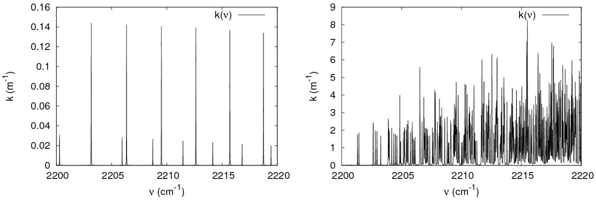
Représentation des spectres de raies lors de la simulation numérique et l'analyse des transferts radiatifs en présence de gaz moléculaires

Un point de vue (partiel) sur la littérature post-1989 ...

R. Fournier V. Eymet
richard.fournier@laplace.univ-tlse.fr
vincent.eymet@laplace.univ-tlse.fr

LAPLACE, Université Paul Sabatier, Toulouse

Réunion SFT Rayonnement Thermique - Lyon - Janvier 2011



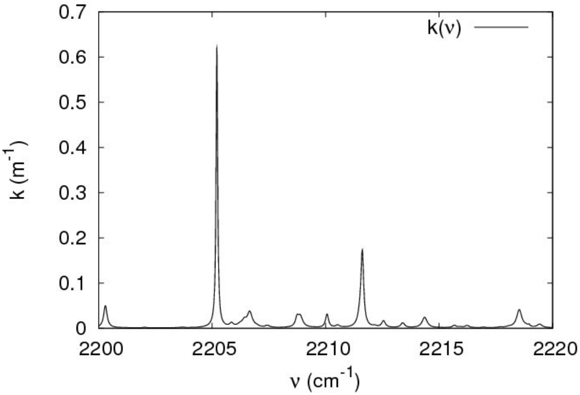
- Simuler numériquement la propagation du rayonnement avec des spectres composés de centaines de milions de raies d'absorption.
- Analyser physiquement les transferts thermiques résultant à l'échelle du système (penser en termes de sensibilités aux éléments de dimensionnement ... avec 10^8 raies).

Outline

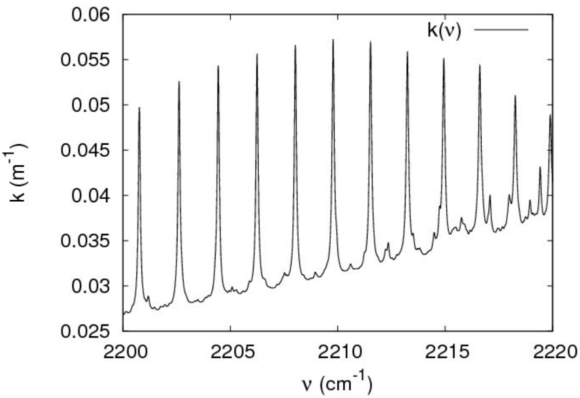
- Le concept d'absorbant.
- Densité d'absorbant : η
- Section efficace : $k_\nu = \eta\sigma_\nu$
- Quantité d'absorbant : $q = \int_0^s \eta' ds'$

$$T_\nu(q) = exp\left(-\sigma_\nu q\right) = exp\left(-\int_0^s k'_{nu} ds'\right)$$

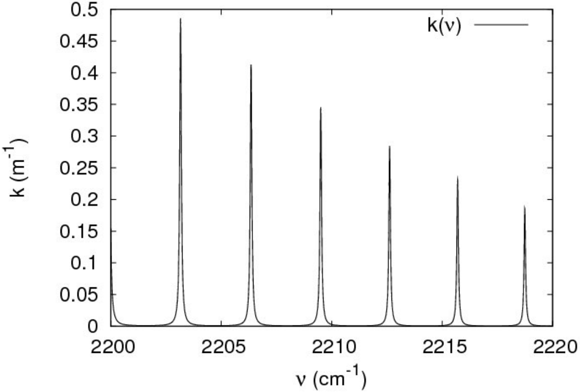
- Mélanges d'absorbants : $k_\nu \approx \eta_1\sigma_{\nu,1} + \eta_2\sigma_{\nu,2} + ...$



