

# La méthode aux $k$ -moments pour la modélisation des propriétés radiatives des milieux en combustion

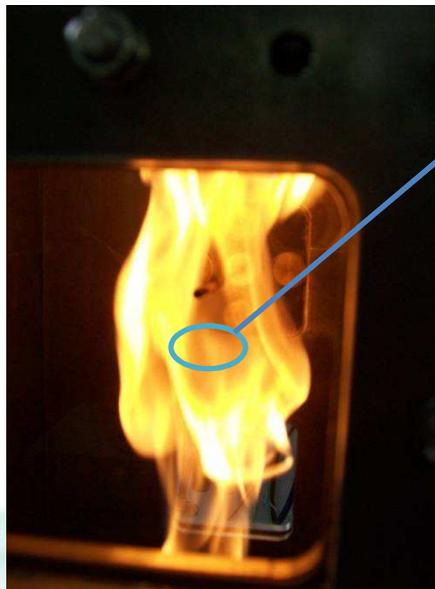
*Frédéric ANDRE, Rodolphe VAILLON*

Journées SFT – EMAC 25-26/03/10

## CONTEXTE

### 3 thèmes d'étude au CETHIL

- Propriétés radiatives des gaz (PRG).
- Propriétés optiques et radiatives des suies (PORS).
- Couplages rayonnement-combustion (CRC).



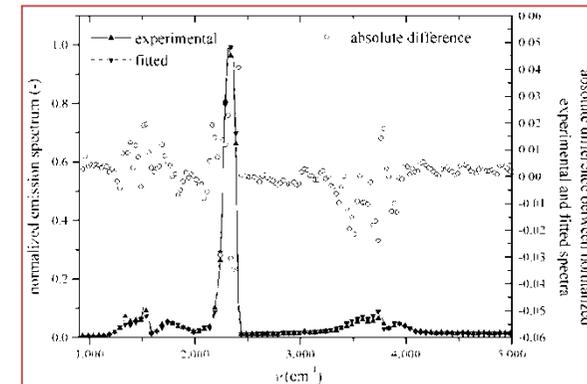
Gaz ( $\text{CO}_2$ ,  
 $\text{H}_2\text{O}$ ,...) et suies

Milieu en combustion = mise  
en jeu de phénomènes multi-physiques

Aérodynamique

Thermochimie

Transferts  
thermiques  
dont  
Rayonnement



Nécessité de développer des **modèles approchés de rayonnement des gaz** toujours plus performants :

- en terme de précision,
- en diminuant le coût de calcul,
- permettant de traiter des situations complexes.

Approche Raie-Par-Raie =  $10^6$  ETR/direction.

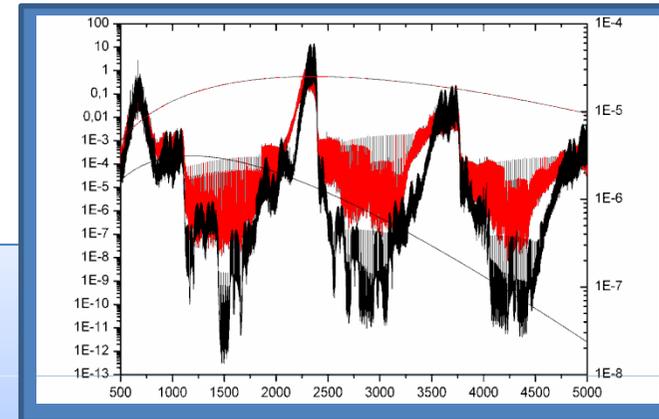
Moyenne spectrale

$$\bar{I}_v^{\Delta\nu}(s) = \Delta\nu^{-1} \int_{\Delta\nu} I_v(s) d\nu$$

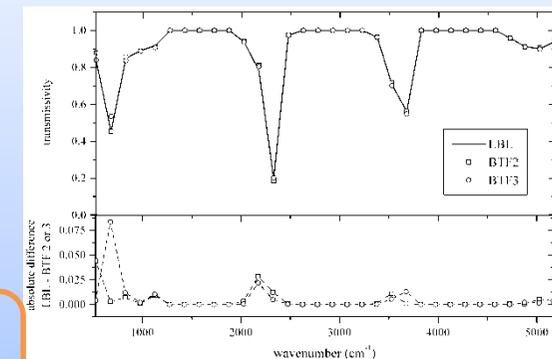
$$\bar{I}_v^{\Delta\nu}(s) = \bar{I}_{b,v}^{\Delta\nu}(0) \bar{\tau}_{b,v}^{\Delta\nu}[0, s, T(0)] + \int_{s'=0}^{s'=s} \bar{I}_{b,v}^{\Delta\nu}(s') \frac{\partial \bar{\tau}_{b,v}^{\Delta\nu}[s', s, T(s')]}{\partial s'} ds'$$

Quelques centaines (**SNB, CK**) à quelques dizaines (**ADF, SLW,...**) d'ETR/direction.

$$\bar{\tau}_{b,v}^{\Delta\nu}[s', s, T(s')] = \left[ \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} I_{b,v}(s') d\nu \right]^{-1} \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp \left[ - \int_{s''=s'}^{s''=s} x(s'') P(s'') \kappa_v(s'') ds'' \right] I_{b,v}(s') d\nu$$



$\kappa_v$ , CO<sub>2</sub>, 600K, 1200K



$\bar{\tau}_{b,v}^{\Delta\nu}[s', s, T(s')]$ , CO<sub>2</sub>, 300K

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics

Le point de départ des modèles en  $k$ -distributions consiste à se fixer une condition thermophysique appelée « **référence** ».

