

La méthode des k -moments généralisés pour le calcul approché des coefficients d'absorption de gaz par le modèle CK.

Frédéric ANDRE^{1*}, Vladimir SOLOVJOV²

¹Centre de Thermique et d'Energétique de Lyon
INSA de Lyon – 9 rue de la Physique – 69621 Villeurbanne

²Brigham Young University. Department of Mechanical Engineering
CTB 435, Provo, UT 84602, USA

* (auteur correspondant : frederic.andre@insa-lyon.fr)

Résumé - Dans ce travail, on présente une méthode simple permettant d'exprimer de façon analytique le coefficient d'absorption réordonné d'un gaz (quantité souvent utilisée dans le cadre des approches de type k -corrélés, CK dans la littérature anglo-saxonne) à partir de la distribution cumulée du coefficient d'absorption. Des comparaisons à des données de référence directement obtenues par l'approche raie-par-raie permettent de valider la méthode : les transmissivités de trajets homogènes isothermes dans les gaz sont en général estimées avec une précision meilleure que 0,5 %.

1. Introduction

Les méthodes en k -distributions sont utilisées depuis de nombreuses années afin de modéliser les propriétés radiatives des gaz. L'un de leurs avantages, comparativement aux modèles formulés en transmittivité (tels que les modèles Statistiques à Bandes Etroites, SNB [1]), est qu'elles sont applicables avec n'importe quelle méthode de résolution de l'Equation du Transfert Radiatif (ETR), qu'elle soit sous forme différentielle ou intégrale. Le coefficient d'absorption associé, dit réordonné, est obtenu par inversion de la fonction de distribution cumulée du coefficient d'absorption, $g(k)$ (quelques éléments de théorie sur les modèles en k -distributions sont rappelés dans la partie 2 – on pourra se référer à la référence [1] pour une description plus détaillée de cette approche).

L'objectif de ce travail est de décrire une méthode simple permettant d'obtenir à partir de données raie-par-raie le coefficient d'absorption réordonné de façon analytique en fonction de la distribution $g(k)$. La technique mise en œuvre s'appuie sur une reformulation du problème d'inversion $g(k) \rightarrow k(g)$ par une approche aux moments, résolue en utilisant une base de polynômes particuliers dits de Cutteridge-Devyatov.

2. Les méthodes en k -distributions

Le principe des approches en k -distribution a été proposé pour la première fois en 1934 par Ambartsumian [2]. Il consiste à simplifier l'évaluation de moyennes spectrales de fonctions du coefficient d'absorption monochromatique (transmissivité, flux radiatif,..) en remplaçant l'intégration spectrale (coûteuse en calcul compte tenu de la structure à haute résolution du spectre d'absorption des gaz) par une intégration suivant les valeurs prises par le coefficient d'absorption. Ainsi, pour toute fonction F du coefficient d'absorption monochromatique κ_ν (à valeurs dans un intervalle $0 \leq k_{\min} \leq \kappa_\nu \leq k_{\max}$), la moyenne sur une bande étroite de $F(\kappa_\nu)$ est donnée par :

$$F^{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} F(k) \frac{dg(k)}{dk} dk \quad (1)$$

dans laquelle apparaît la fonction de distribution cumulée du coefficient d'absorption définie par [1] :

$$g(k) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\nu \in \Delta\nu / \kappa_\nu \leq k} d\nu \quad (2)$$

Cette fonction est strictement croissante et donc inversible si bien que l'on peut réécrire la relation (1) sous la forme :

$$F^{\Delta\nu} = \int_0^1 F[k(g)] dg \quad (3)$$

où $k(g)$ représente la fonction inverse de $g(k)$ appelée coefficient d'absorption réordonné.

L'intégrale (3) peut être estimée numériquement à l'aide de quadratures numériques et quelques points de calcul sont souvent suffisants pour déterminer avec précision $F^{\Delta\nu}$ par cette formule. La mise en pratique de la méthode consiste généralement [1] à se fixer a priori un ordre de quadrature (donc un jeu de valeurs de g , g_i , $i = 1, \dots, n$) et à inverser directement la relation (2) à partir de données raie-par-raie (ce qui permet d'identifier les paramètres $k(g_i)$, $i = 1, \dots, n$) associés à cette quadrature. Le seul inconvénient de cette approche est qu'elle impose de travailler à nombre de points de calcul fixe (lié au choix de la quadrature numérique). Or, dans certains cas (par exemple si l'on souhaite faire un tirage aléatoire sur les valeurs de g dans le cas d'une approche de type Monte Carlo pour l'intégration spectrale), il peut être souhaitable d'avoir une méthode plus flexible pour le calcul des coefficients d'absorption réordonnés (i.e. la fonction $k(g)$). L'un des objectifs de ce travail est de décrire une méthode fiable permettant d'approximer $k(g)$ de façon analytique (et moins coûteuse en espace mémoire qu'une tabulation complète des couples $(g, k(g))$ pour des quadratures d'ordres élevés). Elle s'appuie sur l'utilisation de polynômes particuliers décrits dans le paragraphe suivant.