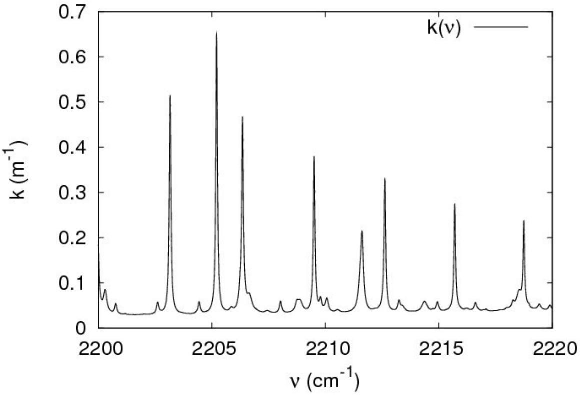
$H_2 0$ (x=0.2), pour P=1.0 atm, T=400K.



CO_2 (x=0.15), pour P=1.0 atm, T=400K.



CO (x=2.10^{-4}), pour P=1.0 atm, T=400K.



H_20 (x=0.2) + CO_2 (x=0.15) + CO (x=2.10^{-4}),
pour P=1.0 atm, T=400K.

Outline

- Formulation différentielle :

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_\nu}{\partial s} &= -\eta\sigma_\nu L_\nu + \eta\sigma_\nu L_\nu^{eq}(\theta) \\ L_\nu(0) &= L_\nu^{eq}(\theta_{paroi}) \end{aligned}$$

- Formulation intégrale :

$$L_\nu(s) = L_\nu^{eq}(\theta_{paroi})T_\nu(q) + \int_0^s L_\nu^{eq}(\theta')\frac{\partial}{\partial s'}\left[T_\nu(q')\right] ds'$$

avec $q' = \int_{s'}^s \eta'' ds''$.

Raisonner en moyenne sur une bande spectrale, en formulation différentielle :

- $\hat{L} = \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} L_\nu d\nu$
- ... ?

Les solutions consisteront à établir une équivalence avec un ensemble de problèmes de transfert monochromatiques (sommes pondérées de gaz gris, k-distributions discrètes).

Raisonner en moyenne sur une bande spectrale, en formulation intégrale :

- Moyenne des transmittivités pondérées par la fonction de Planck :

$$\mathcal{T}(q,\theta) = \frac{1}{\hat{L}^{eq}(\theta)} \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} L_\nu^{eq}(\theta) T_\nu(q)$$

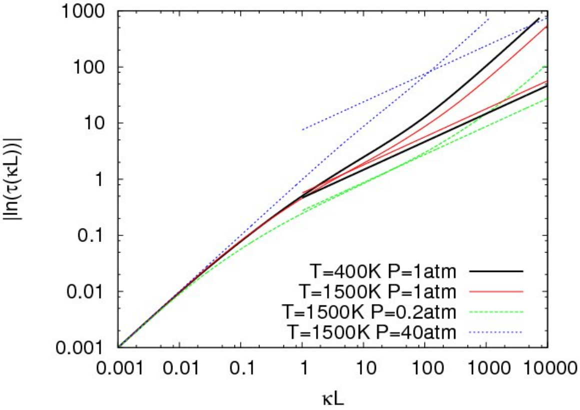
- Version intégrée fréquentiellement de la solution intégrale de l'équation de transport :

$$\hat{L}(s) = \hat{L}^{eq}(\theta_{paroi})\mathcal{T}(q,\theta) + \int_0^s \hat{L}^{eq}(\theta')\eta'\partial_1\mathcal{T}(q',\theta')ds'$$

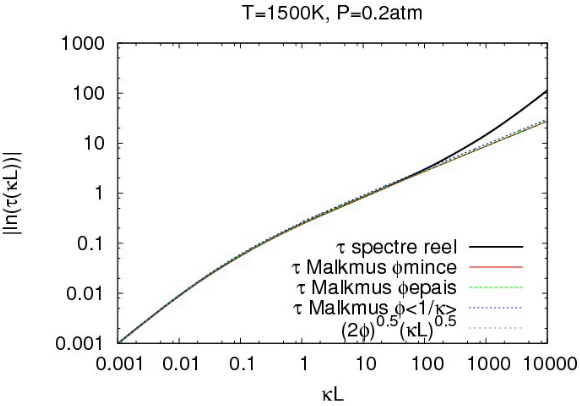
- Il suffit de construire un modèle de $\mathcal{T}(q,\theta)$

