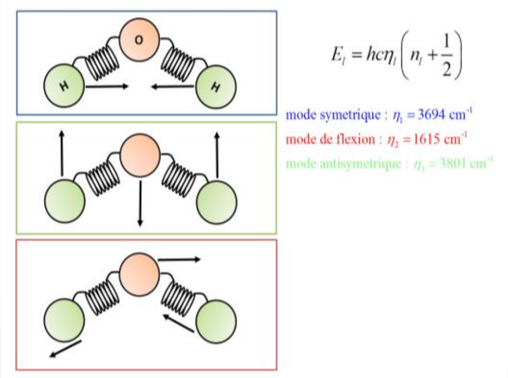
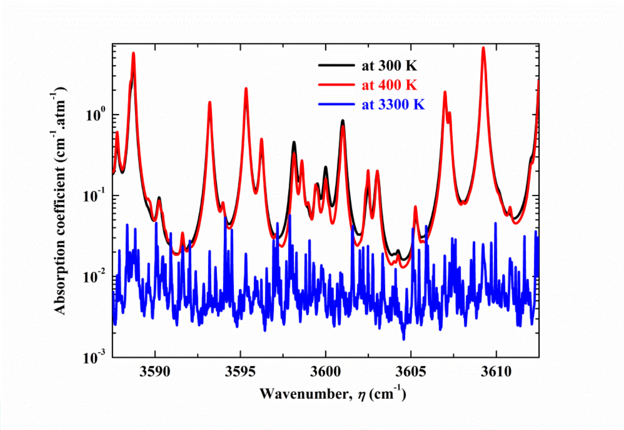
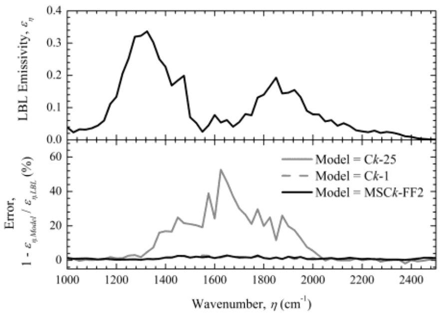
De la nécessité (*ou pas*) d'utiliser des modèles sophistiqués de rayonnement des gaz en transferts couplés

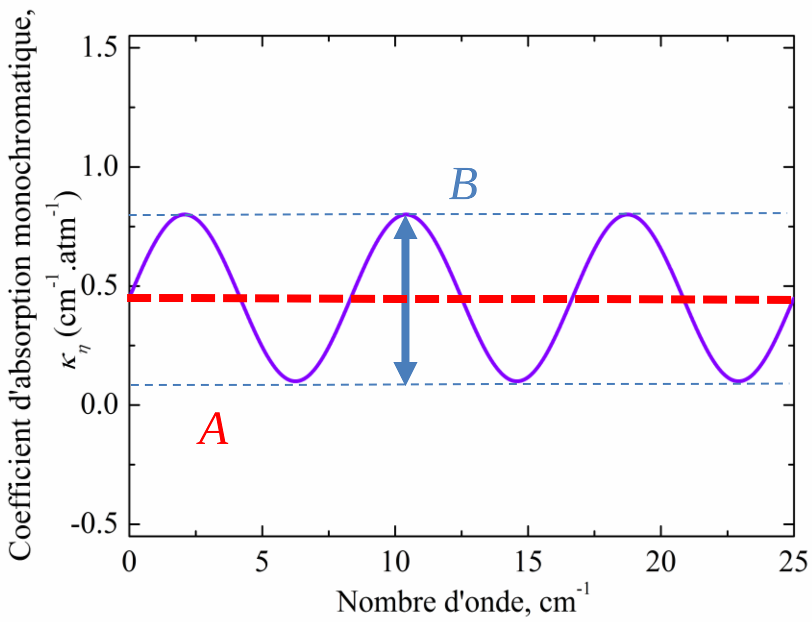






Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

- Le principe des approches dites en *k*-distributions a été proposé en 1934 par Ambartzumian. Avant, essentiellement gaz gris.



$$\kappa_\eta = A + B\sin\left(\frac{2\pi\eta}{\Delta\eta}.n\right)$$

here: $\Delta\eta = 25$ cm^{-1}, $n = 3$

Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

PB. estimer : $\tau^{\Delta\eta}(L) = \frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta} \exp\left[-\alpha - \beta \sin\left(\frac{2\pi\eta}{\Delta\eta}.n\right)\right] d\eta$?

