

FR 8600 698

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE
CENTRE D'ETUDES DE LIMEIL-VALENTON
Département de MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES
Service de Mathématiques et Codes Numériques
B.P. n° 27

94190 VILLENEUVE St GEORGES

NOTE - CEA	
002468	19DEC.85
CEA-N-	

ETUDE DE LA VARIANCE SUR LA TEMPERATURE
ET PHOTONIQUE MONTE-CARLO

J. GIORLA

Octobre 1985

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE
CENTRE D'ETUDES DE LIMEIL-VALENTON
Département de MATHEMATIQUES APPLIQUEES
Service de Mathématiques et Codes Numériques
B.P. n° 27

94190 VILLENEUVE St GEORGES

NOTE - CEA	
002468	19DEC.85
CEA-N-	

ETUDE DE LA VARIANCE SUR LA TEMPERATURE
EN PHOTONIQUE MONTE-CARLO

J. GIORLA

Octobre 1985

RESUME

On s'intéresse à différentes méthodes de Monte-Carlo utilisées pour résoudre les problèmes de photonique, notamment à la méthode de Fleck. On rappelle tout d'abord les différentes discrétisations en temps utilisées et les critères de stabilité correspondants. Puis on calcule pour chacune des méthodes la variance sur la température en fonction des variances sur l'énergie absorbée et sur la température aux instants précédents. Cela nous permet d'obtenir des critères de stabilité de la méthode de Monte-Carlo dans le cas stationnaire et, de façon embryonnaire, dans le cas instationnaire.

ABSTRACT

- We study different Monte-Carlo methods for solving radiative transfert problems, and particularly Fleck's Monte-Carlo method.

- We first give the different time-discretization schemes and the corresponding stability criteria. Then we write the temperature variance as a function of the variances of temperature and absorbed energy at the previous time step.

- Finally we obtain some stability criteria for the Monte-Carlo method in the stationary case.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction

I. Rappels sur la résolution des problèmes de photonique par la méthode de Monte-Carlo

1. Problème posé
 - 1.1 - Equation de transfert
 - 1.2 - Equation de conservation de l'énergie
2. Discrétisation en temps
 - 2.1 - Méthode classique
 - 2.2 - Méthode des températures extrapolées
 - 2.3 - Méthode de Fleck
3. Stabilité des schémas utilisés
 - 3.1 - Méthode classique sans Thomson
 - 3.2 - Méthode de Fleck dans le cas gris
 - 3.3 - Cas de la limite opaque
4. Principe de la méthode de Monte-Carlo
 - 4.1 - Etape Monte-Carlo
 - 4.2 - Etape déterministe

II. Expression générale de la variance sur la température

1. Formalisme de la méthode de Monte-Carlo
2. Expression de la variance sur la température

III. Critères de stabilité dans le cas stationnaire

1. Calcul de la variance
2. Méthode classique
3. Méthode des températures extrapolées
4. Méthode de Fleck

IV. Conclusion

Références

INTRODUCTION

- La méthode de Monte-Carlo utilisée pour résoudre les problèmes de photonique hors équilibre consiste essentiellement à poursuivre de manière aléatoire des particules représentant des paquets de photons ; à estimer l'énergie déposée dans chaque maille, à chaque pas en temps par ces photons puis à calculer les nouvelles températures grâce à l'équation de conservation de l'énergie. Les fluctuations sur les températures obtenues sont généralement suffisamment faibles pour que l'on puisse s'en accommoder, à condition de garder un petit pas en temps. Le but de ce rapport est de quantifier cette dernière condition, c'est-à-dire de donner des critères de stabilité pour la méthode de Monte-Carlo.

- Outre la méthode classique ou explicite [1] qui consiste à résoudre les équations de transfert radiatif et de conservation de l'énergie de manière explicite sur chaque pas en temps nous nous intéresserons à la méthode dite des températures extrapolées [2] qui consiste à utiliser des températures extrapolées dans la phase transfert et à résoudre implicitement l'équation de l'énergie et à la méthode de Fleck [3] qui fait intervenir une autre discrétisation des équations.

- Les critères de stabilité se divisent en deux catégories. Il y a tout d'abord les problèmes de stabilité du schéma numérique utilisé pour la discrétisation des équations et nous rappellerons brièvement les résultats obtenus par Mercier [4] et Larsen [5] . Nous étudierons ici plus particulièrement les problèmes de stabilité dus à la méthode statistique employée et nous dirons que la méthode de Monte-Carlo est statistiquement stable si les fluctuations sur la température ne s'amplifient pas au cours du temps, c'est-à-dire si la variance reste bornée lorsque le temps croît.

- Nous serons donc amenés à calculer la variance sur la température et à étudier son évolution. Dans chaque maille on calcule la nouvelle température en résolvant l'équation de conservation de l'énergie discrétisée et la loi de propagation des erreurs nous permet de calculer la variance sur la nouvelle température en fonction de la

variance sur l'ancienne température et de la variance sur l'énergie absorbée dans la maille. Nous ne nous intéresserons pas ici à la façon de calculer la variance sur l'énergie absorbée (on pourra se reporter à [6] pour cela) et nous supposerons seulement que celle-ci est bornée en fonction du temps. Cela nous permet d'avoir une récurrence simple pour la variance sur la température et d'obtenir des critères de stabilité pour les trois méthodes étudiées.

