

Échantillonnage des transitions

Méso-Star

29 septembre 2026

Table des matières

1	Introduction	3
2	L'arbre de transitions	6
3	Les algorithmes de transfert radiatif	11

1 Introduction

Ce document a pour vocation de décrire la technique d'échantillonnage des transitions qui permet de se débarrasser de l'évaluation du champ de coefficient d'absorption préalable à tout calcul de transfert radiatif.

Tout part d'une observation simple : nous considérons généralement que le coefficient d'absorption monochromatique k_ν est égal à la somme de la contribution d'un certain nombre de transitions énergétiques, que l'on désignera également sous le terme de "raies" (lines) :

$$k_\nu = \sum_{j=1}^{N_t} h_{\nu,j} \quad (1)$$

où $h_{\nu,j}$ représente la contribution de la transition indice j parmi les N_t transitions à prendre en compte.

Il ne faut pas perdre de vue que la relation 1 reste une approximation. Même si elle est couramment utilisée, elle n'est plus justifiée dès lors que les transitions (effets quantiques) ne sont plus indépendantes les unes des autres. Ces effets apparaissent dans les conditions suivantes :

- à haute pression : lorsque le gaz devient très dense (tout comme dans les liquides), la fréquence de collision entre molécules augmente. Lorsque le temps moyen entre deux collisions devient du même ordre de grandeur que le temps de relaxation de la transition, les transitions entre un niveau d'énergie initial et un niveau final peuvent ne pas s'opérer de façon directe entre ces deux niveaux ; en d'autres termes, des niveaux intermédiaires sont impliqués, ce qui modifie la population de ces niveaux intermédiaires. Il s'agit d'un phénomène d'interférences spectrales appelé *line mixing*, qui se traduit in-fine par une modification du profil de la raie (voir plus bas).
- effets optiques non linéaires à haute intensité : la relation 1 est basée sur l'hypothèse que les phénomènes optiques sont linéaires (un photon à la fois interagit avec une molécule). Lorsque l'intensité du rayonnement incident est très importante, les molécules peuvent absorber plusieurs photons à la fois. Le coefficient d'absorption se met alors à dépendre

de l'intensité du rayonnement.

- lorsqu'une transition se superpose à un très fort continuum d'absorption, ce continuum se met à interférer quantiquement avec le chemin de la transition (les niveaux d'énergie impliqués). Cette situation se rencontre dans ces cas particuliers de photodissociation ou d'ionisation fortes.
- la superradiance : à haute densité moléculaire, la distance moyenne entre molécules peut devenir inférieure à la longueur d'onde du rayonnement. Les molécules se retrouvent couplées par le champ de luminance, et adoptent un comportement collectif (les molécules ne peuvent plus être considérées comme des dipôles indépendants).

Dans la plupart de nos applications cependant, l'approximation proposée par la relation 1 est valable.

La contribution $h_{\nu,j}$ (pour la fréquence ν) d'une transition unique (prenant l'unité $[m^{-1}]$) est modélisée de la façon suivante :

$$h_{\nu,j} = n \cdot \sigma_{\nu,j} \quad (2)$$

où n est la densité moléculaire [*molecules*/ m^3] et σ_j la section efficace d'absorption de l'espèce moléculaire en question (pour la fréquence ν) associée à la transition j [$m^2/molecule$].

La section efficace s'écrit :

$$\sigma_{\nu,j} = S_j f_{\nu,j} \quad (3)$$

où S est l'intensité de la transition [$m/molecule$] et f le profil de la transition [m].

D'excellentes descriptions du modèle de la transition peuvent être trouvées ailleurs ; notamment dans les thèses de Mathieu Galtier ([Galtier, 2014]) ou de Yaniss Nyffenegger ([Nyffenegger-Pere, 2023]), dont les versions pdf peuvent être trouvées dans le répertoire *Doc* du présent texte.