3. Approximation polynomiale continue et polynômes de Cutteridge-Devyatov (CDP)

On note $C[0,1]$ l'espace des fonctions continues sur $[0,1]$. On définit le produit scalaire entre deux fonctions $f, g \in C[0,1]$ par :

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(x) g(x) dx \quad (4)$$

de même que la norme L^2 associée à ce produit scalaire (équivalent de la norme Euclidienne en géométrie) :

$$\|f\|_{L^2} = \langle f, f \rangle^{1/2} = \left(\int_0^1 f(x)^2 dx \right)^{1/2} \quad (5)$$

Notre objectif est d'approximer une fonction $f \in C[0,1]$ par un polynôme $P_n(x) \in \mathbb{R}_n[x]$ où $\mathbb{R}_n[x]$ désigne l'ensemble des polynômes de la variable x de degrés inférieurs ou égaux à n .

On montre (voir par exemple la référence [3] Chapitre 9) qu'en choisissant pour $\mathbb{R}_n[x]$ la base $\{x^0=1, x^1=x, x^2, \dots, x^n\}$ les coefficients du polynôme $P_n(x) = c_0 + c_1x + \dots + c_nx^n$ qui minimise la distance :

$$\|f - P_n\|_{L^2} = \left(\int_0^1 [f(x) - P_n(x)]^2 dx \right)^{1/2} \quad (6)$$

sont solutions de l'équation matricielle :

$$Hc = b \quad (7)$$

où c est le vecteur de composantes (c_0, c_1, \dots, c_n) , $b = {}^t(\langle f, 1 \rangle, \langle f, x \rangle, \dots, \langle f, x^n \rangle)$ et H est la matrice de Hilbert de terme courant :

$$(H)_{ij} = \langle x^i, x^j \rangle = \frac{1}{i+j+1} \quad (8)$$

Plutôt que d'utiliser la base de $\mathbb{R}_n[x]$ précédente, Cutteridge [4] a proposé d'utiliser la base de polynômes $(\Phi_0^{(n)}(x), \Phi_1^{(n)}(x), \dots, \Phi_{n-1}^{(n)}(x))$ définis de la façon suivante :

$$\forall (i, j) \in \{0, 1, \dots, n-1\}^2, \left\langle x^i, \frac{d\Phi_j^{(n)}}{dx} \right\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (9)$$

En remplaçant la fonction f par $\frac{d\Phi_j^{(n)}(x)}{dx}$, $j=0, \dots, n-1$ dans la relation (4) on obtient directement les coefficients de chacun des polynômes comme solutions du système d'équations :

$$H\Phi_j^{(n)} = e_j \quad (10)$$

où $e_j = \left(0, 0, \dots, \underset{\text{indice } j+1}{1}, \dots, 0 \right)$ est le $j+1$ -ième élément de la base canonique de \mathbb{R}^n (les ordres des polynômes démarrent à l'indice 0). Ceci montre en particulier que les coefficients des polynômes de Cutteridge-Devyatov sont intimement liés aux coefficients de la matrice de Hilbert inverse qui peuvent se calculer de façon explicite [5]. Ainsi, les solutions de (6) sont données par la relation (dont la démonstration est aussi détaillée dans la référence [5]) par :

$$\Phi_j^{(n)}(x) = \sum_{m=0}^{n-1} \phi_{jm}^{(n)} x^{m+1} \text{ avec } \phi_{jm}^{(n)} = (-1)^{m+j} \frac{m+1}{m+j+1} \frac{(n+m)!(n+j)!}{(m)!(j)!(m+1)!(j+1)!(n-m-1)!(n-j-1)!} \quad (11)$$