$$\begin{cases} \alpha = AL \\ \beta = BL \end{cases}$$

se traite par le

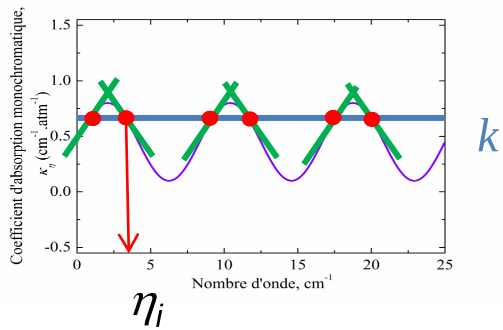
changement de variable $k = A + B\sin\left(\frac{2\pi\eta}{\Delta\eta}.n\right)$

Le modèle k-corrélé en quelques dates

- Tous calculs faits :

$$\tau^{\Delta\eta}(L) = \frac{6}{2n}\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \underbrace{\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{B^2-(k-A)^2}}}_{=1\big/\frac{dk}{d\eta}\delta\eta} \exp(-kL)\,dk = \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} f(k)\exp(-kL)\,dk$$

avec :



$$f(k) = 2n.\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{B^2-(k-A)^2}}$$

$2n$ = nombre de points d′intersection entre le spectre et la droite k=constante

$$\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{B^2-(k-A)^2}} = \text{valeur de } \left|\frac{d\kappa_\eta}{d\eta}\right|^{-1}\delta\eta^{-1} \text{ aux points d′intersection}$$

Rmq : on obtient exactement la même définition en distribution

Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

- L'approche d'Ambartzumian est ainsi très proche de la définition souvent proposée pour introduire les modèles en *k*-distributions (ici, Soufiani et Taine 1997) :

Let $f(k)dk$ be the fraction of $\Delta\eta$ (a spectral interval) for which the absorption coefficient κ_η takes values between k and $k+dk$. The average transmissivity of a uniform column (gas path, length l) can be written as:

$$\bar{\tau}^{\Delta\eta}(l)\left(=\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta} exp\left(-\kappa_\eta l\right)d\eta\right)=\int_0^{+\infty} f(k)\ exp\left(-kl\right)\ dk$$

- La méthodologie a été utilisée pendant de nombreuses années (Lebedinski 1939, Kondratiev 1965) sans référence à la notion de distribution.

- La notion de cumulée (mais toujours pas de distribution) semble apparaître pour la première fois en 1966 dans un papier de Strom et Kurucz (publié dans JQSRT).

- La notion de distribution n'apparaît de façon explicite qu'en 1972 (Arking et Grossman, J. Atm. Sciences).

Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

- L'introduction de la **notion de distribution** n'est en fait qu'une **manière "simple" et mathématiquement rigoureuse de reformuler le changement de variable** introduit par Ambartzumian :

F une fonction du coefficient d'absorption monochromatique κ_η.

$$F(\kappa_\eta) = \int_0^{+\infty} F(k)\cdot\delta(k-\kappa_\eta)\ dk \ \ (\text{formule de changement de variable au sens des distributions})$$

$$\Rightarrow F^{\Delta\eta} = \frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta} F(\kappa_\eta)\ d\eta = \frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\int_0^{+\infty} F(k)\cdot\delta(k-\kappa_\eta)\ dk\ d\eta$$

On permutte les deux signes *sommes* (variables k et η independantes)

$$F^{\Delta\eta} = \int_0^{+\infty}\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\boxed{F(k)}\cdot\delta(k-\kappa_\eta)\ d\eta\ dk$$

constante

$$= \int_0^{+\infty} F(k)\underbrace{\left(\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\delta(k-\kappa_\eta)d\eta\right)}_{f(k)}\ dk$$

Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

- Une extension possible des approches en *k*-distributions aux milieux non uniformes (hétérogènes et/ou anisothermes) est issue de (Lacis et Oinas, J. Geo. Research 1991). Le problème posé est le suivant :

F une fonction des coefficients d'absorption monochromatique $\kappa_{\eta,1}$ et $\kappa_{\eta,2}$.