Pour clore cette introduction, disons simplement que la technique d'échantillonnage des transitions, initialement présentée dans la thèse de Mathieu

Galtier ([Galtier, 2014]), consiste à remplacer le coefficient d'absorption monochromatique k_ν (dans chaque intégrale où il apparaît), par :

$$k_\nu = \sum_{j=1}^{N_t} p(\nu, j) \left\{ \frac{h_{\nu,j}}{p(\nu, j)} \right\} \quad (4)$$

où $p(\nu, j)$ représente la probabilité d'échantillonnage associée à la transition j . La relation 4 exprime en effet le coefficient d'absorption monochromatique comme l'espérance d'une variable aléatoire prenant la valeur $\frac{h_{\nu,j}}{p(\nu,j)}$. Dans les algorithmes de Monte-Carlo associés à la résolution du transfert radiatif, le coefficient d'absorption (traditionnellement vu comme une donnée d'entrée) se voit maintenant faire l'objet d'un échantillonnage statistique selon un jeu de probabilités donné. Sous réserve que l'on dispose de ce jeu de probabilité, qu'il soit pertinent, et que l'accès à ces probabilités soit rapide (voir la partie 2), le coefficient d'absorption disparaît des intégrales, et se voit remplacé par l'échantillonnage d'une transition (et l'évaluation de sa contribution h). Voir la partie 3 pour plus de détails au sujet de la mise en œuvre.

2 L'arbre de transitions

La technique d'échantillonnage des transitions fait appel à un jeu de probabilités $\{p(\nu, j), j = 1, N_t\}$ permettant d'échantillonner une transition, pour chaque fréquence ν de la plage spectrale à couvrir. Il est bien entendu inimaginable de pouvoir pré-calculer, stocker et accéder à un tel jeu de probabilités, même dans le cadre d'une application restreinte dont le périmètre est bien défini. Nous n'avons pas le choix : il faut être en mesure de pouvoir accéder à cette donnée à la volée, lors de l'exécution de l'algorithme de Monte-Carlo.

La formulation intégrale de la luminance, une fois reprise dans le cadre de la technique des collisions nulles (permettant de tenir compte de l'hétérogénéité du milieu semi-transparent), permet de faire apparaître un algorithme de Monte-Carlo qui résoudra stochastiquement la luminance monochromatique (voir [Mésio-Star, 2026]). Ces algorithmes mettent en évidence :

- la probabilité idéale associée au choix d'une transition j :

$$p(\nu, j, \vec{x}) = \frac{\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})}{\sum_{j=1}^{N_t} \hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})} \quad (5)$$

- la probabilité idéale d'apparition d'un évènement d'absorption :

$$p_a(\nu, \vec{x}) = \frac{h_{\nu,j}(\vec{x})}{\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})} \quad (6)$$

où $\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})$ est un majorant de $h_{\nu,j}(\vec{x})$, la contribution de la transition j au coefficient d'absorption monochromatique en $\vec{x}$. On notera $\hat{k}_\nu = \sum_{j=1}^{N_t} \hat{h}_{\nu,j}$ le majorant du coefficient d'absorption k_ν . L'apparition de ces majorants est inhérente à la technique de collision nulle, initialement développée par Mathieu Galtier (voir [Galtier, 2014]), et qui a fait l'objet de nombreuses publications (par exemple [Galtier, 2013, Galtier et al., 2016]).

Il faut préciser que les majorants peuvent être quelconques. La seule contrainte est que $\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x}) > h_{\nu,j}(\vec{x})$ (forcément) de façon à ce que la valeur de leur rapport soit bien située dans l'intervalle $[0, 1]$, donc qu'elle soit interprétable comme une probabilité. La valeur des majorants n'affecte pas

les résultats de l’algorithme de Monte-Carlo, seulement sa vitesse de convergence. Pourquoi, dans ce cas, ne pas prendre une valeur de $\hat{h}$ systématiquement infinie ? Tout simplement car la probabilité d’absorption tendrait dans ce cas vers zéro, tandis que la probabilité complémentaire (définissant l’occurrence d’un évènement de collision nulle) tendrait vers 1, ce qui rendrait l’algorithme inutilisable. L’optimum, en termes de convergence numérique, est atteint lorsque $\hat{h}$ est la valeur maximale que peut prendre h dans le milieu semi-transparent.

Nous avons maintenant remplacé le problème d’identifier des probabilités (notamment celles d’échantillonner les transitions) par la question de savoir évaluer le majorant de $h_{\nu,j}$ en n’importe quelle position du système, et pour n’importe quelle fréquence ν .

Pour résoudre ce point, nous avons développé une méthode basée sur l’utilisation d’un arbre hiérarchique binaire. La technique est décrite dans le manuscrit de thèse de Yaniss Nyffenegger ([Nyffenegger-Pere, 2023]). En termes d’outils, c’est la librairie *star-line* développée par Mésostar qui permet de construire cet arbre binaire, et de le parcourir. Pour une fréquence donnée, à l’issue de l’exploration de l’arbre, on aura échantillonné une transition au prorata du jeu de probabilité $p(\nu, j)$ (pour laquelle il est alors possible de calculer $h_{\nu,j}(\vec{x})$), et on connaîtra la valeur de $\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})$. Il sera donc possible de calculer la probabilité $p_a(\nu, \vec{x})$ que la collision courante corresponde à une absorption.

