p_2\}$ 
     $(j, p) \leftarrow$  ChoisirTransition ( $C_i, \nu$ )
    return  $(j, p \times p_i)$ 
  end if
end procédure

```

Empiriquement, on ne gagne pas beaucoup de mémoire en prenant ε grand mais on perd beaucoup en précision.

Nombre de fréquences de pré-calcul par transition Plus on pré-calcul de fréquences plus notre approximation est bonne mais plus celle-ci prend de mémoire.

Nombre de fils On le prend égal à 2 car cela permet de réutiliser le plus possible les contributions lors de l'étape de pré-calcul.

4 Hypothèses physiques

Les deux méthodes prennent en compte une troncature des raies. Soit pour une raie $h_{a,\nu,j}$ de fréquence centrale $\nu_{c,j}$, si $|\nu - \nu_{c,j}| > 25 \text{ cm}^{-1}$, alors $h_{a,\nu,j} = 0$. La méthode de réduction de la variance permet un calcul à pression, concentration et température variable. Pour la méthode des clusters, la température est fixe et égale à $296K$. Dans un premier temps, la méthode des clusters ne fonctionnait que pour des fréquences différentes. Une interpolation a été mise en place pour un calcul à différentes pressions.

Généralisation à pression hétérogène On veut maintenant échantillonner dans un environnement où la pression n'est pas constante : ce n'est pas trivial car les pré-calculs sont uniquement valables pour une pression unique. L'approche que l'on a adoptée consiste à pré-calculer la contribution de chaque cluster à plusieurs pressions et à interpoler entre ces contributions pré-calculées lors de l'échantillonnage. Il nous faut aussi choisir une méthode d'interpolation. On a implémenté deux méthodes : une interpolation linéaire et une interpolation en $\frac{1}{P}$. Selon la situation, l'une ou l'autre de ces méthodes est plus avantageuse.

Nous pouvons nous convaincre de la précision de l'interpolation en considérant le calcul ci-dessous. Il s'agit d'une estimation statistique du coefficient d'absorption en fonction de la pression pour des fréquences distinctes, cela en utilisant la méthode des clusters. Dans les cas où le coefficient d'absorption varie trop subitement pour un faible changement de pression, la méthode d'interpolation n'est pas assez précise. Nous verrons par la suite que cela peut entraîner des fausses estimations dans des calculs de transfert.

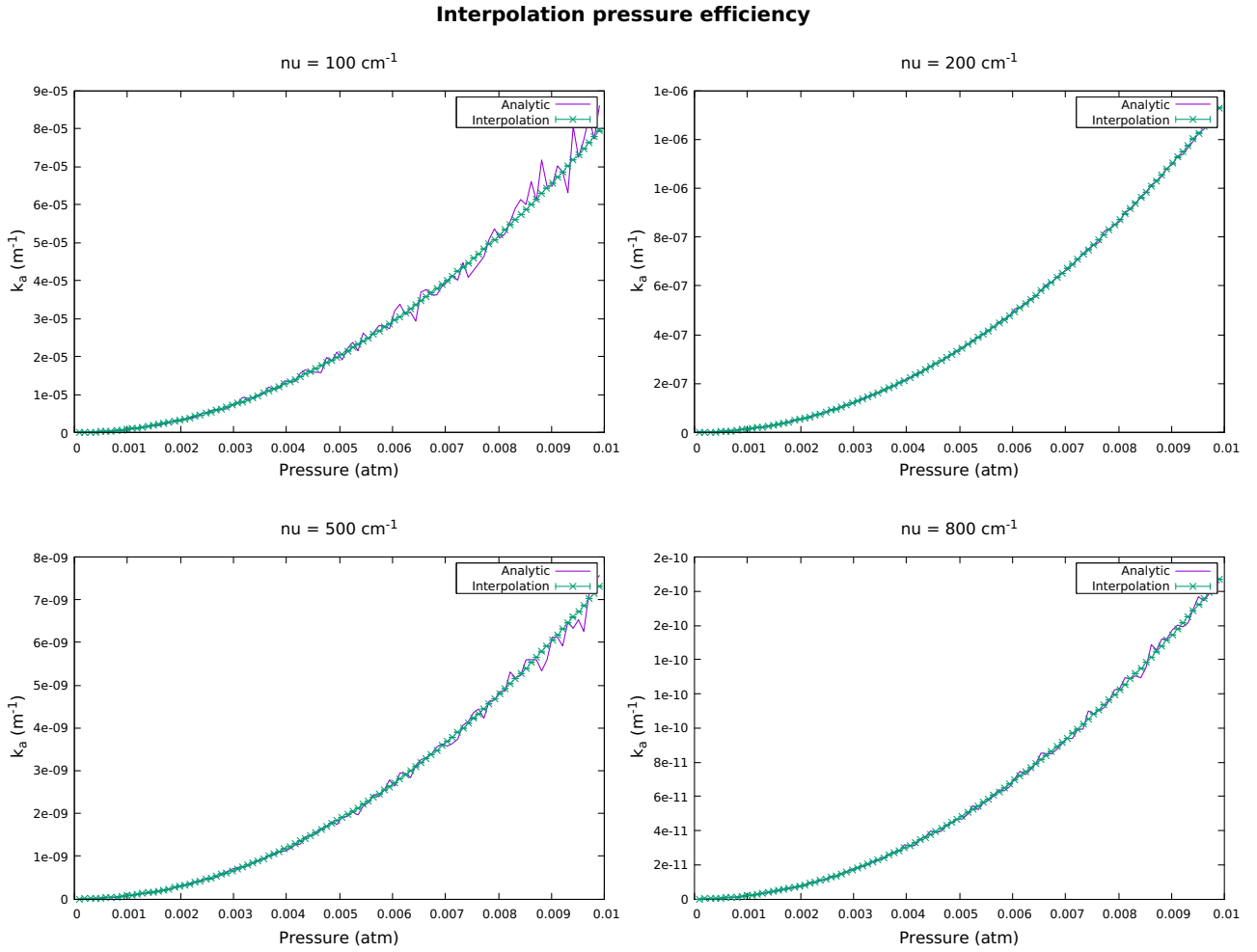


FIGURE 1 – Estimation du coefficient d’absorption par la méthode des clusters. Les quatre graphiques représentent la variation de ka, ν en fonction de la pression et pour $\nu = [100, 200, 500, 800]$ en cm^{-1} . Le gaz considéré est constitué de molécules d’eau, à la température $T = 296\text{K}$, et à la concentration $\chi_{\text{H}_2\text{O}} = 2e-4$.