On écrit alors la fonction de transmission totale d'un trajet homogène isotherme de longueur  $l$  de gaz dans la condition thermophysique donnée par  $\underline{\phi}^{ref}$  et pondérée par la fonction de Planck à la température  $T_P$ :

$$\bar{\tau}(l, T_P, \underline{\phi}^{ref}) = \frac{\pi}{\sigma T_P^4} \int_{\mathbb{R}=[0; \nu_{\max}]} \exp[-\kappa_{\nu}(\underline{\phi}^{ref})] I_{b,\nu}(T_P) d\nu$$

comme une somme de série (Riemann) :

$$\bar{\tau}(l, T_P, \underline{\phi}^{ref}) = \lim_{Q \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{\pi}{\sigma T_P^4} \frac{\nu_{\max}}{Q} \sum_{q=1}^Q \exp[-\kappa_{\nu=q\nu_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref}) l] I_{b,\nu=q\nu_{\max}/Q}(T_P) \right\}$$

$$\tilde{k}_0(\underline{\phi}^{ref}) = \tilde{k}_{\min}(\underline{\phi}^{ref}) \quad \tilde{k}_1(\underline{\phi}^{ref}) \quad \tilde{k}_2(\underline{\phi}^{ref}) \quad \dots \quad \tilde{k}_{N-1}(\underline{\phi}^{ref}) \quad \tilde{k}_N(\underline{\phi}^{ref}) = \tilde{k}_{\max}(\underline{\phi}^{ref})$$

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics

On réécrit alors la somme de série en la réordonnant par classes de valeurs de  $\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref})$  :

$$\bar{\tau}(l, T_P, \underline{\phi}^{ref}) = \lim_{Q \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{\pi}{\sigma T_P^4} \frac{v_{\max}}{Q} \sum_{n=1}^N \left\{ \sum_{q/\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref}) \in [\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}); \tilde{k}_n(\underline{\phi}^{ref})]} \exp[-\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref})l] I_{b,v=qv_{\max}/Q}(T_P) \right\} \right\}$$

$$= \lim_{Q \rightarrow +\infty} \left\{ \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{\pi}{\sigma T_P^4} \delta v \sum_{q/\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref}) \in [\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}); \tilde{k}_n(\underline{\phi}^{ref})]} I_{b,v=qv_{\max}/Q}(T_P) \right\} \times \frac{\delta v \sum_{q/\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref}) \in [\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}); \tilde{k}_n(\underline{\phi}^{ref})]} \exp[-\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref})l] I_{b,v=qv_{\max}/Q}(T_P)}{\delta v \sum_{q/\kappa_{v=qv_{\max}/Q}(\underline{\phi}^{ref}) \in [\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}); \tilde{k}_n(\underline{\phi}^{ref})]} I_{b,v=qv_{\max}/Q}(T_P)} \right\}$$

poids
Transmittivité moyenne

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics

On peut réécrire plus simplement la relation précédente sous la forme :

$$\tau(l, T_P, \underline{\phi}^{ref}) = \underbrace{a_0(T_P, \underline{\phi}^{ref})}_{\text{transparence}} + \sum_{n=1}^N a_n(T_P, \underline{\phi}^{ref}) \underbrace{\bar{\tau}_{b,v}^{\Delta v(n, \underline{\phi}^{ref})}}_{\text{}}(l, T_P, \underline{\phi}^{ref})$$

Ce qui va différencier les modèles globaux entre eux (ADF, SLW,..) c'est essentiellement la manière de calculer  $\bar{\tau}_{b,v}^{\Delta v}$ .

Lien avec les  $k$ -distributions ?

Si on note  $f$  la fonction de distribution de  $k$  alors, par définition :

$$f\left[T_P, \underline{\phi}^{ref}, \tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref})\right] d\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}) = \lim_{\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}) \rightarrow \tilde{k}_n(\underline{\phi}^{ref})} a_n(T_P, \underline{\phi}^{ref})$$

**La relation précédente est vraie DANS LA CONDITION DE REFERENCE.**

Des hypothèses complémentaires sont nécessaires dans le cas général (= scaling, correlation). Ces hypothèses sont la principale source d'erreur des modèles en  $k$ -distributions.

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics

Modèles standards, hypothèses standards = spectres corrélés :

$$\forall \nu \in \mathbb{R}, \kappa_{\nu}(\underline{\phi}) = h\left[\underline{\phi}, \underline{\phi}^{ref}, \kappa_{\nu}(\underline{\phi}^{ref})\right]$$

où  $h$  est une fonction monotone.

**Conséquences :**

$$f\left[T_P, \underline{\phi}^{ref}, \tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref})\right] d\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}) = f\left[T_P, \underline{\phi}, \tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi})\right] d\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}) *$$