La méthode de construction de l’arbre binaire de transitions est basée sur les étapes suivantes :

- un partitionnement de l’espace des transitions ; toutes les transitions qu’il est nécessaire de prendre en compte pour effectuer le calcul de transfert radiatif ciblé sont présentes au plus haut niveau de l’arbre ($n=0$) sont divisées en deux groupes au niveau 1 (qui comporte donc deux nœuds) selon un critère portant sur leur fréquence centrale. Chacun de ces nœuds donne lui-même naissance à deux nouveaux nœuds au niveau 2 (qui comprend donc quatre nœuds), etc. Les nœuds du dernier niveau sont appelés les feuilles de l’arbre. Il est mentionné dans la thèse de Y. Nyffenegger que, pour des soucis de simplicité, chacune

de ces feuilles comprend une unique transition. Nous avons depuis levé cette contrainte : le nombre de transitions dans les feuilles de l'arbre peut être quelconque, ce qui alourdit un peu le temps de calcul de l'algorithme de transfert radiatif, mais permet de réduire drastiquement la taille mémoire des arbres de transitions.

- le calcul du majorant du coefficient d'absorption pour chaque feuille ; à l'intérieur d'une feuille, seul un petit nombre de transitions est maintenant présent. Ce qui permet de définir un intervalle spectral associé à cette feuille (en tenant compte de la troncature requise sur les profils de transition $f_{\nu,j}$). L'idée est de construire un maillage spectral (en fréquence) permettant de discrétiser cet intervalle spectral. Ce maillage est plus raffiné au voisinage des centres des transitions, et plus relâché autour.
- la construction de la fonction majorante par nœud, également appelée polyligne ; chaque point de notre maillage spectral (toujours dans une feuille) se voit affecté une valeur du majorant du champ de coefficient d'absorption, et on suppose une évolution linéaire de ce majorant entre deux points successifs. Démarre alors une étape de remontée de l'arbre : pour chaque niveau situé plus haut que les feuilles, il s'agit de sommer les polygones des deux nœuds du niveau inférieur, de façon à construire la polygône du nœud courant. Cette étape est répétée jusqu'au plus haut niveau de l'arbre.

Il s'agit d'un résumé très rapide permettant de se faire une première idée. Toutes les étapes de construction de l'arbre sont décrites dans tous les détails dans le manuscrit de thèse de Y. Nyffenegger – avec des schémas !

Cet arbre de transitions est utilisé de la façon suivante dans un algorithme de transfert radiatif de Monte-Carlo, sachant qu'on s'intéresse à la résolution de l'équation de transfert radiatif pour une fréquence ν donnée, qui a déjà été échantillonnée préalablement :

- partant du niveau le plus haut de l'arbre (niveau 0), on dispose de $\hat{k}_{\nu}^0$, le majorant du coefficient d'absorption du milieu pour la fréquence ν . Dans cette notation, l'exposant donne l'indice du niveau de l'arbre. Ce

majorant est obtenu par interpolation linéaire de la polyligne correspondante à ce niveau.

- on souhaite maintenant descendre d'un niveau (donc accéder au niveau 1). Ce niveau comporte deux nœuds, et un majorant du coefficient d'absorption (pour le niveau 1) peut être obtenu de la même manière, pour chaque nœud. Notons-les $\hat{k}_{\nu,1}^1$ et $\hat{k}_{\nu,2}^1$; l'indice 1 ou 2 indique le nœud.
- on définit tout simplement p_1^0 et p_2^0 , les probabilités de choisir le nœud 1 ou le nœud 2 du niveau supérieur, en partant du niveau 0 :

$$\begin{cases} p_1^0 = \frac{\hat{k}_{\nu,1}^1}{\hat{k}_{\nu}^0} \\ p_2^0 = \frac{\hat{k}_{\nu,2}^1}{\hat{k}_{\nu}^0} \end{cases} \quad (7)$$

Il ne reste plus alors qu'à effectuer le test de Bernouilli correspondant pour choisir un des deux nœuds.