Généralisation à plusieurs espèces et concentration variable Nous remarquons, dans l’expression du coefficient d’absorption, que la concentration $\chi(\mathbf{x})$ impacte deux facteurs dans l’expression de l’absorption d’une transition : la densité $\rho(i, \mathbf{x})$ et la largeur $\gamma(i, \mathbf{x})$.

On a $\gamma(i, \mathbf{x}) = \left(\frac{T_{ref}}{T(\mathbf{x})}\right)^{n_{air}(i)} (\gamma_{self}(i)P_s(\mathbf{x}) + \gamma_{air}(i)(P(\mathbf{x}) - P_s(\mathbf{x})))$. On fait le choix de négliger la variation de γ due à la concentration lors de l’échantillonnage. On fait donc l’approximation $\gamma(i, \mathbf{x}) \approx \left(\frac{T_{ref}}{T(\mathbf{x})}\right)^{n_{air}(i)} (\gamma_{air}(i)P(\mathbf{x}))$. Cette approximation fonctionne très bien dans beaucoup de cas (ceux que l’on a rencontrés jusque là) dans lesquels $\chi(i, \mathbf{x}) \ll 1$ et donc $P_s(\mathbf{x}) \ll P(\mathbf{x})$.

Pour la variation de densité, on peut résoudre le problème sans faire d’approximation. En effet, la densité est une propriété commune à toutes les transitions d’une même espèce. On va donc isoler les espèces dans l’arbre en imposant que les clusters du premier niveau de l’arbre correspondent aux différentes espèces. Lors de l’échantillonnage, on commence par choisir une espèce en multipliant la contribution pré-calculée par la densité. Ensuite, on continue à descendre dans l’arbre, mais on n’a plus à se préoccuper de la densité car elle est la même pour toutes les transitions de tous les clusters candidats.

Cette généralisation est à implémenter et il nous faudra analyser sa précision et variance.

5 Cas test 1 : calcul du coefficient d'absorption

Un calcul fondamental est d'estimer le coefficient d'absorption pour une fréquence donnée, soit :

$$k_{a,\nu} = \sum_{j=1}^{Nt} h_{a,\nu,j} = \sum_{j=1}^{Nt} P_{a,\nu,J}(j) \frac{h_{a,\nu,j}}{P_{a,\nu,J}(j)} \quad (14)$$

Interpolation pressure efficiency

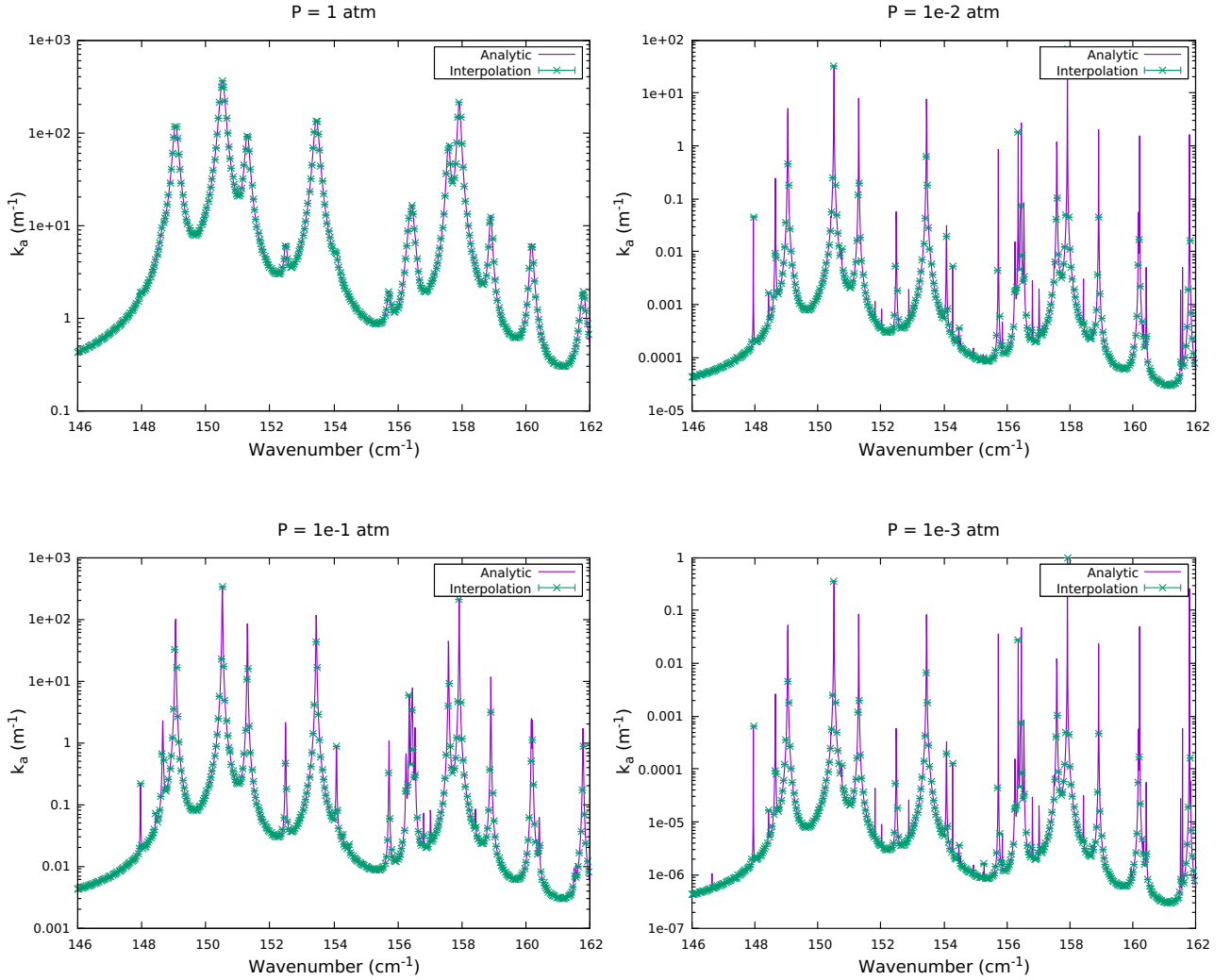


FIGURE 2 – Calcul du coefficient d'absorption en fonction de la fréquence. Le gaz considéré est constitué de molécules d'eau pour $P = 1 \text{ atm}$, $T = 296K$ et de concentration $\chi_{H_2O} = 1.8e-2$. Les résultats obtenus par la méthode des clusters (points verts), sont comparés à la valeur analytique en violet pour différentes pressions.