Construire un modèle de $\mathcal{T}(q, \theta)$:

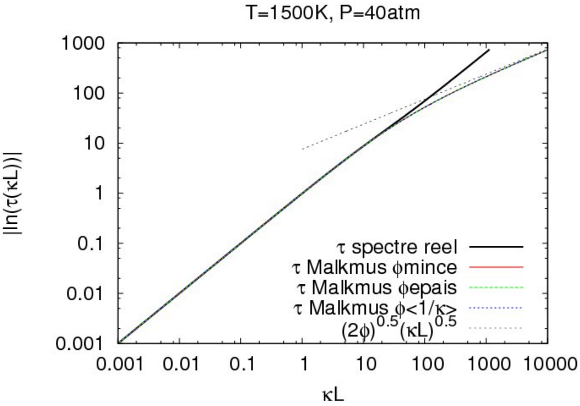
- A partir de la physique des transitions (retenir l'exemple du modèle de Malkmus),
- ou par des procédures de fit (plus ou moins fortement appuyées sur les résultats de la physique spectroscopique).



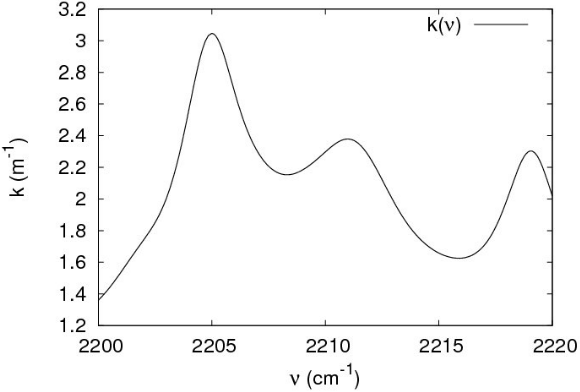
H_20 (x=0.2) : $\mathcal{T}(q,\theta)$ en fonction de q (2200-2220 cm^{-1}).



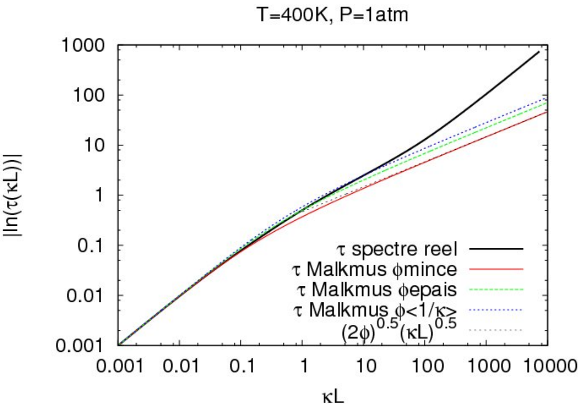
H_20 (x=0.2) : ajustement Malkmus (2200-2220 cm^{-1}).



H_20 (x=0.2) : ajustement Malkmus (2200-2220 cm^{-1}).



$H_2 0$ (x=0.2), pour P=40 atm, T=1500K.



H_20 (x=0.2) : ajustement Malkmus (2200-2220 cm^{-1}).

Point de vue statistique de type k-distribution :

$$\mathcal{T}(q,\theta) = \langle exp\left(-\sigma_\nu q\right)\rangle_{L_\nu^{eq}(\theta)} = \int_0^{+\infty} exp\left(-\sigma q\right) f(\sigma;\theta) d\sigma$$

$$f(.;\theta) = \mathcal{L}^{-1}\left[\mathcal{T}(.,\theta)\right]$$

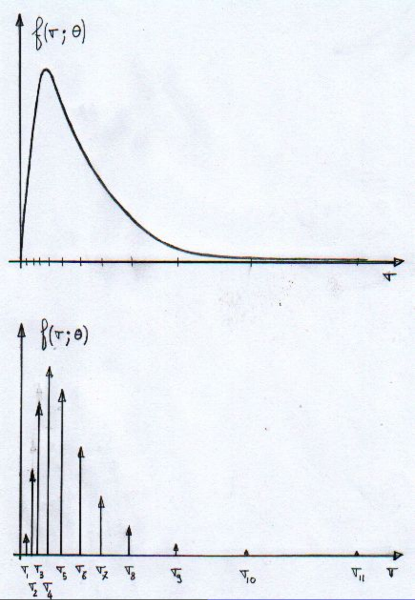
- Un moyen de fitter $\mathcal{T}(q,\theta)$,
- et un nouveau point de vue, de type monochromatique, pour une approche différentielle du transport.