I - RAPPELS SUR LA RESOLUTION DES PROBLEMES DE PHOTONIQUE PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO

1. Problème posé

1.1 - Equation de transfert

On veut résoudre un problème de transfert radiatif dans un domaine D et \mathbb{R}^3 . L'intensité radiative spécifique $I(t, x, \Omega, \nu)$ vérifie l'équation [7] [8] :

$$(1) \quad \frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \frac{\partial I}{\partial x} + k_a (I - B) + k_{th} Q I = 0.$$

t représente le temps $t \geq 0$

x la position $x \in D$

Ω la direction de la vitesse $\Omega \in S^2$

ν la fréquence $\nu > 0$

T la température $T > 0$

$k_a(T, \nu)$ le coefficient d'absorption

$B(T, \nu)$ la fonction de Planck.

$$B(T, \nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} (e^{\xi} - 1)^{-1} \quad \text{où} \quad \xi = \frac{h\nu}{kT}$$

$k_{th}(T, \nu)$ le coefficient de scattering Thomson

Q l'opérateur de scattering Thomson

$$Q I = I - \int_{S^2} I(\Omega') \frac{3}{16\pi} (1 + \cos^2(\Omega - \Omega')) d\Omega'$$

Les conditions initiales sont :

$$I(0, x, \Omega, \nu) = I_0(x, \Omega, \nu),$$

$$\varepsilon(x) \Big|_{t=0} = \varepsilon_0(x) \quad (\text{ou } T \Big|_{t=0} = T_0(x)).$$

La condition aux limites s'écrit :

$$I(t, x, \Omega, \nu) = h(t, x, \Omega, \nu) \quad \text{pour } (x, \Omega) \in \partial D_-$$

où ∂D_- est l'ensemble des couples (x, Ω) tel que x soit situé sur la frontière du domaine D et vérifie $\Omega \cdot n_x < 0$, n_x étant la normale extérieure au domaine au point x considéré.

Cette dernière condition signifie que l'on s'impose l'intensité radiative entrant dans le domaine.

1.2 - Equation de conservation de l'énergie

Notons $\epsilon(T)$ l'énergie interne,

$$E_r(t, x) = \frac{1}{c} \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv I(t, x, \Omega, \nu) \text{ l'énergie radiative,}$$

$$F_r(t, x) = \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv \Omega I(t, x, \Omega, \nu) \text{ le flux radiatif.}$$

L'équation de conservation de l'énergie totale s'écrit alors en géométrie figée :

$$(2) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon + E_r) + \nabla \cdot F_r = 0$$

Le premier moment de l'équation de transfert (1) s'écrit :

$$(1 \text{ bis}) \quad \frac{\partial E_r}{\partial t} + \nabla F_r + \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv k_a I - k_p ac T^4 = 0$$

$$\text{où } k_p(T) = \frac{\int_0^\infty k_a(T, \nu) B(T, \nu) dv}{\int_0^\infty B(T, \nu) dv} \text{ est la moyenne de Planck.}$$

On élimine alors E_r et F_r pour obtenir l'équation de l'énergie suivante :

$$(2 \text{ bis}) \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv k_a I - k_p ac T^4 = 0$$

Le système que nous voulons résoudre est donc l'équation de transfert

(1) couplée à l'équation de l'énergie (2 bis).

2. Discrétisation en temps

Pour résoudre numériquement ce système d'équations nous discrétisons (1) et (2 bis) sur l'intervalle de temps $[t^n, t^{n+1}]$ et nous procédons comme suit.

Notons :

$$I^0 = I_0(x, \Omega, \nu),$$

$$T^0 = T_0(x) \text{ et } \epsilon^0 = \epsilon_0(x).$$

On calcule I^{n+1} et T^{n+1} par récurrence de la façon suivante :

$I^{n+1} = \tilde{I}(t^{n+1}, x, \Omega, \nu)$ où \tilde{I} est solution de l'équation de transfert (1) discrétisée sur $[t^n, t^{n+1}]$ avec les conditions :

$$\begin{cases} \tilde{I}(t^n, x, \Omega, \nu) = I^n \\ \tilde{I} = h \text{ sur } \partial D_- \end{cases}$$

et T^{n+1} est solution de l'équation de l'énergie (2) discrétisée sur le pas en temps.

La discrétisation des équations (1) et (2 bis) peut être faite de plusieurs façons. Nous donnons ci-dessous 3 discrétisations qui sont habituellement utilisées en photonique Monte-Carlo.