$$F\left(\kappa_{\eta,1},\kappa_{\eta,2}\right)=\int_0^{+\infty} F\left(k,\kappa_{\eta,2}\right)\cdot\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)\,dk \quad (\text{formule de changement de variable au sens des distributions})$$

$$\Rightarrow F^{\Delta\eta}=\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta} F\left(\kappa_{\eta,1},\kappa_{\eta,2}\right)\,d\eta=\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\int_0^{+\infty} F\left(k,\kappa_{\eta,2}\right)\cdot\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)\,dk\,d\eta$$

On permutte les deux signes *sommes* $\left(\text{variables } k \text{ et } \eta \text{ independantes}\right)$

$$F^{\Delta\eta}=\int_0^{+\infty}\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\boxed{F\left(k,\kappa_{\eta,2}\right)}\cdot\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)\,d\eta\,dk$$

Pb : ≠ constante en général

Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

- **Hypothèse proposée par Lacis et Oinas** (physique de l'atmosphère) : Les deux coefficients d'absorption sont **corrélés au sens de Spearman** (Am. J. Psychology, 1904) :

$$\kappa_{\eta,2} = h\left(\kappa_{\eta,1}\right),\ \underline{h \text{ fct strictement monotone}}.$$

$$F\left(\kappa_{\eta,1},\kappa_{\eta,2}\right) = \int_0^{+\infty} F\left(k,h(k)\right)\cdot\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)\,dk\ \left(\text{formule de changement de variable au sens des distributions}\right)$$

$$\Rightarrow F^{\Delta\eta} = \frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta} F\left(\kappa_{\eta,1},\kappa_{\eta,2}\right)\,d\eta = \frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\int_0^{+\infty} F\left(k,h(k)\right)\cdot\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)\,dk\,d\eta$$

On permutte les deux signes *sommes* $\left(\text{variables } k \text{ et } \eta \text{ independantes}\right)$

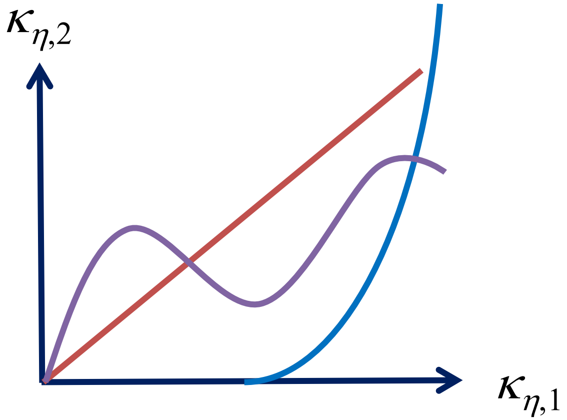
$$F^{\Delta\eta} = \int_0^{+\infty}\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\boxed{F\left(k,h(k)\right)}\cdot\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)\,d\eta\,dk$$

