Méthode de Monte-Carlo par Échanges pour le calcul des bilans radiatif au sein d'une cavité 2D remplie de gaz

Dufresne J.L., Fournier R., Grandpeix J.Y.
Laboratoire de Météorologie Dynamique
CNRS/UPMC, Boite 99, F-75252 Paris Cedex 05

17 janvier 1997

Résumé

Nous présentons une formulation basée sur le respect du principe de réciprocité des rayons lumineux, dans laquelle la grandeur physique essentielle est la puissance nette échangée entre les différentes parties du système. La méthode de Monte-Carlo développée, directement basée sur cette formulation, possède des avantages numériques majeures. Elle a été appliqué au calcul du bilan radiatif dans une cavité bidimensionelle remplie de gaz, avec un maillage très irrégulier et pour une large gamme d'épaisseurs optiques.

1 Introduction

Pour la simulation numérique des échanges de chaleur par rayonnement infrarouge, l'intégration par des méthodes de Monte-Carlo (MMC) possède des avantages et des inconvénients bien identifiés [1]. Les méthodes de Monte-Carlo Analogues (MMCA) habituellement utilisées permettent une bonne compréhension des phénomènes physiques de part l'analogie directe entre les étapes essentielles du calcul et les processus physiques d'émission, transmission, réflexion, diffusion et absorption du rayonnement. Elles sont particulièrement bien adaptées au traitement de problèmes complexes et n'imposent pas en elles même de simplification particulière. Les inconvénients majeurs sont le coût numérique souvent très élevé et la difficulté, voire l'impossibilité de respecter le second principe de la thermodynamique. Pour les milieux semi-transparents (MST), ceci se traduit par l'impossibilité d'utiliser un maillage très irrégulier et par un calcul particulièrement inefficace lorsque le milieux est soit optiquement très mince, soit au contraire optiquement très épais. Nous avons pu établir que la cause essentielle de ces difficultés est le non respect du principe de réciprocité, principe que les MMCA ne satisfont que de façon statistique, c.à.d. lorsque le nombre de réalisations tend vers l'infini. Dans un cas géométrique simple, nous avons proposé une formulation qui garantit de façon intrinsèque ce principe de réciprocité et avons développé une MMC adaptée [2]. Toutefois, l'approche adopté dans ce précédent travail ne peut être tranposé aisément à des géométries bi ou tridimensionelle; c'est l'objet de cette communication. Pour cela, nous faisons tout d'abord le lien entre la formulation "classique" et celle en puissance nette échangée (paragr. 2), puis montrons paragr. 3 comment les MMCA peuvent être modifiées et rendues beaucoup plus performantes.

2 Formulation en Puissance Nette Échangée

Nous utilisons une notation condensée adaptée aux méthodes de Monte-Carlo Analogues. Nous nous limitons à un MST sans diffusion confiné entre des parois noires. Soit $\Gamma(V_i, V_j)$ l'ensemble des chemins optiques dont la première extrémité appartient à un volume V_i et la seconde à un volume V_j. La puissance $Q_\nu(V_i, V_j)$ du rayonnement monochromatique émis par V_i et absorbé par V_j peut s'écrire en effectuant une intégration sur tous les chemins $\gamma \in \Gamma(V_i, V_j)$:

$$Q_\nu(V_i, V_j) = \int_{\Gamma(V_i,V_j)} -L_\nu^o(\vec{x_\gamma}). \left| \frac{\partial^2 \tau_{\nu,\gamma}}{\partial s_{x_\gamma} \partial s_{y_\gamma}} \right| d\gamma \tag{1}$$

avec :
$L_\nu^o(\vec{x})$: luminance du corps noir à la température du point $\vec{x}$
$\vec{x_\gamma}, \vec{y_\gamma}$: vecteurs des coordonnés de la première et de la seconde extrémités du chemin optique γ, respectivement dans les volumes V_i et V_j
$s_{x_\gamma}, s_{y_\gamma}$: abscisse curviligne de $\vec{x_\gamma}$ et $\vec{y_\gamma}$ le long du chemin optique γ
$\tau_{\nu,\gamma}$: transmissivité monochromatique de γ : $\tau_{\nu,\gamma} = 1 - \exp(-\int_{s_{x_\gamma}}^{s_{y_\gamma}} K_\nu(s).ds)$
K_ν : coefficient d'absorbtion monochromatique
On écrit de même la puissance $Q_\nu(V_j, V_i)$ du rayonnement émis par V_j et absorbé par V_i. Le principe de réciprocité des rayons lumineux entraîne une bijection stricte entre $\Gamma(V_i, V_j)$ et $\Gamma(V_j, V_i)$: à chaque chemin $\gamma \in \Gamma(V_i, V_j)$ correspond un chemin $\gamma' \in \Gamma(V_j, V_i)$ tel que $\vec{x_{\gamma'}} = \vec{y_\gamma}$ et $\vec{y_{\gamma'}} = \vec{x_\gamma}$. Ceci nous permet d'obtenir l'expression de la **puissance nette** $\psi_\nu(V_i, V_j)$ **échangée** entre V_i et V_j :