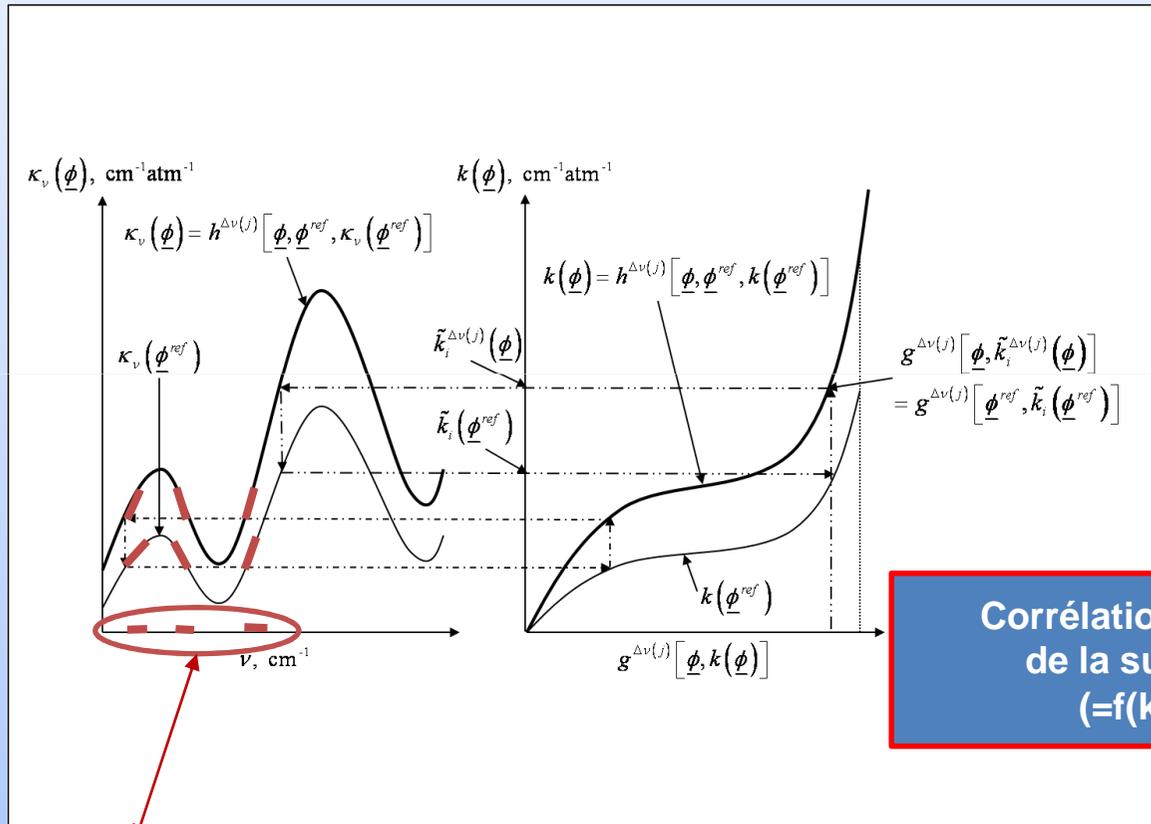
$$\bar{\tau}_{b,\nu}^{\Delta\nu}(l, T_P, \underline{\phi}) = \int_0^{+\infty} f(T_P, \underline{\phi}, k) \exp(-kl) dk = \int_0^{+\infty} f(T_P, \underline{\phi}, k) \exp\left[-h(\underline{\phi}, \underline{\phi}^{ref}, k^{ref})l\right] dk$$

$$= \int_0^{+\infty} f(T_P, \underline{\phi}^{ref}, k^{ref}) \exp\left[-h(\underline{\phi}, \underline{\phi}^{ref}, k^{ref})l\right] dk^{ref} \approx a_0(T_P, \underline{\phi}^{ref}) + \sum_{n=1}^N a_n(T_P, \underline{\phi}^{ref}) \bar{\tau}_{b,\nu}^{\Delta\nu(n, \underline{\phi}^{ref})}(l, T_P, \underline{\phi})$$

$$\bar{\tau}_{b,\nu}^{\Delta\nu}(l, T_P, \underline{\phi}) = \frac{1}{a_n(T_P, \underline{\phi}^{ref})} \int_{\tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref})}^{\tilde{k}_n(\underline{\phi}^{ref})} f(T_P, \underline{\phi}^{ref}, k^{ref}) \exp\left[-h(\underline{\phi}, \underline{\phi}^{ref}, k^{ref})l\right] dk^{ref} \approx \exp\left[-h(\underline{\phi}, \underline{\phi}^{ref}, \tilde{k}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}))l\right]$$

\* Les équations implicites parfois rencontrées viennent de là...

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics



**Corrélation = conservation  
 de la surface projetée  
 (=  $f(k) \cdot dk \cdot \sigma T_p^4 / \pi$ )**

$$f[T_P, \underline{\phi}^{ref}, \tilde{\kappa}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref})] d\tilde{\kappa}_{n-1}(\underline{\phi}^{ref}) = f[T_P, \underline{\phi}, \tilde{\kappa}_{n-1}(\underline{\phi})] d\tilde{\kappa}_{n-1}(\underline{\phi})$$

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics

En résumé, les modèles en  $k$ -distributions s'articulent autour de trois étapes de construction :

- choix d'une condition thermophysique de référence,
- **discrétisation** du spectre d'absorption par classes de valeurs de  $k$  (dans la condition de référence), ou **réordonnement** (c'est là qu'apparaît la notion de  **$k$ -distribution**),
- définition d'un lien entre le coefficient d'absorption dans la condition de référence et n'importe quelle autre condition thermophysique (ici qu'apparaissent les notions de **scaling**, **corrélation**,...).

D'où l'appellation classique en **Correlated- $k$  distributions (Ck)**

## Les modèles globaux en $k$ -distributions en quelques clics

Souvent, ces étapes n'apparaissent pas de façon explicite mais sous forme d'**hypothèses cachées** (Ex. introduire une quadrature numérique et l'inverser corrèle *implicitement* les spectres...sans que celà n'impose pour le faire de poser *explicitement* cette hypothèse de corrélation).