2.1 - Méthode classique

C'est la première méthode qui a été utilisée [1]. On fixe la température à T^n sur tout le pas en temps $[t^n, t^{n+1}]$. Les équations (1) et (2 bis) discrétisées s'écrivent :

$$(3) \frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \frac{\partial I}{\partial x} + k_a(T^n) [I - B(T^n)] + k_{th}(T^n) \rho I = 0$$

$$(4) \epsilon(T^{n+1}) - \epsilon(T^n) + \Delta t k_p(T^n) ac [T^{n+1}]^4 - \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty d\nu k_a(T^n) I = 0$$

Ce schéma est conservatif. En effet, les termes

$$\Delta t k_p (T^n) ac (T^n)^4 \text{ et } \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv k_a (T^n) I$$

utilisés dans (4) sont bien les intégrales sur $t \in [t^n, t^{n+1}]$, $\Omega \in S^2$, $v \in \mathbb{R}^+$ de

$$k_a (T^n) B (T^n) \text{ et } k_a (T^n) I \text{ respectivement.}$$

2.2 - Méthode des températures extrapolées

Cette discrétisation, proposée par Blons [2] fait intervenir une température extrapolée T_{ex} calculée à partir des températures précédentes et l'énergie émise est calculée implicitement dans l'équation de conservation de l'énergie avec la température $T^{n+1/2} = \frac{1}{2} (T^n + T^{n+1})$:

$$(5) \frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \frac{\partial I}{\partial x} + k_a (T_{ex}) [I - B(T_{ex})] + k_{th} (T_{ex}) Q I = 0$$

$$(6) \varepsilon(T^{n+1}) - \varepsilon(T^n) + \Delta t k_p (T^{n+1/2}) a [T^{n+1/2}]^4 + \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv k_a (T_{ex}) I = 0$$

Dans [2] l'équation (6) était facilement résolue par la méthode de Newton car on n'autorisait que des expressions analytiques de k_p ce qui permettait de calculer aisément la dérivée par rapport à T .

Remarquons que ce schéma n'est pas conservatif :

$$\int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv k_a (T_{ex}) B (T_{ex}) \neq ac k_p (T^{n+1/2}) (T^{n+1/2})^4$$

2.3 - Méthode de Fleck

La troisième discrétisation que nous étudierons a été introduite par Fleck et Cummings [3]. Elle consiste à discrétiser l'équation de transfert (1) en centrant le terme d'émission :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \frac{\partial I}{\partial x} + k_a (T^n) [I - b (T^n) \{ \alpha \phi^{n+1} + (1-\alpha) \phi^n \}] + k_{th} (T^n) Q I = 0$$

$$\text{où } \phi(T) = \frac{ac}{4\pi} T^4 ; b (T, v) = \frac{1}{\phi(T)} B (T, v) \text{ et } \alpha \in [0, 1] .$$

On élimine ϕ^{n+1} en linéarisant l'équation de l'énergie correspondante par rapport à ϕ :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \phi} (\phi^n) \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \right) = \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty d\nu k_a(T^n) I - 4\pi k_p \phi^n - 4\pi k_p \alpha (\phi^{n+1} - \phi^n)$$

On peut écrire cette équation sous la forme :

$$\phi^{n+1} - \phi^n = (1-f) \left[\int_{S^2} \int_0^\infty \frac{k_a}{k_p} I d\nu \frac{d\Omega}{4\pi} - \phi^n \right]$$

où

$$(7) f = f_\alpha(T, \Delta t) = \left[1 + 4\pi \alpha \Delta t k_p(T) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \phi} \right)^{-1} \right]^{-1}$$

$$= \left[1 + 4\alpha ac T^3 \Delta t k_p(T) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)^{-1} \right]^{-1}$$

est le coefficient de Fleck.

On obtient finalement l'équation de transfert de Fleck :

$$(8) \frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \frac{\partial I}{\partial x} + f(T^n) k_a(T^n) [I - B(T^n)] + k_{th}(T^n) QI + R(T^n)I = 0$$

où R est l'opérateur de scattering Fleck :

$$(9) R(T) I = \left[1 - f(T) \right] \left[k_a(T) I - \frac{k_a(T, \nu) B(T, \nu)}{k_p(T)} \iint I(\Omega', \nu') k_a(T, \nu') \frac{d\Omega'}{4\pi} d\nu \right]$$

Notons que cet opérateur est conservatif : $\int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty d\nu RI = 0$

L'équation de conservation de l'énergie est :

$$(10) \varepsilon(T^{n+1}) - \varepsilon(T^n) + \Delta t f(T^n) k_p(T^n) ac (T^n)^4 - \iiint f(T^n) k_a(T^n) I dt d\Omega d\nu = 0$$

Les termes correspondants à l'énergie émise et à l'énergie absorbée sont exactement les intégrales des termes correspondants dans l'équation de transfert (8). Le schéma est par conséquent conservatif.

L'intérêt de la méthode de Fleck provient du fait que le coefficient d'absorption est multiplié par $f \leq 1$, donc plus faible que dans la méthode explicite. On va donc pouvoir traiter des milieux plus opaques [9]. Notons également que lorsque le paramètre de centrage α est nul on retrouve bien le schéma explicite.