- cette étape est répétée pour descendre l'arbre de transitions, niveau après niveau. Étant donné qu'il s'agit d'un arbre binaire, on dispose de deux probabilités pour chaque niveau i , qui permettent de choisir le nœud du niveau $i + 1$:

$$\begin{cases} p_1^i = \frac{\hat{k}_{\nu,1}^{i+1}}{\hat{k}_{\nu,node}^i} \\ p_2^i = \frac{\hat{k}_{\nu,2}^{i+1}}{\hat{k}_{\nu,node}^i} \end{cases} \quad (8)$$

Ici, l'indice *node* représente le nœud courant (1 ou 2) sélectionné à l'étape précédente, pour le niveau courant i .

- une fois arrivés à l'avant-dernier niveau ($n - 1$), on effectue donc le choix du nœud qui sera retenu au niveau n . Il s'agit donc de sélectionner une feuille de l'arbre. $\hat{k}_{\nu,1}^n$ et $\hat{k}_{\nu,2}^n$ représentent donc les majorants du coefficient d'absorption pour ces deux feuilles (pour le groupe de transitions associé à la feuille, donc possiblement pour une transition unique).

Supposons que la suite de tests de Bernouilli ait toujours échantillonné le

nœud numéro 1, pour chaque étape de la descente de l'arbre. La probabilité de retenir la première feuille de l'arbre est donc :

$$p_1^0 p_1^1 \dots p_1^{n-1} = \frac{\hat{k}_{\nu,1}^1}{\hat{k}_{\nu}^0} \frac{\hat{k}_{\nu,1}^2}{\hat{k}_{\nu,1}^1} \dots \frac{\hat{k}_{\nu,1}^n}{\hat{k}_{\nu,1}^{n-1}} = \frac{\hat{k}_{\nu,1}^n}{\hat{k}_{\nu}^0} \quad (9)$$

Si la feuille contient une seule transition, $\hat{k}_{\nu,1}^n$ est égal à $\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})$, le majorant de la contribution de cette transition (j) au coefficient d'absorption local, et la probabilité précédente (celle d'avoir échantillonné la feuille) est donc :

$$p_1^0 p_1^1 \dots p_1^{n-1} = \frac{\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})}{\sum_{j=1}^{N_t} \hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})} \quad (10)$$

On retrouve donc la probabilité idéale d'avoir échantillonné la transition j (voir eq.5). En d'autres termes, l'exploration de l'arbre permet d'échantillonner une transition unique selon la probabilité idéale. Sachant quelle transition a été sélectionnée, il est maintenant possible d'évaluer à la volée $h_{\nu,j}(\vec{x})$, et donc d'obtenir la probabilité d'absorption associée à la collision en $\vec{x}$ (voir eq.6).

Comme mentionné plus haut, la proposition est généralisable dans le cas où la feuille contient plusieurs transitions ; dans ce cas-là, $\hat{k}_{\nu,1}^n$ n'est plus égal à $\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})$ pour une transition unique, mais pour le groupe de transitions concerné par la feuille.

La situation décrite ici est celle où un seul arbre de transitions est utilisé pour tout l'espace (pour l'ensemble du milieu semi-transparent). Si les spectres d'absorption du milieu présentent de grandes hétérogénéités spatiales (par exemple, à cause de fortes variations de pression), il est possible de définir des zones spatiales (voxels) munies d'un arbre de transition différent. La seule contrainte est de manipuler des majorants du coefficient d'absorption dans la totalité de chaque voxel.

3 Les algorithmes de transfert radiatif

Les algorithmes de Monte-Carlo permettant d'évaluer une grandeur radiative en une position sonde (la luminance monochromatique, ou toute grandeur qui s'exprime comme une intégrale de la luminance monochromatique), en présence d'une source interne ou externe, ont été reformulés en incluant la méthode d'échantillonnage des transitions. Le cheminement est le suivant :

- écrire la solution générale du champ de luminance en présence d'un milieu semi-transparent absorbant et diffusant inhomogène, pour une source interne ou externe ; ces solutions font formellement apparaître des épaisseurs optiques et des transmissivités impossibles à évaluer de façon analytique en toute généralité, et sont forcément récursives (à cause de la diffusion).
- introduire le formalisme des collisions nulles, qui permet, moyennant la connaissance d'un majorant du champ d'absorption, de se ramener à un milieu homogène équivalent. La reformulation associée permet de faire apparaître des expressions intégrales toujours récursives (à cause de la diffusion, mais également par introduction d'un nouveau type de collision – les collisions nulles, ou fictives) mais dans lesquelles les épaisseurs optiques s'expriment comme le produit d'une longueur et du majorant du coefficient d'extinction. Il est maintenant possible d'échantillonner des longueurs jusqu'à la prochaine collision dans le milieu.
- dans le cas présent : exprimer le champ de coefficient d'absorption (et possiblement de diffusion) comme la somme des contributions d'un certain nombre de transitions, plus la contribution d'éventuels continus. Cette étape permet également d'introduire les probabilités dont il est question à la section précédente : celle d'échantillonner une transition (ou un groupe de transitions) et celle que la collision courante soit un évènement d'absorption.