Les relations (7,10) montrent enfin (en écrivant $b = \sum_{j=0}^{n-1} \langle f, x^j \rangle e_j$) que la solution optimale (au sens de la norme donnée par l'équation (5)) au problème d'approximation continu (1) s'écrit :

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \langle f, x^j \rangle \frac{d\Phi_j^{(n)}(x)}{dx} \text{ avec } \langle f, x^j \rangle = \int_0^1 x^j f(x) dx \quad (12)$$

Les relations (11,12) permettent d'approximer de façon très simple n'importe quelle fonction par un polynôme au sens des moindres carrés. On peut noter que cette approche peut aussi s'étendre à n'importe quel intervalle de réels borné $[a,b]$ par simple changement de variable. La seule limite de l'approche réside dans le fait que les coefficients polynomiaux donnés dans la seconde relation (11) sont intimement liés aux coefficients de la matrice de Hilbert inverse, connue pour être mal conditionnée. Ceci limite en pratique l'utilisation de la méthode à des ordres faibles (autour de 10 pour des calculs en double précision, comme indiqué dans la référence [5]). Pour des ordres plus élevés, on peut alors avoir recours à d'autres polynômes (Legendre,..) [3] mais dans ce cas les moments utilisés sont généralement beaucoup plus complexes que ceux donnés par la relation (12) (voir par exemple [3]).

4. Méthode d'inversion analytique de fonctions basée sur les CDP

Chercher l'inverse d'une fonction sous une forme polynomiale est un problème classique. On trouve par exemple dans la référence [6] des formules permettant de calculer explicitement les coefficients du développement en série d'une fonction inverse en fonction de ceux de la fonction directe (que l'on peut estimer à partir du développement de la fonction, continue, en série de Taylor-Lagrange). La limite de cette approche est qu'en général les développements polynomiaux ainsi obtenus ne sont précis qu'au voisinage du point utilisé pour calculer le développement limité de la fonction directe. Ce point est évoqué par exemple dans la référence [7]. Nous allons montrer que l'utilisation des polynômes décrits dans la partie précédente permet de résoudre de façon relativement simple ce problème.

On commence par se donner une fonction $f(x)$ continue sur $[0,1]$, strictement croissante (donc inversible) et à valeurs dans $[0,1]$ (cette hypothèse n'enlève aucune généralité à l'approche car on peut toujours se ramener à ce cas sur tout intervalle borné en appliquant une normalisation appropriée de f). Ainsi, il existe une fonction appelée inverse de f , et généralement notée f^{-1} , solution de :

$$\forall x \in [0,1], f^{-1}[f(x)] = x \quad (13)$$

On souhaite estimer cette fonction par un polynôme de degré n au sens de la norme donnée par la relation (5). On cherche donc le polynôme $P_n(x) \in \mathbb{R}_n[x]$ qui minimise :

$$\left(\int_0^1 [f^{-1}[f(x)] - P_n[f(x)]]^2 dx \right)^{1/2} = \left(\int_0^1 [x - P_n[f(x)]]^2 dx \right)^{1/2} \quad (14)$$

dont l'expression est donnée directement par l'équation (12) :

$$P_n(f) = \sum_{j=0}^{n-1} \langle x, f^j \rangle \frac{d\Phi_j^{(n)}(f)}{df} \text{ avec } \langle x, f^j \rangle = \int_0^1 f^j x df \quad (15)$$

On peut noter que les moments donnés par la relation (15) peuvent aussi s'écrire :

$$\langle x, f^j \rangle = \int_0^1 [f(x)]^j x \frac{df(x)}{dx} dx \quad (16)$$

5. Application à l'inversion de la fonction de distribution du coefficient d'absorption

Nous avons montré dans la référence [5] que la fonction $g(k)$ telle que définie par la relation (2) peut être décomposée en série de la variable $u(k) = \ln(k/k_{\min})/\ln(k_{\max}/k_{\min})$ où k_{\min} et k_{\max} sont les valeurs minimales et maximales du coefficients d'absorption κ_ν sur l'intervalle de nombres d'ondes $\Delta\nu$. On propose ainsi de chercher l'inverse de la distribution g sous la forme :

$$k(g) = k_{\min} (k_{\max}/k_{\min})^{P_n(g)} \Leftrightarrow P_n[g(k)] = u(k) \quad (17)$$

En appliquant directement la relation (16), on peut exprimer cette fonction en calculant les moments suivants :

$$\langle u, g^j \rangle = \int_0^1 [g(k)]^j u(k) \frac{dg(k)}{dk} dk \quad (18)$$