3. Stabilité des schémas utilisés

Nous donnons ici les résultats obtenus dans [4] et [5] auxquels nous renvoyons le lecteur pour de plus amples détails. Nous faisons les hypothèses générales suivantes :

les fonctions $T \rightarrow \varepsilon(T)$
et $T \rightarrow k_a(T, \nu) B(T, \nu)$ sont croissantes ($\forall \nu \in \mathbb{R}^+$)
et la fonction $T \rightarrow k_a(T, \nu)$ est décroissante pour tout ν .

Nous supposons qu'il existe deux températures extrémales $0 < T_1 \leq T_2 < +\infty$ tel que, pour tout (t, x, Ω, ν) on ait :

$$\varepsilon = \varepsilon(T_1) \leq \varepsilon_0(x) \leq \varepsilon(T_2) = \varepsilon_2$$

$$B_1 = B_1(T_1, \nu) \leq I_0(x, \Omega, \nu) \leq B(T_2, \nu) = B_2,$$

$$B_1 \leq h(t, x, \Omega, \nu) \leq B_2.$$

Nous supposons que ces conditions seront toujours remplies dans la suite de ce rapport.

3.1 - Méthode classique sans Thomson

Les deux équations discrétisées sont les équations (3) (4) où le coefficient k_{th} est seul.

On a le résultat suivant :

Si le pas en temps Δt vérifie :

$$(11) \quad \Delta t \leq \left[4 \pi \max_{T_1 < T < T_2} \int_0^{\infty} k_a(T, \nu) \frac{\partial B}{\partial \varepsilon}(T, \nu) d\nu \right]^{-1}$$

alors $\varepsilon_1 \leq \varepsilon^n(x) \leq \varepsilon_2 \quad (\forall x \in D) \quad \forall n$

et $B_1 \leq I^n(x, \Omega, \nu) \leq B_2 \quad \forall (x, \Omega, \nu) \quad \forall n.$

3.2 - Méthode de Fleck dans le cas gris

- Un résultat analogue a été démontré pour l'équation de transfert de Fleck dans le cas gris (où k_a ne dépend pas de la fréquence) et sans scattering Thomson ($k_{th} = 0$) : le schéma est stable si le pas en temps Δt est suffisamment petit [4] .

- Si de plus nous linéarisons l'équation de l'énergie (10) par rapport à $\phi = acT^4/4\pi$ (ce n'est pas exactement la méthode de Fleck décrite plus haut et le schéma n'est plus conservatif) :

$$(\phi^{n+1} - \phi^n) \frac{\partial \varepsilon}{\partial \phi}(T^n) + \Delta t \int f(T^n) k_p(T^n) c u_r^n + \iiint f(T^n) k_a(T^n) I dt d\Omega d\nu = 0$$

la méthode est inconditionnellement stable pour $\alpha = 1$. Si α est différent de 1 le critère de stabilité s'écrit :

$$(12) \quad \Delta t \leq \left[4\pi(1-\alpha) \max_{T_1 \leq T \leq T_2} k_p(T) \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon}(T) \right]^{-1}$$

Ce critère est en fait identique au critère (11) si $\alpha = 0$ puisque, dans le cas gris :

$$4\pi \int_0^\infty k_a \frac{\partial B}{\partial \varepsilon} du = 4\pi k_p \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int_0^\infty B(T, \nu) d\nu = 4\pi k_p \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon} ,$$

car $k_a(\nu)$ est constant et égal à k_p .

Ce critère de stabilité ne s'applique vraisemblablement pas à la méthode de Fleck dans le cas non gris. En effet, des essais numériques ont montré que l'on pouvait obtenir $\varepsilon^n > \varepsilon_2$ pour de grands pas en temps avec $\alpha = 1$ ([9] annexe D). Le cas multifréquence étant très difficile à étudier, les seuls résultats obtenus concernent la limite opaque (voir ci-après).

3.3 - Cas de la limite opaque

Nous donnons ici les résultats obtenus par Larsen [5] .
Celui-ci a étudié les critères de stabilité pour différentes discrétisations en temps lorsque l'opacité du milieu tend vers l'infini. La démarche suivie est la suivante : on montre que les solutions des différents schémas tendent vers les solutions d'équations de diffusion lorsque l'opacité devient très grande puis on cherche les critères qui permettent d'affirmer que ces approximations restent bornées dans le temps.

Ainsi on démontre que la méthode explicite est toujours instable (dans la limite opaque bien sûr) et que la méthode de Fleck est stable si l'accroissement de la température au cours du pas en temps est suffisamment faible. Pour des opacités analytiques Kramers Larsen obtient le critère de stabilité suivant :

$$\left| \frac{T^{n+1} - T^n}{T^n} \right| < 0.077.$$

4. Principe de la méthode de Monte-Carlo

Nous venons de voir comment les équations générales (1) et (2) étaient discrétisées en temps. Pour résoudre ensuite ces dernières équations on partitionne le domaine D en mailles M et on considère que la température est constante par maille :

$$T(x) = T_M \text{ pour } x \in M$$

La résolution s'effectue alors en deux étapes.

4.1 - Etape Monte-Carlo

Connaissant la répartition des particules ou "photons" Monte-Carlo au temps t^n (c'est-à-dire I^n) on détermine leurs nouvelles répartitions I^{n+1} en les déplaçant selon l'équation de transfert discrétisée.