Tout le formalisme est donné dans le document décrivant les algorithmes de transfert radiatif par Monte-Carlo [Mésos-Star, 2026]. Voir les paragraphes

4.2.2 pour une source interne au milieu, et 4.3.2 quand la source est externe (rayonnement solaire).

Ce document doit normalement être distribué en même temps que le présent texte. Si ce n'est pas le cas, il est possible de le récupérer en clonant le dépôt git suivant (et en cherchant dans le répertoire *RT_algorithms*) :

`git@gitlab.com:meso-star/star-guide.git`

À titre d'exemple, imaginons que l'on veuille évaluer la transmissivité d'une colonne de gaz purement absorbant, mais inhomogène, de longueur L , sur un intervalle spectral $[\nu_{min}, \nu_{max}]$:

$$\mathcal{T}(0, L) = \frac{1}{\nu_{max} - \nu_{min}} \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \mathcal{T}_{\nu}(0, L) d\nu \quad (11)$$

avec $\mathcal{T}_{\nu}(0, L)$ la transmissivité monochromatique :

$$\mathcal{T}_{\nu}(0, L) = \exp\left(-\int_0^L k_{\nu}(x) dx\right) \quad (12)$$

La relation 11 peut toujours être reformulée de façon à faire apparaître un algorithme de Monte-Carlo :

$$\mathcal{T}(0, L) = \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \frac{1}{\nu_{max} - \nu_{min}} d\nu \left\{ \mathcal{T}_{\nu}(0, L) \right\} \quad (13)$$

La transmissivité totale $\mathcal{T}(0, L)$ peut ainsi être vue comme l'espérance d'une variable aléatoire qui prend pour valeur la transmissivité monochromatique $\mathcal{T}_{\nu}(0, L)$ (qui sera évaluée comme la moyenne des poids pour un grand nombre de réalisations), et propose d'utiliser une densité de probabilité uniforme pour échantillonner la fréquence ν associée à chaque réalisation.

Cette transmissivité monochromatique peut s'écrire, sous le formalisme des collisions nulles :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\nu}(x_0, L) = & \int_0^{+\infty} \hat{k}_{\nu} \exp(-\hat{k}_{\nu} \sigma) d\sigma \left\{ 1. \mathcal{H}(\sigma > L - x_0) \right. \\ & \left. + \left[\frac{k_{\nu}(x_1)}{\hat{k}_{\nu}} 0 + \left(1 - \frac{k_{\nu}(x_1)}{\hat{k}_{\nu}}\right) \mathcal{T}_{\nu}(x_1, L) \right] \mathcal{H}(\sigma < L - x_0) \right\} \end{aligned} \quad (14)$$

où $\mathcal{H}$ représente l'opérateur de Heaviside.

Dans la version où le champ de coefficient d'absorption k_ν est connu, l'algorithme associé à l'évaluation de cette transmissivité monochromatique consiste donc à partir d'une abscisse $x_0 = 0$ et à évaluer une longueur σ selon la densité de probabilité $\hat{k}_\nu \exp(-\hat{k}_\nu \sigma)$ (donc, en milieu équivalent homogène). La valeur de σ est ensuite comparée à la longueur qu'il reste à traverser (ici, $L - x_0 = L$) : si $\sigma > L - x_0$, la réalisation s'achève avec un poids de 1. Sinon, on considère qu'une collision vient d'avoir lieu à l'abscisse $x_1 = x_0 + \sigma$. Il faut évaluer le coefficient d'absorption monochromatique $k_\nu(x_1)$ pour cette position, et le comparer à la valeur du majorant $\hat{k}_\nu$ du milieu homogène équivalent. La probabilité que la collision soit une absorption est $k_\nu(x_1)/\hat{k}_\nu$, auquel cas la réalisation s'achève avec un poids nul. Et il y a une probabilité complémentaire $1 - k_\nu(x_1)/\hat{k}_\nu$ que la collision soit une collision fictive (nulle). Il faut alors maintenant évaluer récursivement la transmissivité monochromatique entre la position x_1 et L .