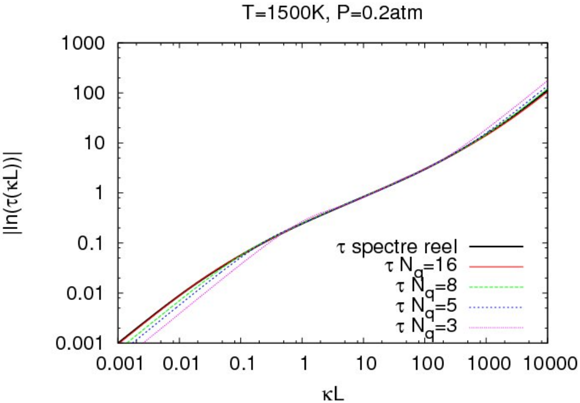
$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L_\sigma}{\partial s} &= -\eta\sigma L_\sigma + \eta\sigma L_\sigma^{eq}(\theta) \\
L_\sigma(0) &= L_\sigma^{eq}(\theta_{paroi})
\end{aligned}
$$

avec

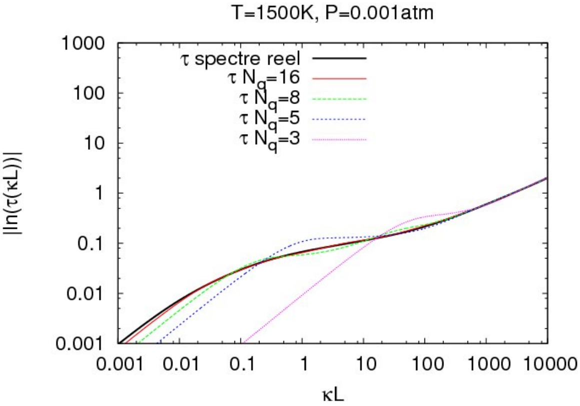
$$L_\sigma^{eq}(\theta) = \hat{L}^{eq}(\theta) f(\sigma;\theta) \text{ et } \hat{L}(s) = \int_0^{+\infty} L_\sigma(s) d\sigma$$

- Une infinité de problèmes pseudo-monochormatiques et une intégration sur σ,
- mais une dépendance en σ moins complexe que la dépendance fréquentielle, ce qui permet l'utilisation des quadratures usuelles (sommes pondérées de gaz gris, k-distributions discrètes).


f(τ; θ)
τ
f(τ; θ)
τ1
τ2
τ3
τ4
τ5
τ6
τ7
τ8
τ9
τ10
τ11
τ



H_20 (x=0.2) : quadrature de Legendre (2200-2220 cm^{-1}).



H_20 (x=0.2) : quadrature de Legendre (2200-2220 cm^{-1}).

Outline

Les hétérogénéités de concentration d'absorbant, sans hétérogénéité de section efficace, sont inclues dans la quantité d'absorbant.

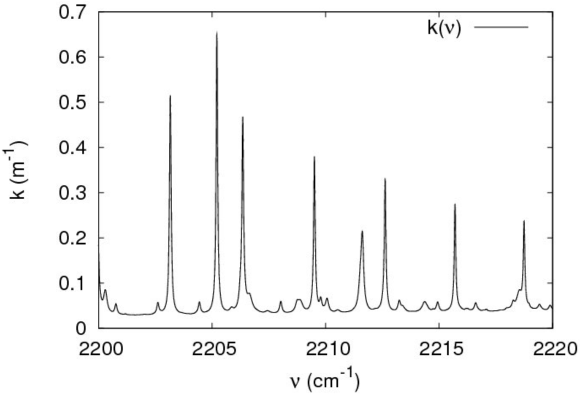
Les sources d'hétérogénéité de la section efficace sont (toujours pour un seul absorbant bien défini) :

- des modifications des intensités de raie liées à la température,
- des modifications des largeurs de raie liées à la pression, la température et les concentrations d'espèces.