On estime l'énergie absorbée dans chaque maille au cours du pas en temps.

4.2 - Etape déterministe

On résout alors maille par maille l'équation de conservation de l'énergie (discrétisée en temps et intégrée sur la maille) en utilisant l'estimation de l'énergie absorbée calculée dans l'étape Monte-Carlo. Cette équation est de la forme :

$$(13) \quad \zeta(T^{n+1}) - \zeta(T^n) + \zeta_{\text{émis}} - \zeta_{\text{abs}} = 0,$$

où ζ est l'énergie interne de la maille M de volume V

$$\zeta = V \varepsilon$$

$\zeta_{\text{émis}}$ est l'énergie émise dans la maille sur le pas en temps Δt ,

et ζ_{abs} l'énergie absorbée dans la maille.

$$(14) \quad \text{Posons } k = \left(\begin{array}{l} k_a(T^n) \\ k_a(T_{\text{ex}}) \\ f(T^n) \quad k_a(T^n) \end{array} \right) \quad \text{suivant la discrétisation utilisée}$$

$$(15) \quad h_\alpha(T) = a c V f_\alpha(T) k_p(T) T^4,$$

$$\text{et } T^{n+\theta} = (1 - \theta) T^n + \theta T^{n+1} \quad \theta \in [0,1].$$

On peut alors écrire l'énergie absorbée et l'énergie émise dans la maille M de la façon suivante :

$$(16) \quad \zeta_{\text{abs}} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \int_M dx \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty dv k(v) I(t, x, \Omega, v)$$

et

$$(17) \quad \zeta_{\text{émis}} = \Delta t h_\alpha(T^{n+\theta})$$

avec $(\alpha, \theta) = (0,0)$ dans la méthode classique

$(\alpha, \theta) = (0, 1/2)$ dans la méthode des températures extrapolées

$\theta = 0$ dans la méthode de Fleck.

II - EXPRESSION GENERALE DE LA VARIANCE SUR LA TEMPERATURE

1. Formalisme de la méthode de Monte-Carlo

Nous décrivons ici la méthode de Monte-Carlo d'un point de vue assez formel de manière à introduire rapidement la notion de variance sur l'énergie absorbée.

Nous appellerons chemin aléatoire une suite finie de points $c = (R_0, R_1, R_2, \dots, R_k)$ de l'espace des phases $V = \{R = (t, x, \Omega, v)\}$. La trajectoire d'une particule Monte-Carlo est identifiée à un chemin aléatoire c où R_0 désigne le point de naissance de la particule, R_1, R_2, \dots, R_{k-1} les chocs successifs subis par celle-ci et R_k le dernier choc.

La méthode de Monte-Carlo consiste alors à échantillonner N chemins aléatoires $\{c_i\}$ $i = 1, \dots, N$ selon une probabilité $P(c)$ (fournie par l'équation de transfert discrétisée) sur l'espace des chemins aléatoires $\mathcal{C}([6], [10])$. Pour chaque trajectoire c_i on calcule l'énergie absorbée $e_{abs}(c_i)$ dans chaque maille M sur le pas en temps $[t^n, t^{n+1}]$. La moyenne

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{abs}(c_i)$$

est un estimateur sans biais de l'énergie absorbée ζ_{abs} définie par (14) et (16).

- Soit ξ une variable aléatoire sur l'espace de probabilité (\mathcal{C}, P) . On appelle espérance mathématique de ξ la quantité

$$E[\xi] = \int_{\mathcal{C}} \xi(c) dP(c)$$

et variance de ξ l'intégrale :

$$V(\xi) = \int_{\mathcal{C}} [\xi(c) - E[\xi]]^2 dP(c).$$

On a donc :

$$E[m] = E[e_{abs}] = \zeta_{abs}$$

et
$$V(m) = \frac{1}{N} V(e_{abs}) .$$

La moyenne m est une variable aléatoire sur ξ d'espérance mathématique égale à ξ_{abs} et de variance non nulle.

2. Expression de la variance sur la température

L'équation de l'énergie discrétisée (13) montre que la nouvelle température T^{n+1} dans la maille M est fonction de T^n et de l'énergie absorbée dans M sur le pas en temps. On peut donc écrire implicitement :

$$T^{n+1} = F(T^n, \xi_{abs}) .$$

Nous avons vu que la méthode de Monte-Carlo nous donne une estimation m de ξ_{abs} . En résolvant

$$T^{n+1} = F(T^n, m)$$

nous avons donc uniquement une estimation de la nouvelle température T^{n+1} . Celle-ci doit donc être considérée comme une variable aléatoire au même titre que la variable m . Ainsi T^{n+1} est fonction de deux fonctions aléatoires T^n et m .