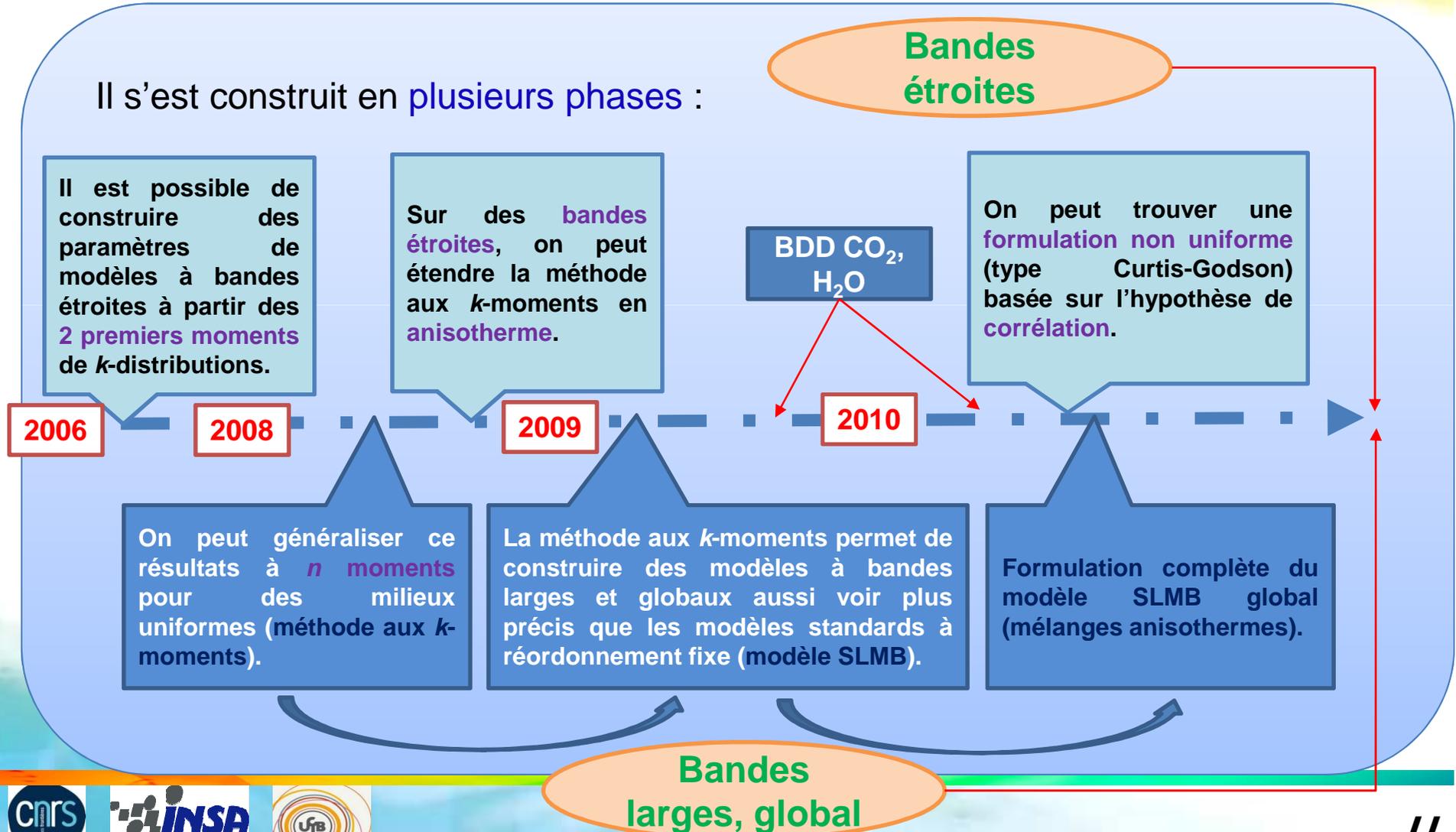
Ces **hypothèses cachées** sont les **sources d'erreurs** principales des modèles.

Les **connaître et les identifier** permet de délimiter les domaines d'applications des modèles, d'en proposer des **améliorations**,...

C'est sur ce constat qu'a été construit le **modèle SLMB**.

## Le modèle SLMB en quelques dates

Il s'est construit en plusieurs phases :



## Méthodologie originale développée

### Méthode aux moments de $k$

- le coefficient d'absorption du gaz (déterministe) est traité comme une variable aléatoire, au sens des distributions (approche de type  $k$ -distribution).
- les propriétés radiatives sont obtenues par l'intermédiaire des moments de  $k$  pondérés par la fonction de Planck.

$$\mu_{i,b}(s') = \left[ \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} I_{b,\nu}(s') d\nu \right]^{-1} \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} (\kappa_\nu)^i I_{b,\nu}(s') d\nu$$

$$\bar{\tau}_{b,\nu}^{\Delta\nu} [l, T(s')]_{(2)} = \exp \left\{ \frac{\mu_{1,b}^2(s')}{\mu_{2,b}(s') - \mu_{1,b}^2(s')} \left[ \sqrt{1 + 2xP(\mu_{1,b}(s)) \frac{\mu_{2,b}(s') - \mu_{1,b}^2(s')}{\mu_{1,b}^2(s')}} - 1 \right] \right\}$$

semblable au modèle de Malkmus pour des raies Lorentziennes.