A partir de l'écart-type Monte-Carlo, nous pouvons estimer :

- L'erreur relative, définie comme le rapport de l'écart-type sur la grandeur estimée :

$$e(P) = \frac{s(P)}{P}. \quad (15)$$

- Le nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur relative de 1% est obtenue par :

$$Nmc_{1\%} = Nmc \times \left(\frac{e(P)}{1\%} \right)^2. \quad (16)$$

- le temps de calcul nécessaire pour obtenir une erreur relative de 1% est obtenue par :

$$t_{1\%} = t \times \left(\frac{e(P)}{1\%} \right)^2. \quad (17)$$

Pour les deux méthodes, nous calculons et traçons en fonction de la fréquence $Nmc_{1\%}$. Par la suite, nous nommerons cluster la méthode des clusters hiérarchiques. Les deux possibilités pour la réduction de variance sont Lorentz pour un choix des intervalles selon Lorentz uniquement et Lorentz intensity le choix de l'intervalle avec la contribution des intensités.

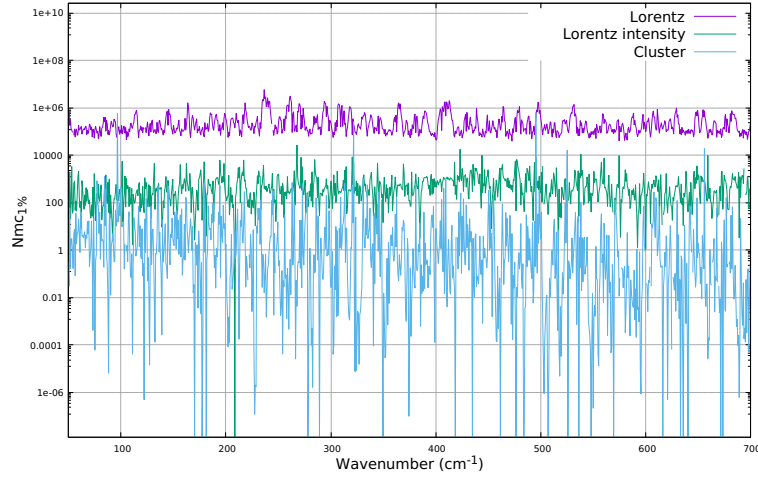


FIGURE 3 – Nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur de 1% en fonction de la fréquence. Le gaz considéré est constitué de molécules d'eau pour $P = 1 \text{ atm}$, $T = 296K$ et de concentration $\chi_{H_2O} = 2e-4$. En bleu la méthode est celle des clusters hiérarchiques. Les autres courbes représentent la réduction de la variance, en violet celle de Lorentz et en vert Lorentz intensity.

Dans ce cas, la méthode des clusters est très nettement avantageuse. Dans la majorité des cas, il faut tout au plus entre 1 et 100 réalisations Monte-Carlo pour obtenir une erreur de 1%. Cependant, il est plus pertinent de regarder le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur de 1%. En effet, si la méthode réduit la variance considérablement mais que le temps de calcul correspondant est trop élevée, alors cette méthode sera à écarter.

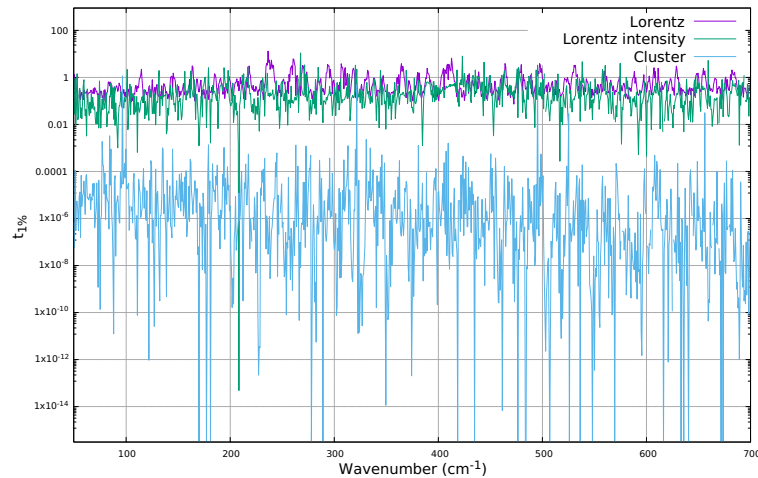


FIGURE 4 – Temps de calcul nécessaire pour obtenir une erreur de 1% en fonction de la fréquence. Le gaz considéré est constitué de molécules d'eau pour $P = 1 \text{ atm}$, $T = 296K$ et de concentration $\chi_{H_2O} = 2e-4$. En bleu, la méthode est celle des clusters hiérarchiques. Les autres courbes représentent la réduction de la variance, en violet celle de Lorentz et en vert Lorentz intensity.

Après analyse du temps $t_{1\%}$, il est indéniable que la méthode des clusters est plus rapide que celle de réduction de la variance.