$$\begin{aligned} \psi_\nu(V_i, V_j) &= Q_\nu(V_i, V_j) - Q_\nu(V_j, V_i) \\ &= \int_{\Gamma(V_i,V_j)} [L_\nu^o(\vec{y_\gamma}) - L_\nu^o(\vec{x_\gamma})] . \left| \frac{\partial^2 \tau_{\nu,\gamma}}{\partial s_{x_\gamma} \partial s_{y_\gamma}} \right| d\gamma \end{aligned} \tag{2}$$

La même démarche permet d'obtenir la puissance nette $\psi_\nu(V_i, S_j)$ échangée entre un volume V_i et une surface opaque S_j ainsi que la puissance nette $\psi_\nu(S_i, S_j)$ échangée entre deux surfaces opaques S_i et S_j. Le bilan radiatif d'une maille est la somme des puissances nettes échangées entre cette maille et le reste du système. Pour un volume V_i on a $\psi(V_i) = \sum_j \psi(V_i, V_j) + \sum_j \psi(V_i, S_j)$ et pour une surface S_i : $\psi(S_i) = \sum_j \psi(S_i, V_j) + \sum_j \psi(S_i, S_j)$
Les équations 1 et 2 peuvent également se mettre sous une forme plus classique:

$$Q_\nu(V_i, V_j) = \int_{V_i} \int_{V_j} -L_\nu^o(\vec{x_\gamma}) \left| \frac{\partial^2 \tau_{\nu,\gamma}}{\partial s_{x_\gamma} \partial s_{y_\gamma}} \right| .1/{D_\gamma}^2.dV_i.dV_j \tag{3}$$

$$\psi_\nu(V_i, V_j) = \int_{V_i} \int_{V_j} [L_\nu^o(\vec{y_\gamma}) - L_\nu^o(\vec{x_\gamma})] \left| \frac{\partial^2 \tau_{\nu,\gamma}}{\partial s_{x_\gamma} \partial s_{y_\gamma}} \right| .1/{D_\gamma}^2.dV_i.dV_j \tag{4}$$

avec D_γ : longueur du chemin γ

Des formulations voisines de celles présentées ici existent dans la littérature [3] [4]; néanmoins aucun de ces auteurs n'en tire profit pour développer des résolutions numériques plus efficaces.

La spécificité de la formulation en Puissance Nette Échangée a des conséquences importantes :

- le second principe de la thermodynamique est respecté quelle que soit l'erreur numérique d'intégration. En effet, dans le cas simple où i et j sont deux mailles isothermes, l'expression 2 fait clairement apparaître que le signe de la PNE est uniquement fonction de la différence de luminance du corps noir, et donc de la différence de température entre les mailles i et j.

– la précision de calcul ne se dégrade pas lorsque l'on s'approche de l'équilibre radiatif: le bilan radiatif est calculé directement et non par différence de deux grandeurs intermédiaires (les puissances émise et absorbée) entachées d'erreurs d'intégration indépendantes.

– les échanges radiatifs entre les différentes parties du système peuvent être calculés de façons indépendantes

3 Principe de l'intégration par Monte-Carlo

Les méthodes de M.C. regroupent deux approches très différentes :

1. la simulation numérique de processus stochastiques. Les fonctions aléatoires utilisées sont directement basées sur des lois physiques (émission, propagation, absorption des photons). Les MMCA appartiennent à cette approche.

2. l'estimation statistique d'intégrales multidimensionelles. Les échanges radiatifs sont exprimés sous forme intégrale et les théories statistiques servent de bases à l'estimation numérique de la valeur de l'intégrale.

L'utilisation de chemins optiques (Eqs 1,2) relève de la première approche tandis que les expressions intégrales classiques (Eqs 3,4) relèvent appartiennent à la seconde.