Ceci peut aussi se noter, en prenant $F(k) = [g(k)]^j u(k)$ dans la relation (1) :

$$\langle u, g^j \rangle = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \frac{\ln(\kappa_\nu/k_{\min})}{\ln(k_{\max}/k_{\min})} [g(\kappa_\nu)]^j d\nu \quad (19)$$

Les équations (17-19) expriment ainsi de façon analytique le coefficients d'absorption réordonné en fonction de $g(k)$. L'un des intérêts de l'approche par polynômes de Cutteridge-Devyatov est ici (relativement) évident. En effet, les moments (19) peuvent être estimés directement à partir des données raie-par-raie : pour ce faire, il suffit pour chaque valeur du spectre d'estimer $g(\kappa_\nu)$ directement à partir de sa définition (donnée par la relation (2) - La méthode retenue dans ce travail est décrite dans la partie suivante). L'utilisation d'autres polynômes, même si elle est tout à fait envisageable, rendrait la formulation bien plus complexe à formaliser voire à appliquer.

6. Résultats et discussion

L'objectif de cette partie est d'évaluer la technique décrite dans la partie 5 pour le calcul approché de coefficients d'absorption réordonnés. Nous allons limiter notre propos au cas de CO_2 et ne traiterons que des cas de gaz homogènes isothermes (en effet, considérer le cas général hétérogène anisotherme reviendrait à évaluer l'hypothèse de corrélation des spectres, le «C» du modèle CK, ce qui n'est pas le propos ici – cependant on peut noter que l'approche décrite dans ce travail est totalement compatible avec une formulation anisotherme hétérogène voire à des mélanges de gaz absorbants, sous les hypothèses et avec les mêmes sources d'erreurs potentielles que pour l'approche CK). Les spectres raie-par-raie utilisés sont ceux décrits dans la référence [8] (dans laquelle toutes les hypothèses de calcul concernant le calcul des fonctions de partition, des profils,.. sont détaillés). Ils sont issus de calculs utilisant la base de données spectroscopiques HITEMP2010 [9].

6.1. Calcul des moments à partir des spectres raie-par-raie

Les spectres raie-par-raie de références ont été calculés à haute résolution spectrale (10^{-2} cm^{-1}) et on considère des bandes étroites larges de 25 cm^{-1} . Chaque bande contient ainsi $N = 2500$ valeurs $(\kappa_{\nu(i)})$, $i = 1, \dots, N$ de coefficients d'absorption. La première étape du calcul des moments consiste à estimer les valeurs de la fonction $g(\kappa_{\nu})$ pour chacune de ces valeurs de κ_{ν} . Ceci peut se faire très simplement en procédant de la façon suivante : 1/ on commence par calculer les valeurs du coefficient d'absorption au centre des intervalles spectraux $[\nu(i); \nu(i+1)]$ en moyennant les valeurs prises sur les bords de chaque intervalle. On construit ainsi $N-1$ ($= 2499$) valeurs intermédiaires de κ_{ν} que nous noterons $(\tilde{\kappa}_{\nu(i)} = [\kappa_{\nu(i+1)} + \kappa_{\nu(i)}]/2)$, $i = 1, \dots, N-1$; 2/ pour chaque valeur de $(\kappa_{\nu(i)})$, $i = 1, \dots, N$, on dénombre l'ensemble des points $\tilde{\kappa}_{\nu(j)}$, $j = 1, \dots, N-1$ tels que $\tilde{\kappa}_{\nu(j)} \leq \kappa_{\nu(i)}$. Soit $n(i)$ le nombre ainsi obtenu ; 3/ La quantité $n(i)/N$ correspond au nombre d'intervalles spectraux inclus dans $\Delta\nu$ tels que $\tilde{\kappa}_{\nu(j)} \leq \kappa_{\nu(i)}$. En se référant à la définition de la distribution cumulée du coefficient d'absorption (voir l'équation (2)) on peut en déduire qu'un estimateur de $g(\kappa_{\nu(i)})$ est simplement donné par le rapport : $g(\kappa_{\nu(i)}) \approx n(i)/N$. Cette technique peut aussi s'appliquer pour le calcul de la fonction $g(k)$ mais dans ce cas on travaille à valeurs de la variable k préalablement fixées.