- Moyenne de Planck de  $k \sim 1^{\text{er}}$  paramètre du « modèle de Malkmus »
- $k^2$  / Variance de  $k \sim 2^{\text{ème}}$  paramètre du « modèle de Malkmus »

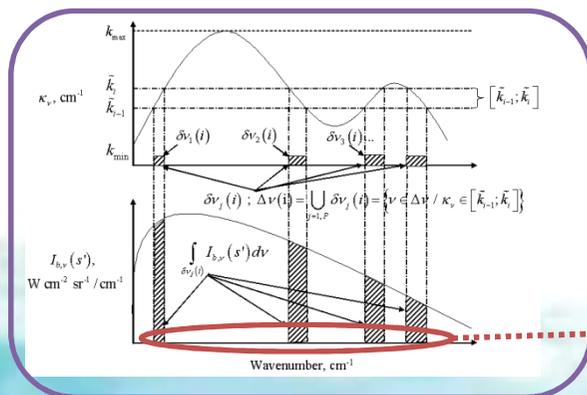
## Modèles associés développés

### Modèles SLMB (« Spectral Line Moment Based »)

application de la méthode aux  $k$ -moments à des spectres réordonnés.

*Avantages* la méthode :

- s'adapte à n'importe quel type de moyenne spectrale (étroites, larges, ensemble du spectre).
- fournit explicitement des formulations des transmittivités et  $k$ -distributions.
- reste à finaliser  
(formulation non uniforme, validation « exhaustive », intégration des suies).



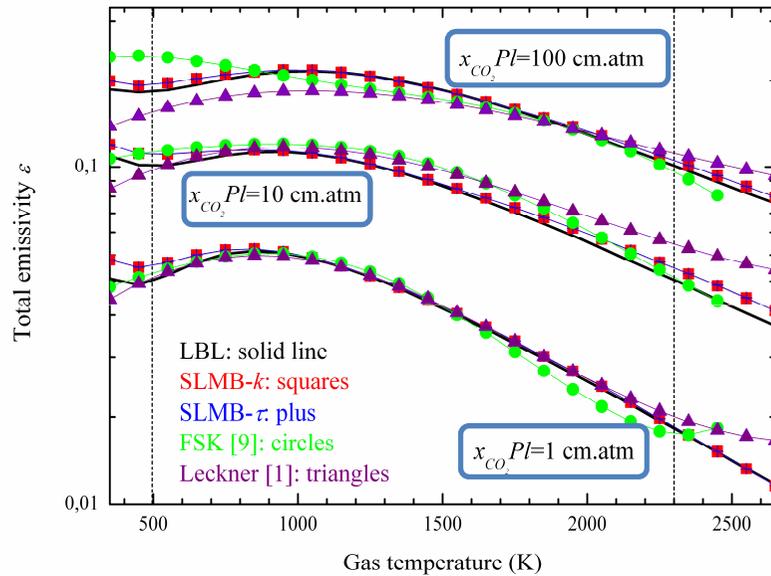
$$\tau(l, T_P, \underline{\phi}) = a_0(T_P, \underline{\phi}^{ref}) + \sum_{i=1}^N a_i(T_P, \underline{\phi}^{ref}) \bar{\tau}_{b,v}^{\Delta\nu(i, \underline{\phi}^{ref})}(l, T_P, \underline{\phi})$$

$$a_i(T_P, \underline{\phi}^{ref}) = a[T_P, \tilde{k}_{i-1}(\underline{\phi}^{ref}), \tilde{k}_i(\underline{\phi}^{ref})] = \frac{\pi}{\sigma T_P^4} \int_{\Delta\nu(i, \underline{\phi}^{ref})} I_{b,v}(T_P) d\nu$$

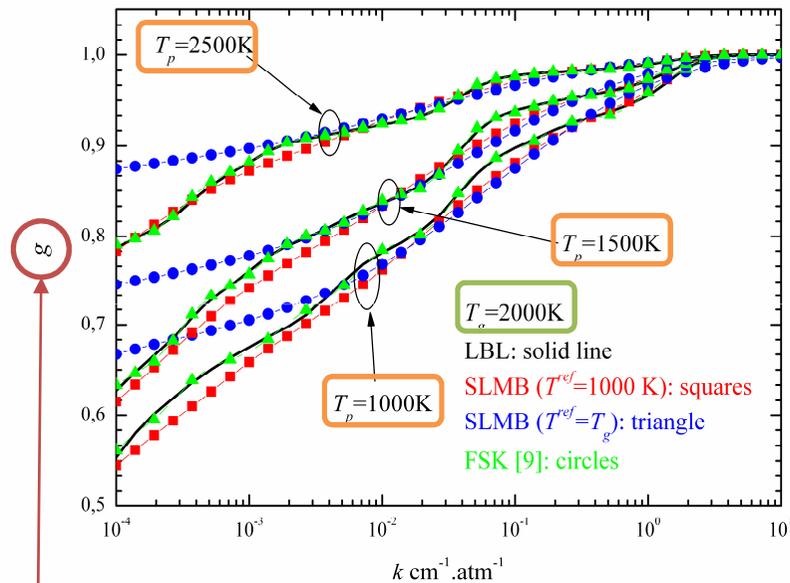
finalisation prévue à moyen terme

## Quelques résultats du modèle SLMB

- formulation en modèle global.
- bases de données associées : mises à disposition.