Pour pouvoir effectuer des calculs dans des géométries quelconques tout en utilisant la formulation en PNE, nous avons panaché ces deux approches. La simulation de processus stochastiques permet une intégration aisée, même dans le cas de géométrie complexes. Avec une telle approche, on calcule sans difficulté la puissance $Q_\nu(V_i, V_j)$ du rayonnement émis par V_i et absorbé par V_j (Eq. 1) mais on ne dispose pas à priori d'image physique permettant de calculer directement la puissance nette échangée $\psi_\nu(V_i, V_j)$ (Eq. 2). De cette approche nous retiendrons l'expression des différentes fonctions aléatoires. L'autre approche, l'estimation statistique d'intégrales, permet de définir le poids statistique qu'il faut associer à chaque réalisation: ce poids dépend directement de la fonction à intégrer et des fonctions aléatoires choisies, quelles que soient ces différentes fonctions.

Ainsi, nous nous sommes tout d'abord basé sur une MMCA, dans laquelle les paquets de photons associés aux différents chemins issus des tirages aléatoires ont un poids statistique égale à la puissance du rayonnement émis en $\vec{x_\gamma}$ et absorbé en $\vec{y_\gamma}$ (on dit que ces paquets de photons transportent de l'énergie). Ensuite nous avons développé une méthode de Monte-Carlo par Échange (MMCE) utilisant les même lois de tirages mais pour laquelle le poids statistique associé à chaque paquet de photons est maintenant proportionnel à la puissance du rayonnement **échangé** entre $\vec{x_\gamma}$ et $\vec{y_\gamma}$ [5]. Pratiquement, le schémas numérique d'intégration est inchangé; seul le terme $-L^o_\nu(\vec{x_\gamma})$ est remplacé par $[L^o_\nu(\vec{y_\gamma}) - L^o_\nu(\vec{x_\gamma})]$ et les grandeurs physiques manipulées ne sont plus des puissances émises ou absorbées mais des puissances échangées entre les différentes parties du système.

4 Application à une cavité bidimensionelle remplie de gaz

Nous avons calculé les bilans radiatifs dans une cavité bidimensionelle remplie de gaz (mélange air/dioxyde de carbone ou air/vapeur d'eau) dans le but de rechercher une explication aux résultats de mesures apparemment contradictoires obtenus dans des expériences de convection naturelle dans des pièces d'habitations [6]. La cavité, de dimension 2.5mx3m, est discrétisée en 20x20 mailles de dimensions variables. Les profils de température sont fixés d'après les résultats expérimentaux. Pour l'intégration en fréquence nous utilisons une méthode de "k-distibution" [7] sur la base du modèle statistique à bandes étroites proposé par Malkmus [8]. Pour les paramètres de ce modèle nous utilisons les valeurs calculées par le laboratoire EM2C [9]. L'intégration porte sur la position des points d'émission et d'absorbtion, la direction d'émission, la bande spectrale et le coefficient d'absorbtion [5]

D'un point de vue numérique, les avantages escomptés de part l'utilisation explicite de la formulation en PNE ont bien été observés. Le gain en temps calcul est considérable: de 3 à 5 ordres de grandeur selon l'épaisseur optique du gaz. Avec une fraction molaire de CO_2 de 330ppm et pour une précision de 5% sur les bilans radiatifs, le temps de calcul est typiquement de l'ordre d'une dizaine de minutes sur une station de travail (HP 735 ,40Mflops). Comme autres avantages de la méthode citons également la faible dépendance de ses performances vis-à-vis de l'épaisseur optique et la possibilité d'utiliser un maillage très irrégulier.

5 Conclusion

A partir d'une formulation en puissance nette échangée (PNE), nous avons développé une méthode de Monte-Carlo par Échange (MMCE) qui permet, à précision identique sur le bilan radiatif, de gagner 3 à 5 ordres de grandeur sur les temps calcul par rapport à une méthode de Monte-Carlo analogue. Cette méthode par échange permet de garantir simultanément le premier et le second principe de la thermodynamique, d'autoriser un maillage très irrégulier et de rester opérationnelle quelle que soit l'épaisseur optique du milieux. Par ailleurs la formulation en PNE amène à considérer séparément les échanges entre chacune des parties du système; le point de vue qui en découle s'est révélé particulièrement pertinent pour l'analyse des résultats. Nous avons étudiés des configurations correspondant à des expériences de convections naturelles au sein d'une pièce d'habitation (maillage 20x20, très irrégulier).