Connaissant $g(\kappa_{\nu(i)})$, $i = 1, \dots, N$, il est alors possible d'estimer les moments donnés par l'équation (19) (dans ce travail, une simple méthode des trapèzes a été utilisée – les valeurs k_{\min} et k_{\max} nécessaires au calcul des moments (19) sont directement issues des données RPR).

6.2. Application au dioxyde de carbone

Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus par application des équations (17,19). Le calcul des moments a été effectué à partir des données raie-par-raie en utilisant la méthode décrite au paragraphe 6.1. Les résultats de notre approche sont évalués par comparaison à des résultats de référence issus de ces mêmes données raie-par-raie (RPR).

La figure 1 représente une comparaison entre coefficients d'absorption réordonnés (exprimés ici en $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$) obtenus par réarrangement direct (de façon croissante) des données RPR (méthode M1) et par application de la méthode décrite dans ce travail (méthode M2). Les calculs ont été effectués sur la bande étroite $[2337,5 ; 2362,5 \text{ cm}^{-1}]$ de CO_2 pour trois températures de gaz : 300 K, 1500 K et 2900 K. On peut noter que l'accord entre les deux approches (M1 et M2) est de très bonne qualité (les écarts entre les coefficients d'absorption sont généralement de quelques %). Une analyse détaillée de plusieurs bandes étroites a montré que les écarts maximums sont associés de façon systématique à des poids faibles (pour le calcul intégral) de sorte que l'erreur commise par application de la méthode M2 reste globalement faible pour des calculs radiatifs bien qu'elle puisse être localement importante (jusqu'à 50% dans certains cas) lorsque l'on compare directement les résultats des deux méthodes.

La figure 2 représente des spectres de transmission (20% de CO₂ dilué dans 80% de N₂ – 50 cm de trajet dans le gaz à pression atmosphérique) pour le même jeu de températures que précédemment et limité à la bande à 2,7 μm du dioxyde de carbone. L'accord entre les deux calculs en *k*-distributions et les données de référence (calcul direct de moyennes spectrales de données RPR) est très bon (les écarts absolus sont inférieurs à 10⁻³ sur l'ensemble de la bande étudiée) quelque soit la température du gaz. Les deux approches permettent d'approcher la solution de référence raie-par-raie avec une précision généralement (à un point de calcul près pour la méthode M2 sur l'intervalle [2377,5 ; 2412,5 cm⁻¹] à 1500 K pour lequel l'écart entre fonctions de transmission calculées RPR et par l'approche M2 atteint 0.013) de l'ordre de 5.10⁻³ sur l'ensemble du spectre (entre 250 cm⁻¹ et 5675 cm⁻¹).

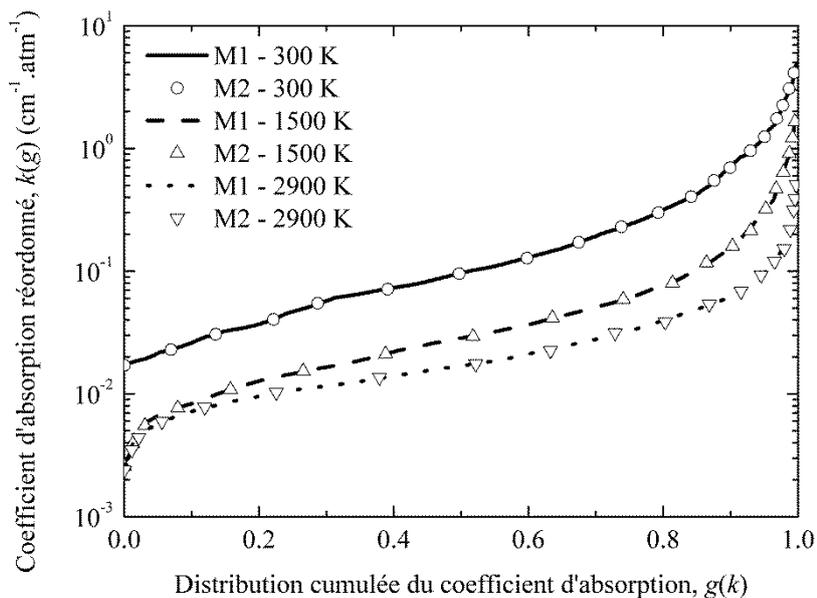


Figure 1 : Coefficients d'absorption réordonnés pour CO₂ à 300 K, 1500 K et 2900 K sur la bande étroite [2337,5 ; 2362,5 cm⁻¹]