6 Cas test 2 : calcul de flux

6.1 Expression intégrale

Le flux est défini comme étant la quantité de photons traversant la surface S d'un volume géométrique Ω . Il peut être calculé selon :

$$\Phi(V \rightarrow S) = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \int_{4\pi} d\omega \int_0^{+\infty} d\nu k_{a,\nu}(\mathbf{x}) L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x})) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\nu}(\mathbf{x}) dl'\right) \quad (18)$$

Pour chaque élément du volume et dans chaque direction il nous faut calculer les contribution du coefficient d'absorption multiplié par la luminance d'équilibre et ce à toutes les fréquences. Le terme en exponentiel rend compte de l'atténuation de Beer-Lambert du point considéré au point de la surface le plus proche.

La luminance d'équilibre s'exprime par :

$$L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x})) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T(\mathbf{x})}\right) - 1} \quad (19)$$

Avec :

$c = 299\,792\,458 \text{ m.s}^{-1}$ est la vitesse de la lumière dans le vide.

$h = 6.6260 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ est la constante de Planck.

$k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$ est la constante de Boltzmann.

$\sigma = 5.6703 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$ est la constante de Stefan-Boltzmann.

Le coefficient d'absorption est la somme de chaque transition, i , des raies, $h_{a,\nu,i}$ et N_t est le nombre total de transitions :

$$k_{a,\nu}(\mathbf{x}) = \sum_i^{N_t} h_{a,\nu,i}(\mathbf{x}) = \sum_i^{N_t} \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x})) f_l(\nu - \nu_{c,i} ; \gamma_{c,i}) \quad (20)$$

Ainsi, il est possible d'écrire :

$$\Phi(V \rightarrow S) = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \int_{4\pi} d\omega \int_0^{+\infty} d\nu \sum_i h_{a,\nu,i}(\mathbf{x}) L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x})) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\nu}(\mathbf{x}) dl'\right) \quad (21)$$

$$= \int_{\Omega} d\mathbf{x} \int_{4\pi} d\omega \sum_i \int_0^{+\infty} d\nu h_{a,\nu,i}(\mathbf{x}) L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x})) \exp\left(-\int_0^l k_{a,\nu}(\mathbf{x}) dl'\right). \quad (22)$$

Nous introduisons la valeur de la luminance d'équilibre pour chaque transition en leur fréquence de centre de raie respectif, $L_{\nu_{c_i}}^{eq}(T(\mathbf{x}))$:

$$\Phi(V \rightarrow S) = \int_{\Omega} d\mathbf{x} \int_{4\pi} d\omega \sum_i \int_0^{+\infty} d\nu h_{a,\nu,i}(\mathbf{x}) L_{\nu_{c_i}}^{eq}(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu_{c_i}}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \exp\left(-\int_0^l k_{a,\nu}(\mathbf{x}) dl'\right) \quad (23)$$

Aussi, du fait de la normalisation de la lorentzienne, nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} h_{a,\nu,i}(\mathbf{x}) d\nu &= \int_0^{+\infty} \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x})) f_l(\nu - \nu_{c,i}; \gamma_{c,i}) d\nu \\ &= \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x})). \end{aligned} \quad (24)$$

Nous utilisons l'équation précédente pour obtenir une densité de probabilité sur les fréquences :

$$\begin{aligned} \Phi(V \rightarrow S) &= \int_{\Omega} d\mathbf{x} \int_{4\pi} d\boldsymbol{\omega} \sum_i \int_0^{+\infty} d\nu L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x})) \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\int_{-\infty}^{+\infty} h_{a,i,\nu'}(\mathbf{x}) d\nu'} \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \\ &\times \exp\left(-\int_0^l k_{a,\nu}(\mathbf{x}) dl'\right). \end{aligned} \quad (25)$$

De plus, nous normalisons le terme $L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x}))$:

$$\begin{aligned} \Phi(V \rightarrow S) &= \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{1}{V} \int \frac{1}{4\pi} d\boldsymbol{\omega} \sum_i \frac{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x}))}{\sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x}))} \int_0^{+\infty} d\nu \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\int h_{a,i,\nu'}(\mathbf{x}) d\nu'} \\ &\times 4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \\ &\times \exp\left(-\int_0^l k_{a,\nu}(\mathbf{x}) dl'\right). \end{aligned} \quad (26)$$

Nous avons donc reformulé l'équation de départ pour avoir des densités de probabilités et probabilités pour chaque intégrale et somme. Si le milieu est inhomogène et que le coefficient d'absorption n'est pas constant dans le volume, nous faisons appel à un majorant spatial de celui-ci, $\hat{k}_{a,\nu}$; avec $\hat{k}_{a,\nu} = k_{a,\nu}(\mathbf{x}) + k_{n,\nu}(\mathbf{x})$. Avec ce choix nous avons :

$$\begin{aligned} \Phi(V \rightarrow S) &= \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{1}{V} \int \frac{1}{4\pi} d\boldsymbol{\omega} \sum_i \frac{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x}))}{\sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x}))} \int_0^{+\infty} d\nu \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\int h_{a,i,\nu'}(\mathbf{x}) d\nu'} \\ &\int_0^{+\infty} dl \hat{k}_{a,\nu} \exp\left(-\hat{k}_{a,\nu}(\mathbf{x}) l\right) \times \left\{ \right. \\ &\left[\frac{k_{a,\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega})}{\hat{k}_{a,\nu}} [0] + \left(1 - \frac{k_{a,\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega})}{\hat{k}_{a,\nu}}\right) [\tau_{\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_s)] \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \in \Omega) \\ &+ \left[4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \notin \Omega) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

$$+ \left[4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \notin \Omega) \left. \right\}. \quad (28)$$

$\tau_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)$ étant la transmissivité entre une position \mathbf{x} et la position sur la surface du volume le plus proche, \mathbf{x}_s , dans la direction $\boldsymbol{\omega}$. Le coefficient d'absorption étant la somme sur toutes les transitions des raies, il est possible d'introduire un majorant pour chacune de celles-ci.