constante dans ce cas

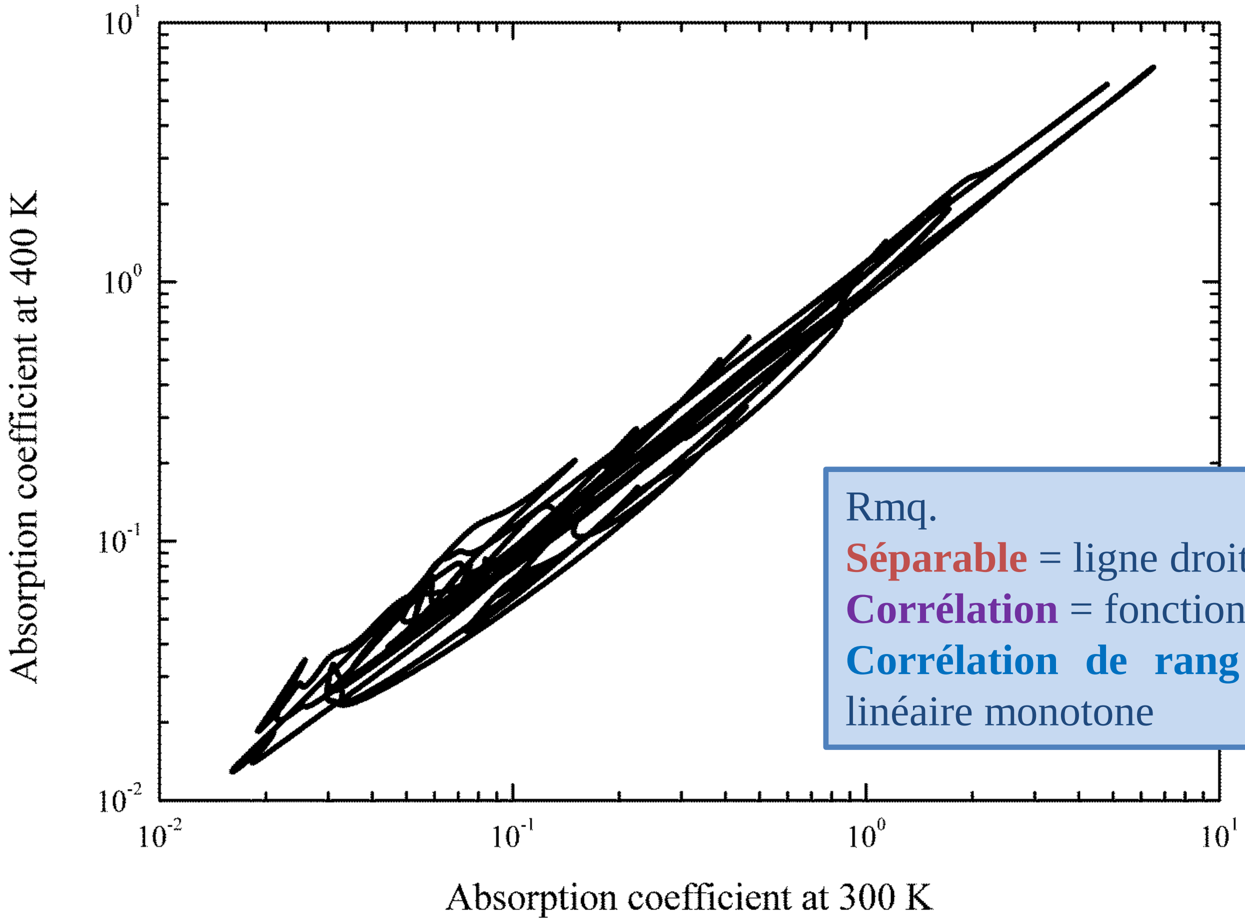
$$= \int_0^{+\infty} F\left(k,h(k)\right)\underbrace{\left(\frac{1}{\Delta\eta}\int_{\Delta\eta}\delta\left(k-\kappa_{\eta,1}\right)d\eta\right)}_{f(k)}\,dk$$

Le modèle *k*-corrélé en quelques dates

- L'hypothèse de **corrélation au sens de Spearman** (appelée aussi corrélation de rang) permet d'aboutir directement à **l'équation implicite sur les cumulées (égalité des rangs = égalité des cumulées)**.
- D'autres types de corrélations sont possibles :
  - **Corrélation linéaire** (au sens de Pearson) qui se retrouve généralement sous la forme de modèles dits séparables (Ex. Scaled-*k*).
  - **Corrélation non monotone** : **dans ce cas**, la fonction de corrélation *h* existe mais **l'équation implicite usuelle n'est plus valable**.