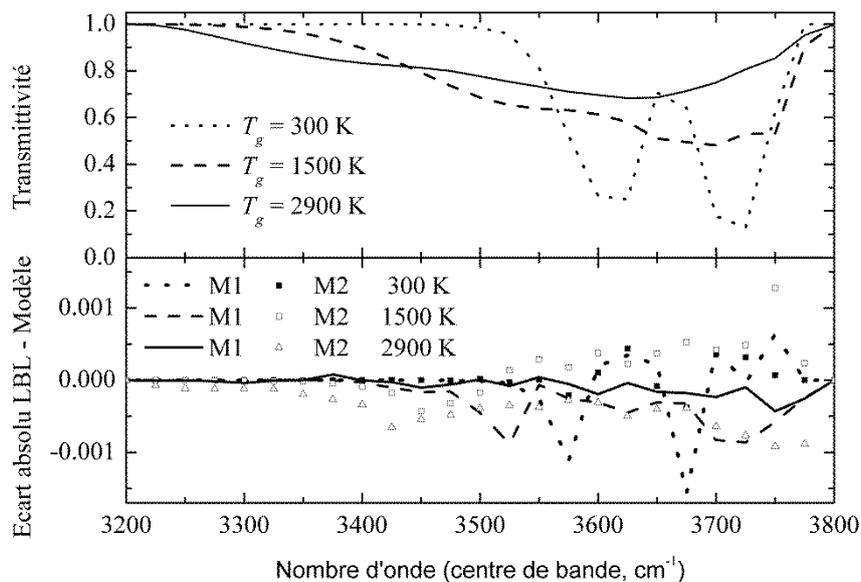


Figure 2 : Transmissivités moyennées sur 25 cm⁻¹ de trajets homogènes isothermes (50 cm) – en haut : courbes de référence RPR, en bas : écarts absolus entre calculs en *k*-distributions et données RPR (les traits pleins correspondent à la méthode M1, les symboles à la méthode M2).

7. Conclusion

Une méthode simple a été décrite pour le calcul de coefficients d'absorption réordonnés de gaz à partir de données raie-par-raie. La technique fournit une formulation analytique mettant en jeu une base particulière de polynômes dits de Cutteridge-Devyatov. Le lien entre cette base de polynômes et le problème d'approximation continue de fonctions a été établi. La méthode proposée est à la fois précise (elle permet le calcul de fonctions de transmission de gaz avec une précision comparable à celle obtenue en utilisant un calcul direct des coefficients réordonnés à partir des données RPR) et extrêmement flexible (en comparaison à des données tabulées). Elle peut s'appliquer pour des calculs de transfert radiatif dans des milieux hétérogènes anisothermes, sous les mêmes contraintes que les approches en k -distributions corrélées.

Références

- [1] J. Taine, A. Soufiani, Gas IR radiative properties : from spectroscopic data to approximate models, *Adv. Heat Transfer*, 33 (1999), 295-414.
- [2] V. Ambartsumian, The effect of the absorption lines on the radiative equilibrium of the outer layers of the star, *Publ. Obs. Astronom. Univ. Leningrad*, 6 (1934), 7-18.
- [3] E. Süli, D. Mayers, *An introduction to Numerical Analysis*, Cambridge University Press (2003).
- [4] O. P. D. Cutteridge, Proceedings of the First Congress of IFAC (USSR Academy of Sciences 1961), 140-148.
- [5] F. André, V. P. Solovjov, L. Hou, R. Vaillon, D. Lemonnier, The generalized k -moment method for the modeling of cumulative k -distributions of H_2O at high temperature, *JQSRT*, sous presse.
- [6] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Dover (1972).
- [7] R. T. Farouki, Convergent inversion approximations for polynomials in Bernstein form, *Computer Aided Geometric Design*, 17 (2000), 179-196.
- [8] F. André, V. P. Solovjov, R. Vaillon, D. Lemonnier, Modeling the cumulative distribution of absorption coefficients of gases using the generalized k -moment method, *JQSRT*, 124 (2013), 49-61.
- [9] L. S. Rothman *et al.*, HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database, *JQSRT*, 111 (2010), 2139-2150.

Remerciements

Ce travail a bénéficié du soutien financier de l'Agence Nationale de la Recherche dans le cadre du projet ANR-12-BS09-0018 SMART-LECT.