$$\hat{k}_{a,\nu} = \sum_{k=1}^{N_t} \hat{h}_{a,\nu,k}. \quad (29)$$

Donc :

$$\begin{aligned} \Phi(V \rightarrow S) = & \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{1}{V} \int \frac{1}{4\pi} d\boldsymbol{\omega} \sum_i \frac{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x}))}{\sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x}))} \int_0^{+\infty} d\nu \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\int h_{a,i,\nu'}(\mathbf{x}) d\nu'} \\ & \int_0^{+\infty} dl \hat{k}_{a,\nu} \exp(-\hat{k}_{a,\nu}(\mathbf{x}) l) \left\{ \right. \\ & \sum_{k=1}^{N_t} \left[\frac{h_{a,\nu,k}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega})}{\hat{k}_{a,\nu}} [0] + \left(\frac{\hat{h}_{a,k,\nu} - h_{a,\nu,k}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega})}{\hat{k}_{a,\nu}} \right) [\tau_{\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_s)] \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \in \Omega) \\ & \left. + \left[4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \notin \Omega) \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

La probabilité de choisir une transition k est introduite :

$$P_K(k) = \frac{\hat{h}_{a,\nu,k}}{\hat{k}_{a,\nu}} \Rightarrow \hat{k}_{a,\nu} = \frac{\hat{h}_{a,\nu,k}}{P_K(k)}. \quad (31)$$

Ici $P_k(k)$ est formulé pour pouvoir faire apparaître l'échantillonnage de transition. Il sera nécessaire de faire un choix pour calculer cette probabilité (selon la méthode de Eymet, Galtier ou Wilhem).

Ainsi :

$$\begin{aligned} \Phi(V \rightarrow S) = & \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{1}{V} \int d\boldsymbol{\omega} \frac{1}{4\pi} \sum_i \frac{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x}))}{\sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x}))} \int_0^{+\infty} d\nu \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\int h_{a,i,\nu'}(\mathbf{x}) d\nu'} \\ & \int_0^{+\infty} dl \hat{k}_{a,\nu} \exp(-\hat{k}_{a,\nu}(\mathbf{x}) l) \left\{ \right. \\ & \sum_{k=1}^{N_t} P_K(k) \left[\frac{h_{a,\nu,k}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega})}{\hat{h}_{a,k,\nu}} [0] + \left(1 - \frac{h_{a,\nu,k}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega})}{\hat{h}_{a,k,\nu}} \right) [\tau_{\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_s)] \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \in \Omega) \\ & \left. + \left[4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \notin \Omega) \right\}. \end{aligned} \quad (32)$$

La probabilité discrète de choisir une transition, i , est donnée par :

$$P_I(i) = \frac{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho S_i}{\sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho S_j}. \quad (33)$$

Le choix de cette transition nous permet d'échantillonner une fréquence selon la pdf :

$$p_{Nu}(\nu) = \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\int_0^{+\infty} h_{a,i,\nu'}(\mathbf{x})} = \frac{h_{a,\nu,i}(\mathbf{x})}{\rho_i(\mathbf{x}) S_i(T(\mathbf{x}))}. \quad (34)$$

La densité de probabilité d'échantillonner une longueur l est donnée par :

$$p_{\mathcal{L}}(l) = \hat{k}_{a,\nu} \exp(-\hat{k}_{a,\nu}(\mathbf{x}) l). \quad (35)$$

La probabilité qu'une absorption ait lieu est donnée par $P_{a,\nu,k}$. $1 - P_{a,\nu,k}$ donne la probabilité que la collision soit une collision nulle, ce qui se traduit par la continuité du chemin dans la même direction.

$$P_{a,\nu,k} = \frac{h_{a,k,\nu}}{\hat{h}_{a,\nu,k}} = \frac{h_{a,k,\nu}}{\hat{k}_{a,\nu} P_K(k)}. \quad (36)$$

Finalement, le flux est donné par :

$$\begin{aligned} \Phi(V \rightarrow S) = & \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{1}{V} \int d\boldsymbol{\omega} \frac{1}{4\pi} \sum_i P_i(i) \int_0^{+\infty} d\nu p_{Nu}(\nu) \\ & \int_0^{+\infty} dl p_{\mathcal{L}}(l) \left\{ \sum_{k=1}^{N_t} P_K(k) \left[P_{a,\nu,k}[0] + (1 - P_{a,\nu,k}) [\tau_{\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_s)] \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \in \Omega) \right. \\ & \left. + \left[4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \notin \Omega) \right\}. \end{aligned}$$

La transmissivité entre deux points est donnée par :

$$\begin{aligned} \tau_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s) = & \int_0^{+\infty} dl p_{\mathcal{L}}(l) \left\{ \sum_{k=1}^{N_t} P_K(k) \left[P_{a,\nu,k}[0] + (1 - P_{a,\nu,k}) [\tau_{\nu}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_s)] \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \in \Omega) \right. \\ & \left. + \left[4\pi V \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j(\mathbf{x}) S_j(T(\mathbf{x})) \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} \right] \mathcal{H}(\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega} \notin \Omega) \right\}. \end{aligned}$$

L'algorithme s'interprète comme :

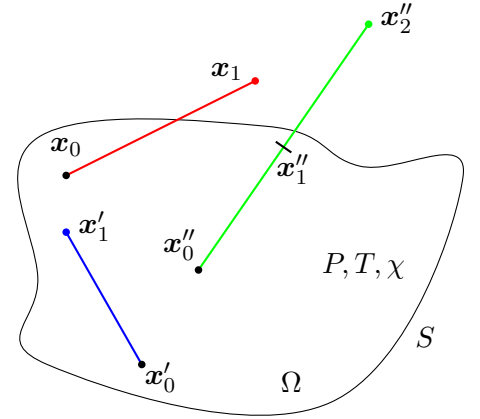
1. On échantillonne uniformément une position \mathbf{x} dans le volume.
2. On échantillonne uniformément une direction $\boldsymbol{\omega}$ selon l'angle solide.
3. On échantillonne une transition i selon $P_I(i)$.
4. On échantillonne une fréquence ν selon $p_{Nu}(\nu)$.
5. On échantillonne une longueur l selon $p_{\mathcal{L}}(l)$.

(a) Si la nouvelle position, $\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}$, est dans le volume, on choisit une transition k , selon $P_K(k)$:

- i. Probabilité d'absorption en $P_{a,\nu,k}$. On retient zéro.