La variance sur la température vérifie la loi de propagation des erreurs

$$V(T^{n+1}) = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)^2 V(T^n) + \left(\frac{\partial F}{\partial \xi_{abs}}\right)^2 V(m) + \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) \left(\frac{\partial F}{\partial \xi_{abs}}\right) \text{COV}(T^n, m).$$

Dans la suite de l'exposé nous ne distinguerons plus ξ_{abs} de son estimation m et nous supposerons que les variables aléatoires T^n et ξ_{abs} sont indépendantes et que, par conséquent, leur covariance $\text{COV}(T^n, \xi_{abs})$ est nulle. (*) La loi de propagation des erreurs s'écrit alors :

$$(18) \quad V(T^{n+1}) = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)^2 V(T^n) + \left(\frac{\partial F}{\partial \xi_{abs}}\right)^2 V(\xi_{abs})$$

(*) on peut supposer que la covariance est bornée, ce qui ne change pas les résultats.

Nous pouvons donc calculer la variance sur la température par récurrence, en prenant $V(T^0) = 0$. $V(T^n)$ dépend des dérivées partielles de la fonctionnelle F , donc de la méthode de Monte-Carlo utilisée.

Rappelons que nous avons pu écrire l'équation de l'énergie discrétisée sous la forme générale :

$$\zeta(T^{n+1}) - \zeta(T^n) + \Delta t h_d(T^{n+\theta}) - \zeta_{abs} = 0 .$$

Les dérivées partielles de $F(T^n, \zeta_{abs})$ s'écrivent alors :

$$(19) \quad \frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\frac{\partial \zeta}{\partial T}(T^n) - (1-\theta) \Delta t \frac{\partial h_d}{\partial T}(T^{n+\theta})}{\frac{\partial \zeta}{\partial T}(T^{n+1}) + \theta \Delta t \frac{\partial h_d}{\partial T}(T^{n+\theta})}$$

et

$$(20) \quad \frac{\partial F}{\partial \zeta_{abs}} = \frac{1}{\frac{\partial \zeta}{\partial T}(T^{n+1}) + \theta \Delta t \frac{\partial h_d}{\partial T}(T^{n+\theta})} .$$

III - CRITERES DE STABILITE DANS LE CAS STATIONNAIRE

L'expérience montre que la méthode de Monte-Carlo classique devient instable essentiellement lorsque la température devient stationnaire. Nous allons donc étudier plus particulièrement ce cas de figure qui permet, de plus, de mener les calculs assez loin. Nous allons faire les deux hypothèses suivantes :

(H1) L'espérance mathématique de la variable aléatoire T^n est constante (par rapport au temps) dans chaque maille M et égale à T_0 (T_0 peut être différent d'une maille à l'autre) :

$$E [T^n] = T_0 \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

(H2) La variance sur l'énergie absorbée dans la maille M est bornée pour tous les pas en temps :

$$0 < v_0 \leq V(\tilde{\zeta}_{abs}^n) \leq V_0 < +\infty \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Nous dirons que la méthode de Monte-Carlo est statistiquement stable si la suite $\{V(T^n)\}_{n \in \mathbb{N}}$ est également bornée.

1. Calcul de la variance

Pour calculer celle-ci nous remplaçons la température T^n par son espérance mathématique T_0 dans les dérivées partielles de $F(T^n, \tilde{\zeta}_{abs}^n)$ données par (19) (20). On obtient :

$$(21) \quad V(T^{n+1}) = K_1 \cdot V(T^n) + K_2 V(\tilde{\zeta}_{abs}^n)$$

$$\text{où } K_2 = \left[\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial T}(T_0) + \theta \Delta t \frac{\partial h_\alpha}{\partial T}(T_0) \right]^{-2}$$

$$\text{et } K_1 = K_2 \left[\frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial T}(T_0) - (1 - \theta) \Delta t \frac{\partial h_\alpha}{\partial T}(T_0) \right]^2 .$$

En utilisant l'hypothèse (H2) on trouve l'encadrement suivant :

$$K_2 v_0 (1 + K_1 + \dots + K_1^n) \leq V(T^{n+1}) \leq K_2 V_0 (1 + K_1 + \dots + K_1^n)$$

qui montre que la suite $V(T^n)$ est bornée si et seulement si $K_1 < 1$.

$$\text{On a alors } V(T^n) \leq \frac{K_2 V_0}{1-K_1} \quad (\forall n \in \mathbb{N}).$$

$$\text{Posons } \varepsilon'_0 = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}(T_0) \quad h'_{\alpha,0} = \frac{\partial h_\alpha}{\partial T}(T_0)$$

$$r = \frac{\Delta t \quad h'_{\alpha,0}}{\varepsilon'_0 + \theta \Delta t \quad h'_{\alpha,0}}$$

On a $K_1 = (1-r)^2$ de sorte que $K_1 < 1$ est équivalent à :

$$r \in] 0,2 [.$$

Nous avons donc le critère suivant :

Sous les hypothèses (H1) et (H2) la méthode est statistiquement stable si et seulement si :

$$r = \frac{\Delta t \quad h'_{\alpha,0}}{\varepsilon'_0 + \theta \Delta t \quad h'_{\alpha,0}} \in] 0,2 [$$

2. Méthode classique

On a $\alpha = \theta = 0$,

$$h_0(T) = a c \sqrt[3]{k_p(T)} T^4 ,$$

et
$$h'_0(T) = a c \sqrt[3]{\frac{\partial k_p}{\partial T} T^4} .$$

Le paramètre r vaut donc :

$$r = \Delta t \frac{a c \sqrt[3]{\frac{\partial k_p}{\partial T} T^4}(T_0)}{\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}(T_0)} = \Delta t a c \frac{\partial k_p}{\partial \varepsilon} T^4(T_0) .$$

On voit que l'hypothèse $\frac{\partial k_p T^4}{\partial \varepsilon} > 0$ est nécessaire pour que $\tau \in]0,2[$.