Nous pouvons maintenant introduire l'hypothèse selon laquelle le coefficient d'absorption monochromatique k_ν est égal à la somme des contributions d'un certain nombre de transitions $h_{\nu,j}$ (relation 4). Nous pouvons aussi directement introduire une probabilité arbitraire $p_\nu(j)$ d'échantillonner la transition indice j :

$$k_\nu(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{N_t} p(\nu, j, \vec{x}) \left\{ \frac{h_{\nu,j,\vec{x}}}{p(\nu, j, \vec{x})} \right\} \quad (15)$$

La relation 14 devient alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_\nu(x_0, L) = & \int_0^{+\infty} \hat{k}_\nu \exp(-\hat{k}_\nu \sigma) d\sigma \left\{ 1. \mathcal{H}(\sigma > L - x_0) \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^{N_t} p(\nu, j, \vec{x}_1) \left[p_a(\nu, \vec{x}_1) 0 + (1 - p_a(\nu, \vec{x}_1)) \mathcal{T}_\nu(x_1, L) \right] \mathcal{H}(\sigma < L - x_0) \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

avec une probabilité d'absorption égale à : $p_a(\nu, \vec{x}) = \frac{h_{\nu,j}(\vec{x})}{\hat{k}_\nu(\vec{x}) p(\nu, j, \vec{x})}$; dans le

cas où on décide d'utiliser $p(\nu, j, \vec{x}) = \frac{\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})}{\sum_{j=1}^{N_t} \hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})}$, on retrouve $p_a(\nu, \vec{x}) = \frac{h_{\nu,j}(\vec{x})}{\hat{h}_{\nu,j}(\vec{x})}$ (relation 6).

L'algorithme de Monte-Carlo associé au calcul de la transmissivité $\mathcal{T}(0, L)$ consiste à évaluer la moyenne (et l'écart-type) des poids pour un grand nombre de réalisations. Chacune consiste à :

1. échantillonner une fréquence ν de façon uniforme sur l'intervalle $[\nu_{min}, \nu_{max}]$ (eq. 13)
2. imposer $x_0 = 0$
3. échantillonner une longueur de collision σ selon la densité de probabilité $\hat{k}_\nu \exp(-\hat{k}_\nu \sigma)$; la valeur du majorant du champ de coefficient d'absorption $\hat{k}_\nu$ est donnée au niveau 0 de l'arbre de transitions. Cette distance σ permet de définir une position de collision $x_1 = x_0 + \sigma$
4. si $\sigma > L - x_0$, la réalisation s'arrête avec un poids égal à 1
5. sinon, il faut échantillonner une transition j selon le jeu de probabilités $\{p(\nu, j, \vec{x}_1)\}$ (il suffit de descendre l'arbre binaire jusqu'à une feuille). Une fois la feuille atteinte, on peut évaluer $h_{\nu,j}$ et donc $p_a(\nu, \vec{x})$, la probabilité que la collision soit une absorption.
6. on échantillonne enfin la nature de la collision ; s'il s'agit d'une absorption, la réalisation s'arrête avec un poids nul. Sinon, il s'agit d'une collision fictive, et l'algorithme reboucle à l'étape 3 pour la position x_1 .

La moyenne des 1 (chemin transmis) et des 0 (chemin absorbé) ainsi obtenus reconstruit l'exponentielle de la relation 14, sans qu'il soit jamais nécessaire d'évaluer la valeur du coefficient d'absorption dans le milieu. On évalue en revanche la contribution de chaque transition échantillonnée à ce coefficient d'absorption, pour les conditions locales de pression, de température et de concentration d'espèces.

Références

- [Galtier, 2013] Galtier, M. (2013). Integral formulation of null-collision Monte-Carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 125 :57–68.
- [Galtier, 2014] Galtier, M. (2014). *Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives*. Theses, Ecole des Mines d'Albi-Carmaux.
- [Galtier et al., 2016] Galtier, M., S., B., Dauchet, J., El Hafi, M., Eymet, V., Fournier, R., Roger, M., Spiesser, C., and Terrée, G. (2016). Radiative transfer and spectroscopic databases : a line-sampling Monte-Carlo approach. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 192 :83–97.
- [Mésio-Star, 2026] Mésio-Star (2026). Monte-carlo algorithms for radiative transfer simulation. *Documentation interne*.
- [Nyffenegger-Pere, 2023] Nyffenegger-Pere, Y. (2023). *Coupler le rayonnement et la spectroscopie raie par raie dans un même algorithme de Monte Carlo : permettre le calcul de référence des forçages radiatifs*. Theses, Université Paul Sabatier - Toulouse III.