- ii. Probabilité de collision nulle en $1 - P_{a,\nu,k}$. On reboucle en 5.

(b) Si la nouvelle position, $\mathbf{x} - l\boldsymbol{\omega}$, n'est pas dans le volume, on retient W .

$$W = \sum_j L_{\nu c_j}^{eq}(T(\mathbf{x})) \rho_j \frac{L_{\nu}^{eq}(T(\mathbf{x}))}{L_{\nu c_i}^{eq}(T(\mathbf{x}))} 4\pi V$$



(a) Représentation du Volume Ω avec les chemins d'absorption. Le segment rouge correspond à un chemin sortant du volume non absorbé. Le chemin bleu correspond à un chemin avec absorption dans le volume. Le segment vert est composé de deux segments : une collision nulle advient en \mathbf{x}''_1 , s'ensuit alors une continuité du chemin dans la même direction qui s'achève ici avec une sortie du volume.

6.2 Résultats

Un cas simple est de prendre le volume comme étant une sphère avec P, T, χ constants. Dans ce cas, nous pouvons prendre $\hat{k}_{a,\nu} = k_{a,\nu}$ et il n'y aura pas de collisions nulles.

Dans ces conditions, les deux méthodes donnent pour 1600 réalisations :

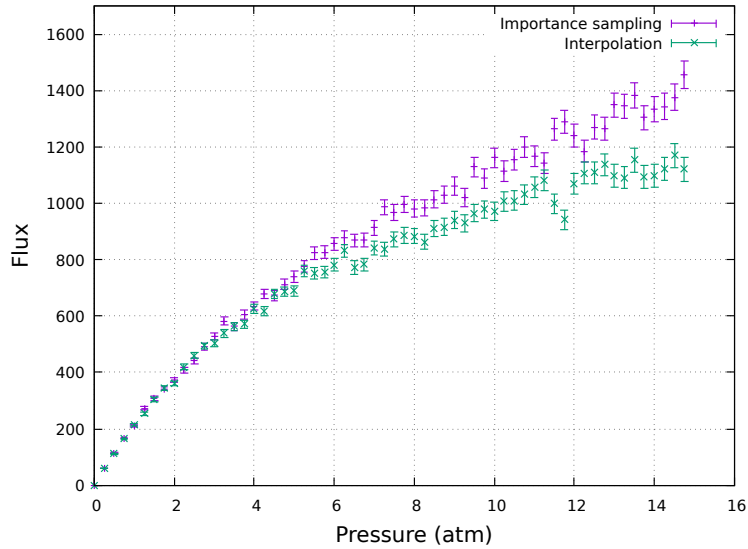


FIGURE 6 – Valeur du flux d'une sphère de 10 mètres de rayon . Le gaz est constitué de molécules d'eau à $296K$ et de concentration $\chi_{H_2O} = 2e-4$. Pour différentes pressions, la figure affiche les résultats obtenus par la méthode des clusters, notée interpolation en vert et par celle de réduction de la variance (Lorentz intensity), notée importance sampling en violet.

Plus la pression augmente et plus la variance des deux méthodes augmente. Nous constatons différentes tendances pour nos deux calculs. Cette différence pourrait s'expliquer par l'interpolation des pressions qui ne prend pas bien en compte les variations de $k_{a,\nu}$.

Le nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur relative de 1% est pour les deux méthodes :

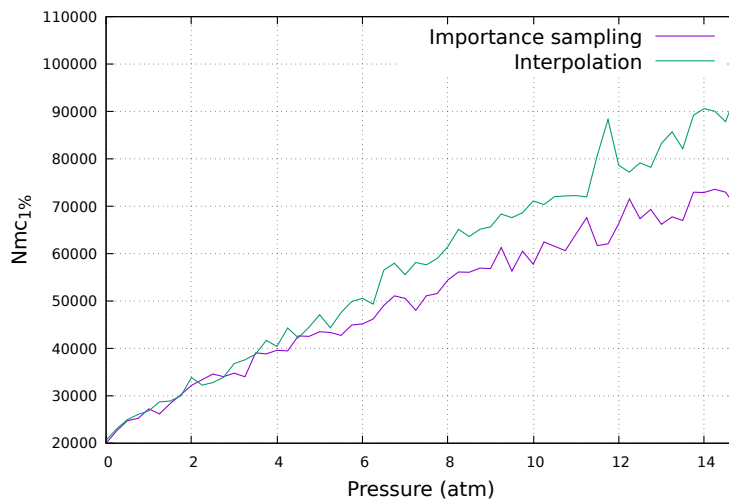


FIGURE 7 – Nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur de 1% en fonction de la pression . Le gaz est constitué de molécules d'eau à $296K$ et de concentration $\chi_{H_2O} = 2e - 4$. La figure affiche les résultats obtenus par la méthode des clusters, notée interpolation en vert et par celle de réduction de la variance, notée importance sampling en violet.

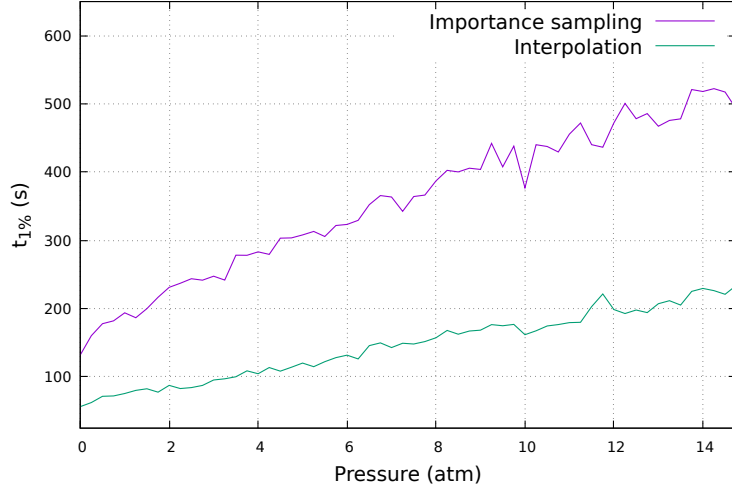


FIGURE 8 – Temps nécessaire pour obtenir une erreur de 1% en fonction de la pression. Le gaz est constitué de molécules d'eau à $296K$ et de concentration $\chi_{H_2O} = 2e - 4$. Pour différentes pressions, la figure affiche les résultats obtenus par la méthode des clusters, notée interpolation en vert et par celle de réduction de la variance, notée importance sampling en violet.