Posons

$$\Delta t_c = \left[ac \frac{\partial k_p T^4}{\partial \varepsilon} (T_0) \right]^{-1}$$

La méthode de Monte-Carlo classique est statistiquement stable si et seulement si

$$\Delta t < 2\Delta t_c = 2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial ac k_p T^4} (T_0)$$

Dans le cas où l'énergie interne suit la loi des gaz parfaits :

$$\varepsilon = \rho C_v T$$

et où l'opacité est de la forme :

$$k_p = \sum_p T^\beta \quad \beta > -4$$

(cas que nous nommerons "analytique" par la suite) on obtient plus simplement :

$$\Delta t_c = \frac{\rho C_v}{ac (4 + \beta) k_p T^3}$$

et le critère devient :

La variance sur T^n est bornée si et seulement si

$$\Delta t < \frac{2 \rho C_v}{ac (4 + \beta) k_p T^3}$$

Remarque : Nous pouvons effectuer le même type de raisonnement dans le cas instationnaire en supposant que l'erreur relative sur l'énergie absorbée est bornée. Les calculs peuvent être menés à terme

dans le cas explicite et, moyennant certaines hypothèses, on trouve qu' l'erreur relative sur la température est bornée si le pas en temps est proche du pas en temps critique Δt_c .

3. Méthode des températures extrapolées

On a $\alpha = 0$ et $\theta = \frac{1}{2}$ d'où :

$$r = \frac{\Delta t h'_0}{z'_0 + \frac{1}{2} \Delta t h'_0} \quad \text{avec} \quad h'_0 = ac \sqrt[3]{\frac{\partial k_p}{\partial T} T^4}$$

$$r = 2 \frac{\Delta t \frac{\partial h}{\partial \epsilon}(T_0)}{2 + \Delta t \frac{\partial h}{\partial \epsilon}(T_0)} \quad \text{donc} \quad r < 2 \quad \text{pour tout} \quad \Delta t$$

dès lors que $\frac{\partial h}{\partial \epsilon}(T_0)$ positif, c'est-à-dire $\frac{\partial k_p}{\partial T} T^4 > 0$ ce qui est vrai par hypothèse.

La méthode de Monte-Carlo avec températures extrapolées est donc statistiquement stable pour tout pas en temps $\Delta t > 0$.

4. Méthode de Fleck

$\theta = 0$ et $\alpha \in [0, 1]$ d'où

$$h_\alpha(T) = ac \sqrt[3]{f_\alpha(T, \Delta t) k_p(T) T^4} \quad \text{et}$$

$$r = \frac{\Delta t h'_{\alpha,0}}{z'_0} .$$

h_α dépend du pas en temps Δt par l'intermédiaire de f et nous ne pouvons pas mettre r sous la forme $\Delta t/\Delta t_c$ comme précédemment. On a formellement :

$$h_\alpha = H f \quad \text{avec} \quad f = \frac{1}{1 + \Delta t F} .$$

$$\text{D'où :} \quad h'_\alpha = H'f + Hf' = H'f + H \left(- \frac{F' \Delta t}{(1 + \Delta t F)^2} \right)$$

$$h'_{\alpha} = H'f - HF'f \frac{\Delta t}{(1 + \Delta t F)}$$

$$h'_{\alpha} = H'f - HF'f \frac{1-f}{F} = f (H'-H \frac{F'}{F} (1-f)) .$$

Et finalement :

$$r = \frac{1-f}{F \epsilon'_0} \left[H' - H \frac{F'}{F} (1-f) \right] = \frac{1-f}{F \epsilon'_0} \left[(H'-H \frac{F'}{F}) + f (H \frac{F'}{F}) \right]$$

où F, F', H, H' sont calculés à T_0 et ne dépendent pas du pas en temps Δt .

Le critère de stabilité est $r_{\alpha}(\Delta t) \in]0,2[$. Les couples $(\alpha, \Delta t)$ le vérifiant forment un domaine non trivial du plan. Plaçons-nous pour simplifier dans le cas analytique :

$$\epsilon = \rho C_v T, \quad k_p = \sum_p T^{\beta}, \quad \beta > -4.$$

On a alors :

$$F = 4\alpha \text{ ac } \frac{k T^3}{\epsilon'} = 4\alpha \text{ ac } \frac{\sum_p T^{3+\beta}}{c_v}, \quad F' = (3+\beta) \frac{F}{T},$$

$$H = \text{ac } \sqrt[4]{k_p} T^4 = \text{ac } \sqrt[4]{\sum_p} T^{4+\beta}, \quad H' = (4+\beta) \frac{H}{T}.$$