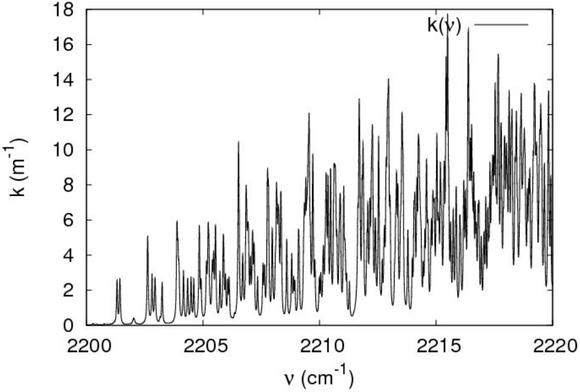
Si $\sigma_\nu(\theta, P, \vec{x}) = \alpha(\theta, P, \vec{x})\sigma_\nu(\theta_{ref}, P_{ref}, \vec{x}_{ref})$ alors il suffit de modifier la quantité d'absorbant :

$$\tilde{q} = \int_0^s \eta' \alpha(\theta', P', \vec{x}')ds'$$

Il s'agit de la seule condition dans laquelle les techniques usuelles de traitement des hétérogénéités sont fiables (Curtis-Godson, k-distributions corrélées - 1989). Or cette condition ne correspond à aucun cas pratique recensé ...



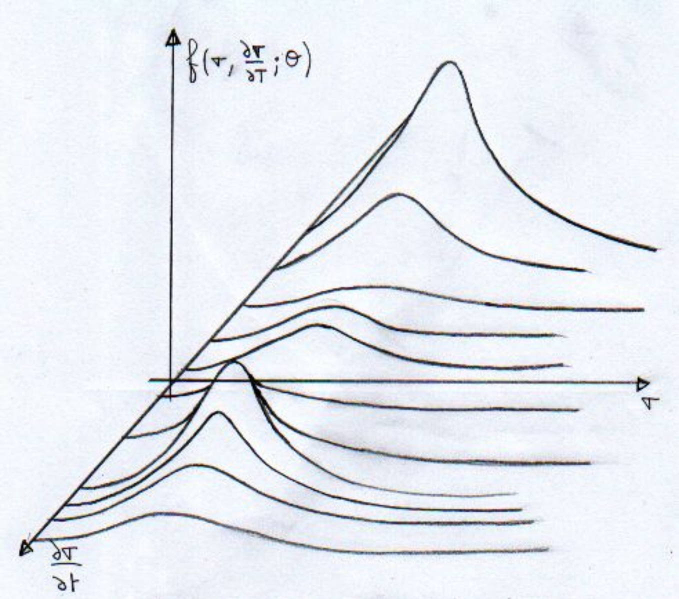
$H_2 0$ (x=0.2) + CO_2 (x=0.15) + CO (x=2.10^{-4}),
pour P=1.0 atm, T=400K.



H_20 (x=0.2) + CO_2 (x=0.15) + CO (x=2.10^{-4}),
pour P=1.0 atm, T=1500K.

La question de la représentation des hétérogénéités de section efficace reste largement ouverte. Deux très belles idées sont à retenir dans la littérature post-1989 :

- les mélanges de gaz fictifs (difficultés pratiques liées aux mélanges);
- les distributions multidimensionnelles (à explorer pratiquement).


$f(\nu, \frac{\partial \nu}{\partial T}; \theta)$

Outline

Les mélanges d'absorbant ne posent pas de difficultés majeures dans un contexte de formulation intégrale (hypothèse d'indépendance statistique), mais induisent de réels problèmes de temps de calcul en formulation différentielle.

Les questions liées aux réflexions et aux diffusions multiples ne sont liées qu'aux dépendances fréquentielles des réflectivités, des albedos et des fonctions de phase (impossibilité formelle de ramener le problème spectral à la connaissance de $\mathcal{T}(q,\theta)$). La solution consiste alors à adapter les largeurs de bandes.

REMARQUE : aujourd'hui, des solutions existent en termes de simulation numérique précise, mais penser en termes de sensibilités aux éléments de dimensionnement avec 10^8 raies reste très difficile (formulation intégrale + modèles simplifiés de $\mathcal{T}(q, \theta)$ en fonction de la distance d'échange)