6.3 Interprétation

Dans le cas du calcul de flux, la méthode de réduction de variance offre l'avantage de fonctionner pour n'importe quelle pression, température et concentration. La méthode des clusters nécessite un mapping des pressions et il est nécessaire de considérer plus de calculs pour conclure sur son efficacité à estimer une valeur correcte. L'interpolation ne fonctionne-t-elle pas bien pour des pressions supérieures à 1 ? Au niveau du nombre de réalisations à effectuer pour avoir une erreur relative de 1%, il semblerait que la méthode des clusters nécessite plus de réalisations. Cela nous semble curieux car pour une seule réalisation l'erreur était déjà très faible. Il est probable que le mapping des pressions entraîne une variance forte. Ou alors qu'il existe des réalisations par la méthode des clusters qui entraînent une augmentation soudaine de la variance (événements rares).

Pour le temps de calcul à 1%, il est certain que la méthode des clusters offre des avantages probants. Plus de cas sont à estimer pour se prononcer définitivement mais une piste à suivre est que la prise en compte du changement de pression n'est pas suffisamment bien implémentée (ou alors trop peu de valeurs pré-calculées dans mon fichier ?).

7 Cas test 3 : calcul de luminance monochromatique

Il s'agit d'un calcul de transfert radiatif monochromatique pour exclure l'échantillonnage fréquentiel. La température étant fixée et le problème d'interpolation des pressions vont ajouter des variances importantes au problème voire le fausser. Par simplicité, admettons la formulation ci-dessous :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \int_0^{+\infty} \hat{k}_\nu \exp(-\hat{k}_\nu \sigma) d\sigma \left\{ \sum_{j=1}^{N_t} P_J(j) [P_{a,\nu,j} L_\nu^{eq}(\mathbf{x} - \sigma \mathbf{u}) + (1 - P_{a,\nu,j}) L_\nu(\mathbf{x} - \sigma \mathbf{u})] \right. \\ \left. \mathcal{H}(\mathbf{x} - \sigma \mathbf{u} \in v) + L_\nu^{eq}(\mathbf{x}_{int}) \mathcal{H}(\mathbf{x} - \sigma \mathbf{u} \notin v) \right\}. \quad (37)$$

L'algorithme de Monte-Carlo revient à échantillonner une distance de collision selon la pdf $\exp(-k_\nu \sigma)$. Si la position est inférieure à celle du sol, l'algorithme s'arrête. Ensuite, nous choisissons une transition moléculaire selon $P_J(j)$. Et enfin, nous déterminons si la collision est une collision nulle ou une

absorption. Si c'est une collision nulle, nous recommençons l'algorithme à la position échantillonnée, sinon nous le stoppons.

Une mise en œuvre de cet algorithme a été réalisée pour une atmosphère terrestre en Mid-Latitude-Summer. L'atmosphère est discrétisée en couches, chacune ayant une valeur de température, pression et concentration en CO_2 , H_2O , O_3 .

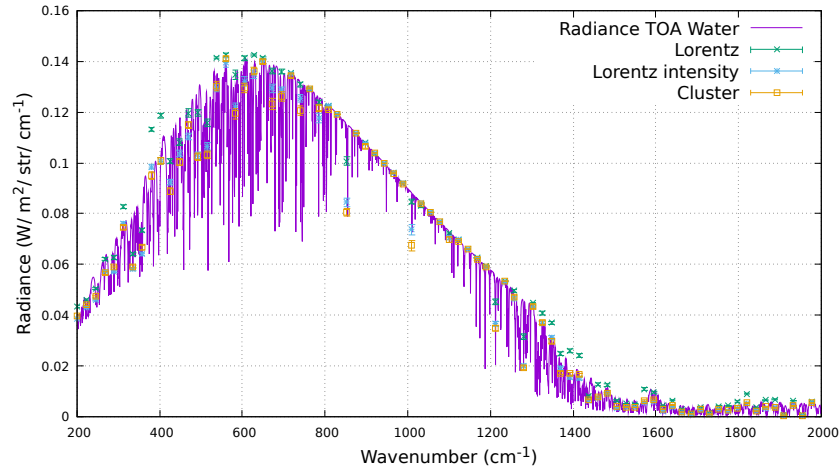


FIGURE 9 – Échantillonnage statistique de la luminance monochromatique 1D en MLS (Mid-Latitude-Summer) à 17km d'altitude. La courbe violette représente le résultat analytique. Les points en jaune représentent l'estimation de la luminance pour un nombre de réalisations données selon la méthode des clusters. Les points verts et bleus selon la méthode de réduction de la variance.

Au niveau des grandeurs 1% nous avons :

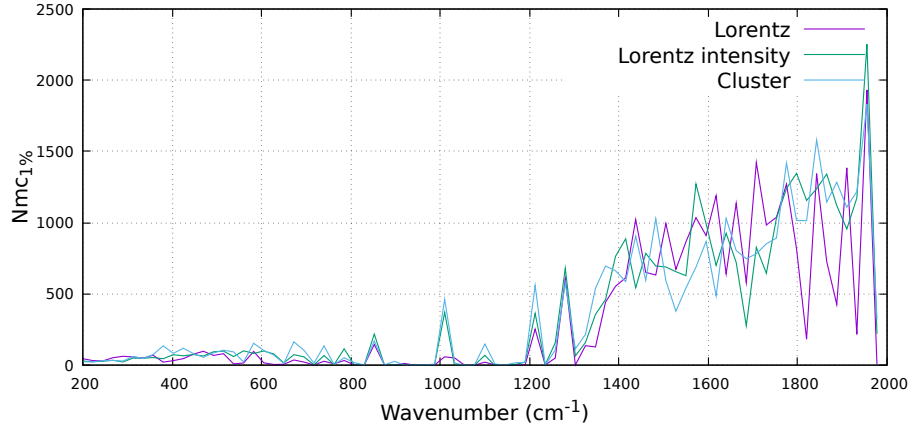


FIGURE 10 – Nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur de 1% en fonction de la fréquence.