L'originalité essentielle de cette formulation réside dans le fait qu'elle contient de façon intrinsèque le principe de réciprocité des rayons lumineux.

6 Extended Abstract

In the field of radiative heat transfer simulation, the Monte Carlo method (MCM) is one name for two quite distinct types of numerical approaches. Originaly, the MCM was refered to as a method for numerical simulation of a stochastic process : by invoking a probabilistic model of the radiative exchange process and also applying Monte Carlo sampling techniques, it is possible to choose a semi-macroscopic approach, and avoid many of the difficulties inherent in the averaging process of the usual integral equation formulations [1]. The aforementioned probabilistic model is usually designed in strict analogy with the physical process of photon emission, transmission and absorption : we will refer to such methods as Analogue Monte Carlo methods (AMCM). The main advantage of AMCMs is that numerical algorithms are structured in a way that preserves physical understanding : exchanging or refining emission, transmission and absorption models as well as increasing geometrical complexity usualy introduce no specific numerical difficulty. In this sens, AMCMs are considered as very usefull tools for the derivation of reference solutions for configurations involving either complex surface and semi-transparent radiative properties, or complex geometries. However, AMCMs are also "advertised" for large computing costs and convergence difficulties.

More recent works refer to the MCM as a numerical tool for estimation of multidimensional integrals. No physical probabilistic model is required. Radiative transfers are described with an integral formulation and statistics play a solely numeric role for integral estimations. As illustrated in [2] for a one-dimensional configuration, the integral formulation may be chosen to explicitly satisfy the energy conservation and reciprocity principles (the Net Exchange Formulation, NEF), which insures fast numerical convergence far beyond AMCM limitations. For instance, such and Echange Monte Carlo method (EMCM) can adress both very small and very large optical thicknesses as well as strongly non-uniform discretizations. The major drawback of this approach is that numerical work is somewhat hermetic to physical understanding. This implies, for instance, that the extension of the algorithm of [2] to multidimensional configurations is not immediate.

The objective of the present text is to illustrate that benefits can easily be made from both approaches, leading to the derivation of efficient MCM schemes for the simulation of mutidimensional configurations. The NEF is presented in the general three-dimensional case (Eq. 2) and it is pointed out that there is a strong similarity between the NEF and the exchange formulation (Eq. 1) which is the implicit basement of AMCMs. This similarity allows to conclude that most existing AMCM algorithms can be easily improved to EMCM versions, increasing this way very significantly the numerical efficiency and extending the limit of the MCM. Conclusions are therefore identical, in the general case, to those of [2]. The approach as been succesfully tested for two-dimesional configurations in which the semi-transparent media is a gas modeled with a narrow-band statistical model [5].

Références

[1] Howell (J. R.). – Thermal radiation in participating media : the past, the present and some possible futures. *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 110, 1988, pp. 1220–1229.

[2] Cherkaoui (M.), Dufresne (J.L.), Fournier (R.), Grandpeix (J.Y.) et Lahellec (A.). – Monte-carlo simulation of radiation in gases with a narrow-band model and a net-exchange formulation. *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 118, 1996, pp. 401–407.

[3] Green (J. S. A.). – Division of radiative streams into internal transfer and cooling to space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 93, 1967, pp. 371–372.

[4] Joseph (J. M.) et Bursztyn (R.). – A radiative cooling model in the thermal infrared for application to models of the general circulation. *Journal of Applied Meteorology*, vol. 15, 1976, pp. 319–325.

[5] Fournier (R.). – *Rayonnement Thermique dans les Gaz : Analyse du Couplage avec la Convection Naturelle.* – Toulouse, France, Thèse, Université Paul Sabatier, 1994.

[6] Yguel (F.). – *Etude de la Convection Naturelle Tridimensionnelle dans les Cavités Fermées de Grandes Dimensions.* – Poitiers, France, Thèse, Université de Poitiers, 1988.

[7] Domoto (G. A.). – Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : The inverse transmission function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 14, 1974, pp. 935–942.

[8] Malkmus (W.). – Random lorentz band model with exponential-tailed s-1 line-intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America*, vol. 57, n° 3, 1967, pp. 323–329.

[9] Soufiani (A.), Hartmann (J. M.) et Taine (J.). – Validity of band-model calculations for CO_2 and H_2O applied to radiative properties and conductive-radiative transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 33, n° 3, 1985, pp. 243–257.