**Emissivités totales de colonnes uniformes de CO<sub>2</sub> pour différentes valeurs du produit  $x_{CO_2} Pl$  en fonction de la température du gaz.**



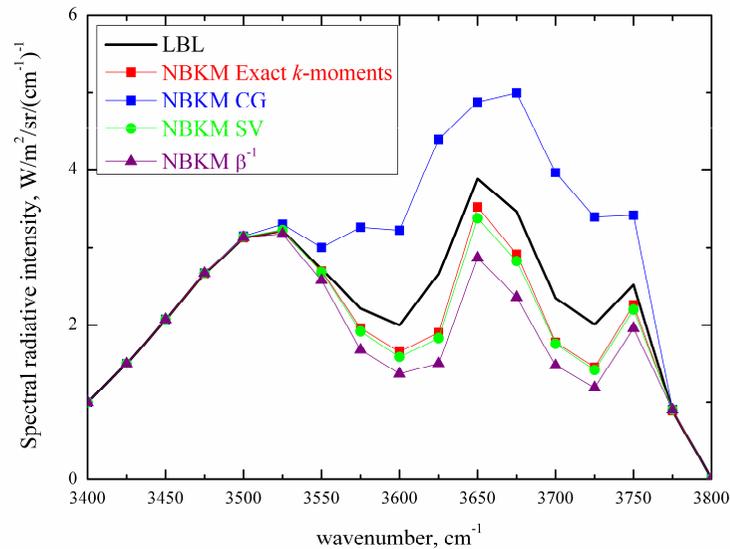
**Fonctions de distribution cumulées totales de CO<sub>2</sub> à 2000 K pour différentes températures de pondération par la fonction de Planck.**

$$g(T_p, \underline{\phi}, k) = a_0(T_p, \underline{\phi}^{ref}) + \sum_{i=1}^N a_i(T_p, \underline{\phi}^{ref}) g_{b,v}^{\Delta v(i, \underline{\phi}^{ref})}(T_p, \underline{\phi}, k)$$

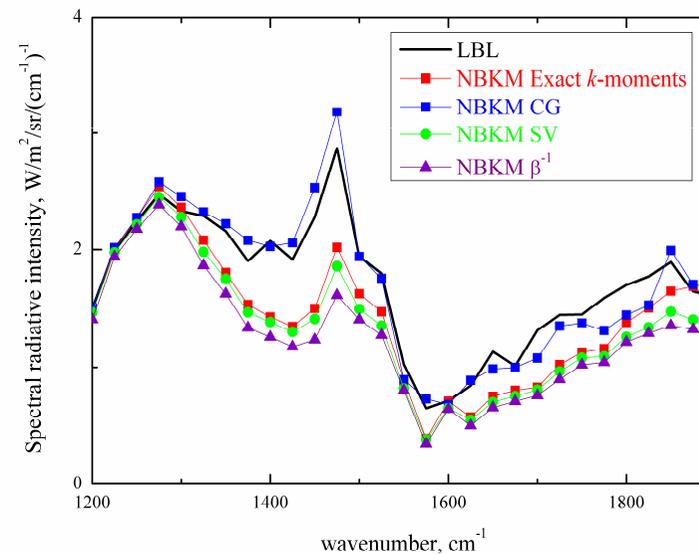
## Exemples de résultats de la méthode aux $k$ -moments anisotherme

### Hypothèses :

- spectres corrélés, fonctions de corrélation faiblement non linéaires.
- évolution linéaire de la variance de  $k$ .



$\text{CO}_2$ ,  $3715 \text{ cm}^{-1}$ ,  
(1500 K; 0,5), (500 K; 0,05)



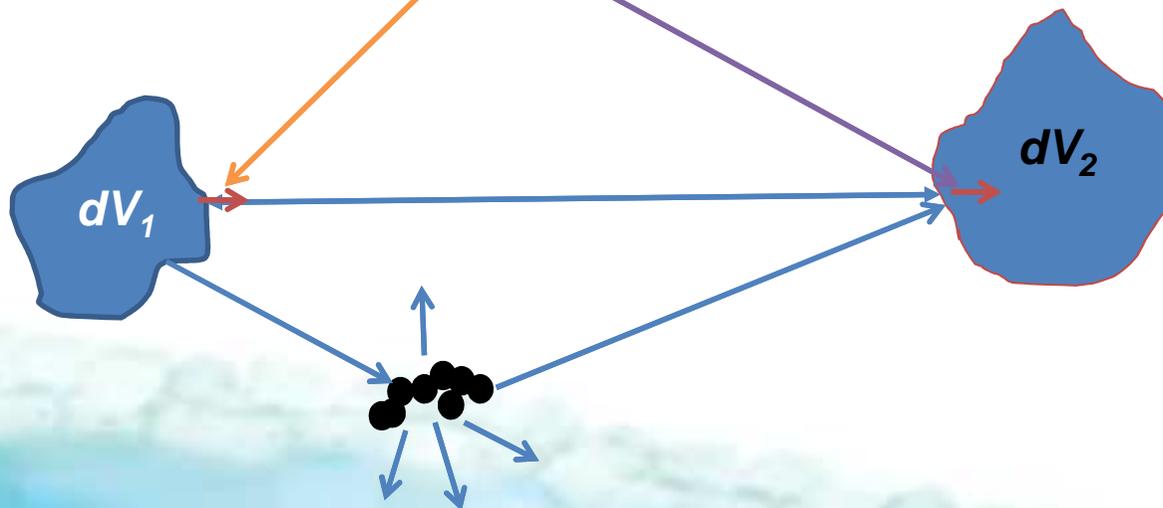
$\text{H}_2\text{O}$ ,  $1595 \text{ cm}^{-1}$ ,  
(1500 K; 0,5), (500 K; 0,05)