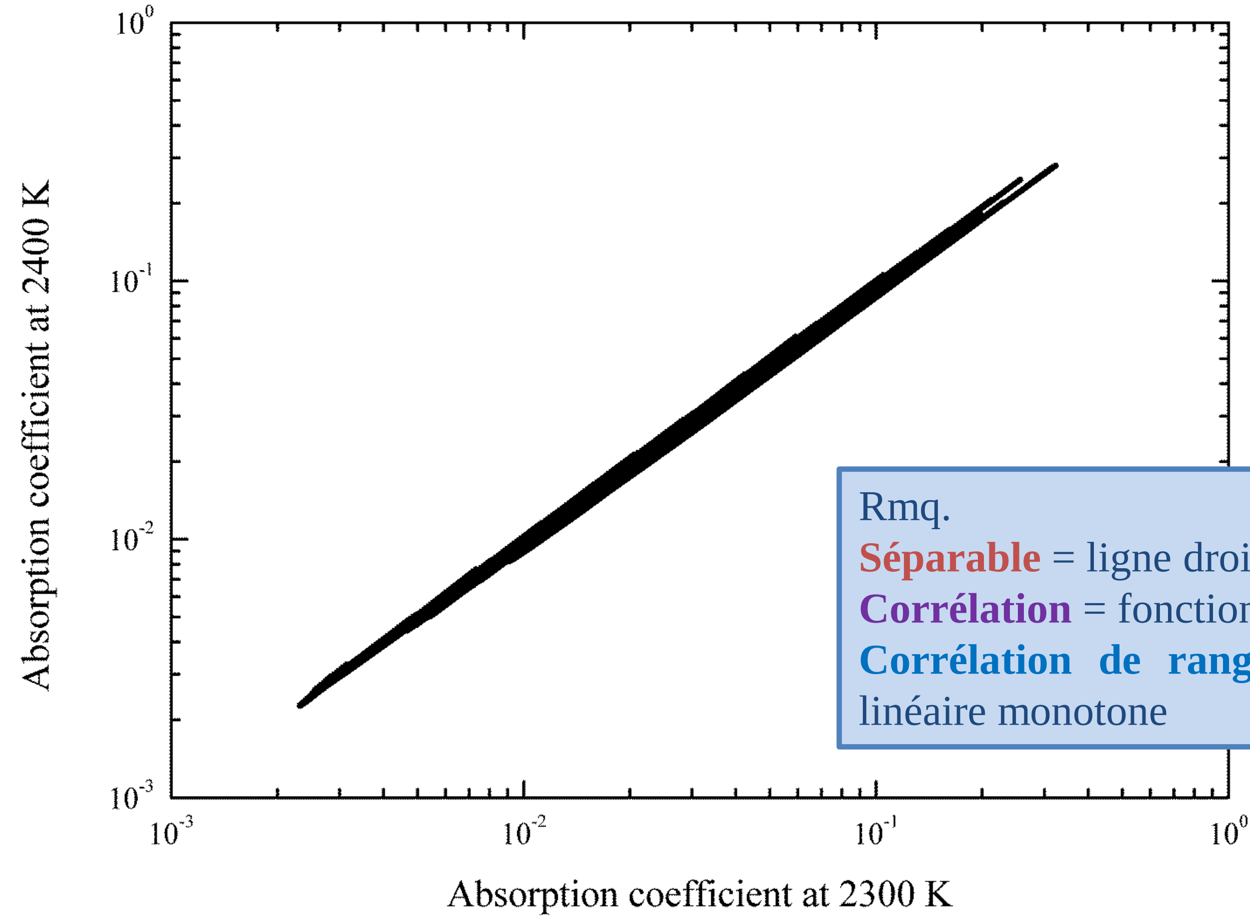


La corrélation en pratique



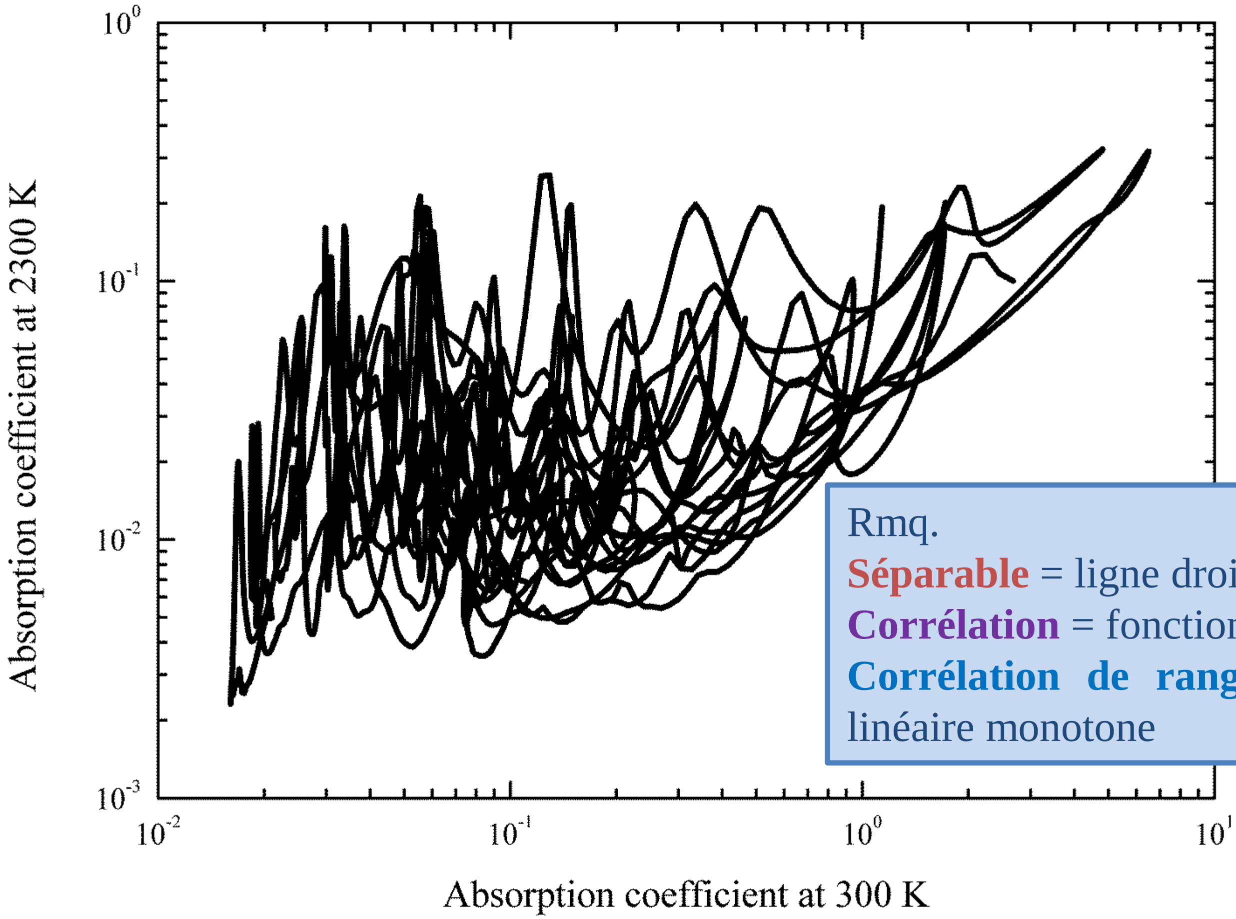
Rmq.
Séparable = ligne droite
Corrélation = fonction non linéaire
Corrélation de rang = fonction non linéaire monotone