Nous constatons encore que le temps pour les clusters est nettement inférieur.

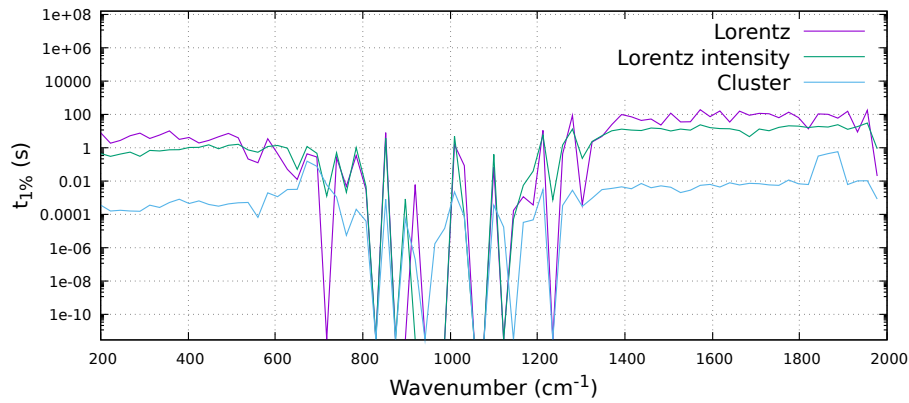


FIGURE 11 – Nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une erreur de 1% en fonction de la fréquence.

8 Conclusion et perspectives

Dans le cas du calcul du coefficient d'absorption monochromatique pour une seule espèce, il est souhaitable d'utiliser la méthode des clusters, uniquement si on est à pression calculée par la simulation et non interpolée.

D'après nos calculs de flux, il semblerait que ce soit l'interpolation des pressions qui pose problème et cause des variances. Il serait utile d'envisager une autre méthode plus précise ou alors de pré-calculer un nombre très important de pression.

De nombreuses pistes de recherches s'ouvrent à nous :

- Calcul coefficient d'absorption pour plusieurs espèces.
- Milieu hétérogène avec plusieurs concentrations d'espèces et pressions.
- Pour la cas de l'atmosphère, se convaincre qu' échantillonner une transition comme si la température était fixe, ne cause pas une variance trop grande.

Références

- [Douglas et Peucker, 1973] DOUGLAS, D. H. et PEUCKER, T. K. (1973). Algorithms for the reduction of the number of points required to represent a digitized line or its caricature. *Cartographica : the international journal for geographic information and geovisualization*, 10(2):112–122.
- [Galtier, 2014] GALTIER, M. (2014). *A statistical approach of radiative transfer in heterogeneous and gaseous media : from molecular transitions sampling to the computation of radiative observables*. Theses, Ecole des Mines d’Albi-Carmaux.
- [Hartmann et al., 2008] HARTMANN, J., BOULET, C. et ROBERT, D. (2008). *Collisional Effects on Molecular Spectra*. Elsevier, Amsterdam.
- [Jacquinet-Husson et al., 2011] JACQUINET-HUSSON, N., CREPEAU, L., ARMANTE, R., BOUTAMMINE, C., CHÉDIN, A., SCOTT, N., CREVOISIER, C., CAPELLE, V., BOONE, C., POULET-CROVISIER, N., BARBE, A., CAMPARGUE, A., BENNER], D. C., BENILAN, Y., BÉZARD, B., BOUDON, V., BROWN, L., COUDERT, L., COUSTENIS, A., DANA, V., DEVI, V., FALLY, S., FAYT, A., FLAUD, J.-M., GOLDMAN, A., HERMAN, M., HARRIS, G., JACQUEMART, D., JOLLY, A., KLEINER, I., KLEINBÖHL, A., KWABIA-TCHANA, F., LAVRENTIEVA, N., LACOME, N., XU, L.-H., LYULIN, O., MANDIN, J.-Y., MAKI, A., MIKHAILENKO, S., MILLER, C., MISHINA, T., MOAZZEN-AHMADI, N., MÜLLER, H., NIKITIN, A., ORPHAL, J., PEREVALOV, V., PERRIN, A., PETKIE, D., PREDOI-CROSS, A., RINSLAND, C., REMEDIOS, J., ROTGER, M., SMITH, M., SUNG, K., TASHKUN, S., TENNYSON, J., TOTH, R., VANDAELE, A.-C. et AUWERA], J. V. (2011). The 2009 edition of the geisa spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(15):2395 – 2445.
- [Rothman et al., 2010] ROTHMAN, L., GORDON, I., BARBER, R., DOTHE, H., GAMACHE, R., GOLDMAN, A., PEREVALOV, V., TASHKUN, S. et TENNYSON, J. (2010). Hitemp, the high-temperature molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(15):2139 – 2150. XVIth Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2009).
- [Rothman et al., 1987] ROTHMAN, L. S., GAMACHE, R. R., GOLDMAN, A., BROWN, L. R., TOTH, R. A., PICKETT, H. M., POYNTER, R. L., FLAUD, J.-M., CAMY-PEYRET, C., BARBE, A., HUSSON, N., RINSLAND, C. P. et SMITH, M. A. H. (1987). The hitran database : 1986 edition. *Appl. Opt.*, 26(19):4058–4097.
- [Tashkun et Perevalov, 2011] TASHKUN, S. et PEREVALOV, V. (2011). CDS-4000 : High-resolution, high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(9):1403–1410.