## Autres applications

### Flux nets échangés (utile en Monte Carlo réciproque)

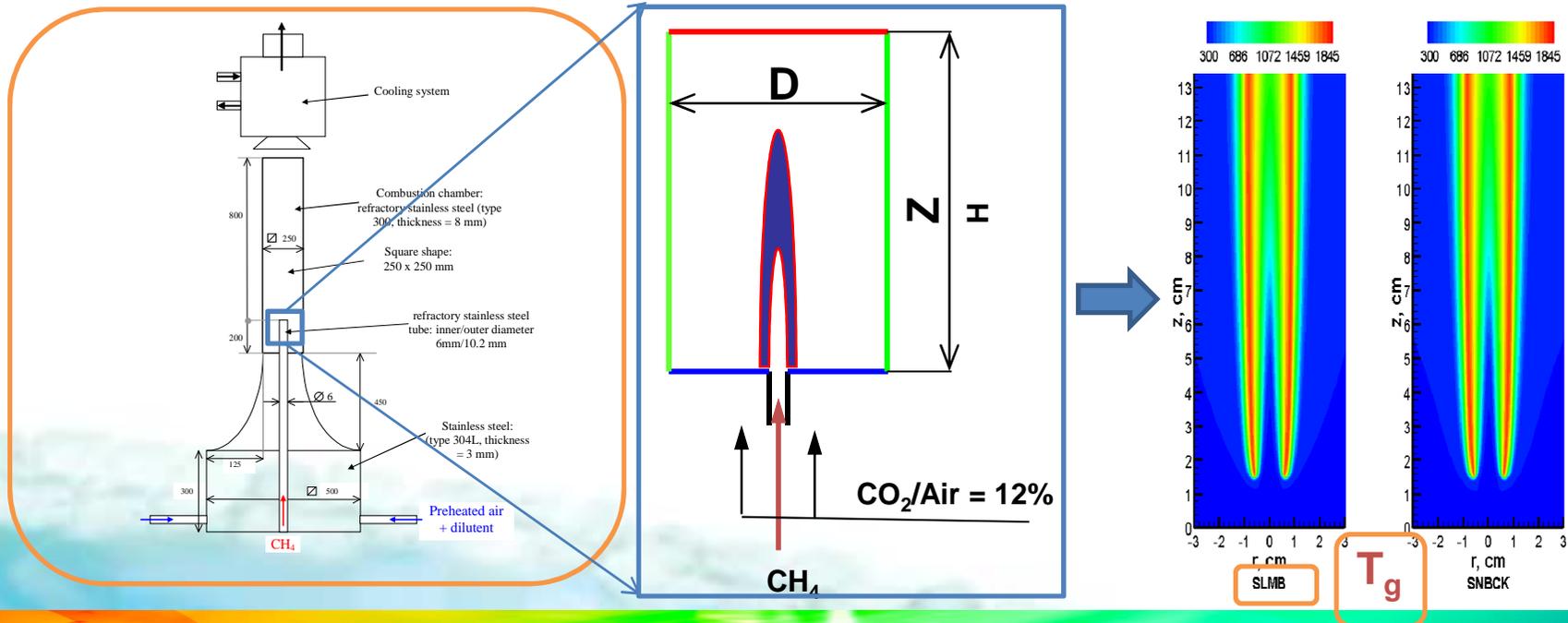
- calcul des flux aux parois, conditions aux limites thermiques (lien CRC).
- prise en compte de la diffusion par les particules (lien PORS).
- couplage via l'équation de l'énergie (puissance radiative) avec l'aérothermochimie (lien CRC).

$$\Phi_{dV_1 \rightleftharpoons dV_2} \propto \left[ T^4(dV_1) \frac{\partial^2 \tau[s', s, T(dV_1)]}{\partial s \partial s} - T^4(dV_2) \frac{\partial^2 \tau[s', s, T(dV_2)]}{\partial s' \partial s} \right]$$



## Etude des mécanismes de couplages rayonnement-aérothermochimie

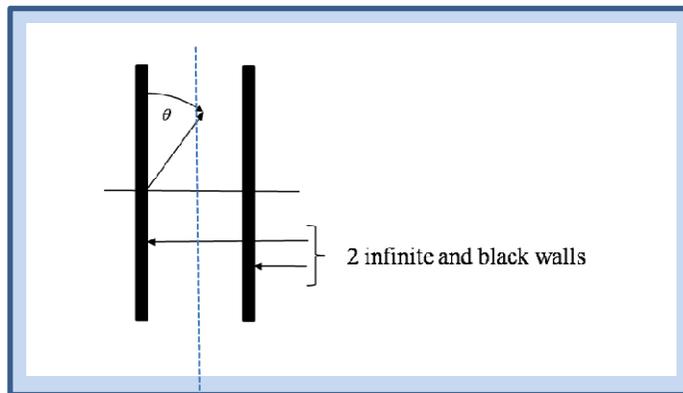
- différentes configurations sont étudiées expérimentalement au laboratoire (brûleur STREAM, flammes-parois).
- l'analyse radiative se fera par le biais de mesures de flux (radiométrie, spectroscopie) et des comparaisons pour évaluer les performances de simulations numériques.