$$\text{D'où } r = \frac{1-f}{F \epsilon'_0} \left[(4+\beta) \frac{H}{T} - (3+\beta) \frac{H}{T} + f (3+\beta) \frac{H}{T} \right],$$

$$r = \frac{H}{F \epsilon'_0 T} (1-f) (1 + (3+\beta) f) .$$

$$\text{Comme } \frac{H}{F \epsilon'_0 T} = \frac{\text{ac } \sqrt[4]{k_p} T^4}{4\alpha \text{ ac } k T^4 \frac{\sqrt[4]{\epsilon'}}{\epsilon'}} = \frac{1}{4\alpha}$$

on obtient, en notant $Q_B(f) = (1-f) (1 + (3+\beta) f)$:

$$r = \frac{Q_B(f)}{4\alpha} \quad \text{si } \alpha \neq 0 .$$

Cherchons sous quelles conditions sur α le critère de stabilité est vérifié pour tout pas en temps Δt , c'est-à-dire pour tout $f \leq 1$, car r ne dépend du pas en temps Δt que par l'intermédiaire de cette variable.

$$Q_{\max}(\beta) = \max_{f \in [0,1]} Q_{\beta}(f) = \begin{cases} 0 & \text{si } \beta \leq -4 \\ 4+\beta & \text{si } \beta \in [-4, -8/3] \\ \frac{(4+\beta)^2}{4(3+\beta)} & \text{si } \beta \geq -8/3 \end{cases}$$

Si $\alpha \geq \frac{Q_{\max}(\beta)}{8}$ la méthode est stable (Δt)

- Le critère devient dans les cas particuliers suivants :

pour $\beta = -3,5$ (opacités de Kramers) : $\alpha \geq \frac{1}{16}$;

pour $\beta = 0$ (opacités constantes) : $\alpha \geq \frac{1}{6}$

Le maximum de Q_{\max} sur $\beta \in [-4,0]$ étant égal à $4/3$ on voit que si $\alpha \geq 1/6$ la méthode est stable pour tout pas en temps et $\beta \in [-4,0]$.

- D'un autre point de vue, on a, pour tout $\beta > -4$ et $f \in [0,1]$:

$$(1 + (3 + \beta)f) \leq 4 + \beta$$

$$\text{d'où } r \leq \frac{1-f}{4\alpha} (4 + \beta) = f \left(ac \Delta t \frac{k T^3}{\rho C_v} \right) (4+\beta) = f \frac{\Delta t}{\Delta t_c}$$

si $\alpha \neq 0$.

Et la condition $\Delta t \leq \frac{2}{f} \Delta t_c$ entraîne la stabilité de la méthode de Fleck. On retrouve alors le critère $\Delta t \leq 2 \Delta t_c$ dans le cas explicite ($\alpha = 0, f = 1$).

IV. CONCLUSION

Nous pouvons donner des critères de stabilité statistique précis sous les hypothèses suivantes :

- température stationnaire
- variance sur l'énergie absorbée bornée
- opacités analytiques ($k_p = \sum_p T^{\beta}$) et gaz parfait ($\epsilon = \rho C_v T$).

Méthode classique

Elle est statistiquement stable si et seulement si $\Delta t < 2 \Delta t_c$,

$$\text{où } \Delta t_c = \frac{\rho C_v}{ac (4+\beta) k_p T^3}$$

Méthode des températures extrapolées

Elle est inconditionnellement statistiquement stable.

Méthode de Fleck

Elle est statistiquement stable si $\Delta t < \frac{2}{f} \Delta t_c$ et inconditionnellement stable lorsque le coefficient de centrage est supérieur à 1/6.

REFERENCES

- [1] CAMPBELL, P.M., NELSON, R.G.
Numerical methods for non linear radiation transport calculations,
UCRL-7838 (1964).
- [2] BLONS, H.
Rapport interne (1978)
- [3] FLECK J.A., Jr and J.D. CUMMINGS.
An implicit Monte-Carlo scheme for calculating time and frequency
dependent non linear radiation transport, JCP, 8, 313-342 (1971)
- [4] MERCIER B.
A sufficient stability condition for Fleck's implicit Monte-Carlo
Method. A paraître.
- [5] CLARK, B.A., LARSEN E.W., SENTIS R.
Stability of time-differenced radiative transfer equations for
optically thick media. A paraître.
- [6] GIORLA J.
Etude de techniques de réduction de variance en photonique Monte-
Carlo : zones d'importance, splitting et roulette russe.
Rapport interne (1983)
- [7] POMRANING, G.C.
The equation of radiation hydrodynamics, Pergamon Press, Oxford (1983)
- [8] MIHALAS D., MIHALAS R.W.
Foundations of Radiation Hydrodynamics. Oxford Univ. Press, New York
(1984)
- [9] GIORLA J., SENTIS R.
Photonique Monte-Carlo dans les milieux opaques : méthode de Fleck
avec Random Walk. CEA-N-2423 (1984)
- [10] JUZALTIS, R.J.
Minimizing the cost of splitting in Monte-Carlo radiation transport
simulation. Thesis. LA-8546-T(1980)