## Interactions flammes-parois :

Problème modèle = 1D, plans parallèles infinis

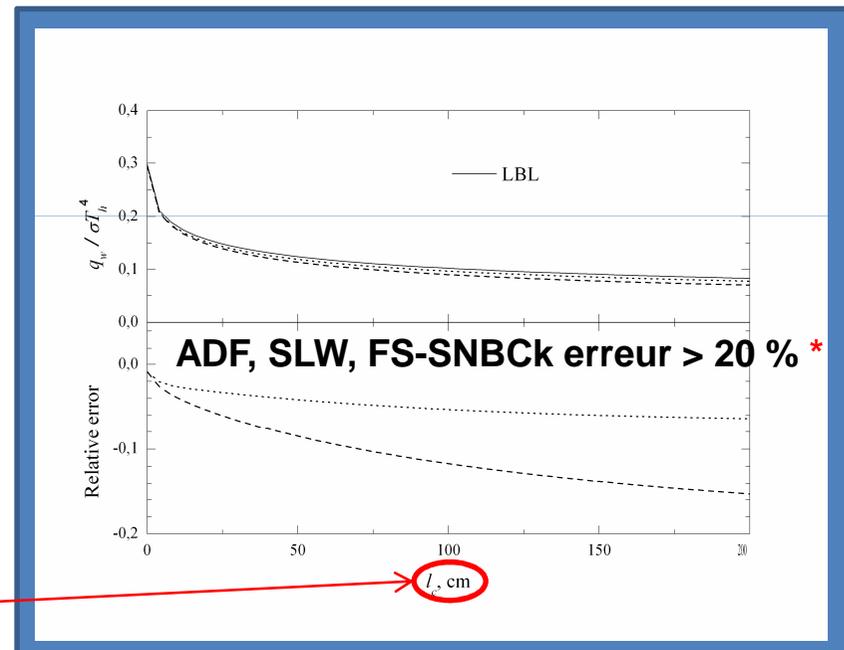
10 % CO<sub>2</sub>, 20 % H<sub>2</sub>O, 70 % N<sub>2</sub>



1000 K  
50 cm

300 K

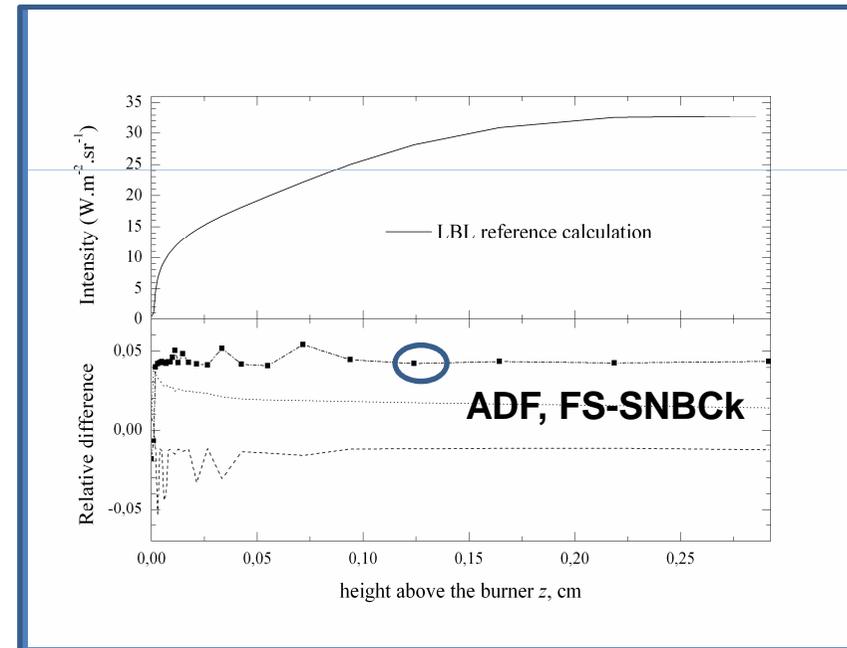
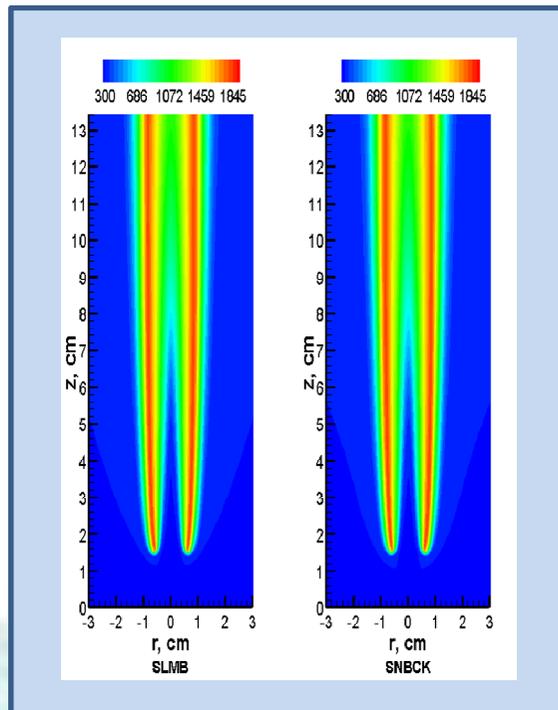
Longueur variable



•Semblable à des travaux réalisés à EM2C (Cf Thèse de Pierrot) ainsi que quelques travaux récents de Modest.

## STREAM :

Problème modèle = flamme axisymétrique



Rmq. : ici, ADF/.. acceptable mais loin d'être général.

## Conclusion

- mise en place d'une approche originale pour la **modélisation des propriétés radiatives des milieux en combustion (gaz et suies)**.
- a permis de fournir (à notre connaissance) **le premier modèle théorique de fonction de distribution cumulée globale de  $k$  pour des gaz** n'utilisant pas de corrélations et d'ajustements.

## Perspectives

- **finalisation des modèles et intégration** à des chaînes de codes aérothermochimiques.
- réalisation d'**intercomparaisons expériences-calculs** incluant des mesures de flux rayonnés (radiométrie, spectroscopie).