La corrélation en pratique



Rmq.
Séparable = ligne droite
Corrélation = fonction non linéaire
Corrélation de rang = fonction non linéaire monotone

La corrélation en pratique



Rmq.
Séparable = ligne droite
Corrélation = fonction non linéaire
Corrélation de rang = fonction non linéaire monotone

La corrélation en pratique

- **En définitive** :
  - Aucune des hypothèses possibles (corrélation linéaire ou pas) n'est rigoureusement vérifiée en pratique.
  - Ces hypothèses restent acceptables pour de faibles gradients de température (les spectres proviennent des mêmes raies)
  - Dans des cas fortement anisothermes (Ex. Signature), on sait que ces hypothèses conduisent à des résultats médiocres.

Problème : dans la mesure où la corrélation n'est pas fondée sur une réalité physique mais plutôt sur une hypothèse « qui semble marcher », il est délicat de définir à priori son domaine exact de validité.

Le problème du couplage

- Un grand nombre de problèmes se formulent non pas en termes de forts gradients (deux valeurs de κ_η à des températures très différentes) mais en termes de κ_η et de sa dérivée par rapport à la température $d\kappa_\eta/dT$:
  - Couplages rayonnement-turbulence (Coelho, Progress in Energy and Combustion Sciences 2007)
  - Couplages rayonnement-convection naturelle (Bdéoui et Soufiani, Phys. Fluids 1997)
  - Analyse spectroscopique de flammes
  - Bilans thermiques atmosphériques (Goody et Yung 1989)
  - …

- Dans tous ces cas, on est amené à estimer des intégrales du type :

$$F^{\Delta\eta} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} F\left(\kappa_\eta, \frac{d\kappa_\eta}{dT}\right) d\eta$$

Le problème du couplage

- Le problème posé est ainsi le suivant :

F une fonction de κ_η et $\dfrac{d\kappa_\eta}{dT}$.

$$F\left(\kappa_\eta, \frac{d\kappa_\eta}{dT}\right) = \int_0^{+\infty} F\left(k, \frac{d\kappa_\eta}{dT}\right) \cdot \delta\left(k - \kappa_\eta\right) \, dk \quad \left(\text{formule de changement de variable au sens des distributions}\right)$$

$$\Rightarrow F^{\Delta\eta} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} F\left(\kappa_\eta, \frac{d\kappa_\eta}{dT}\right) d\eta = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \int_0^{+\infty} F\left(k, \frac{d\kappa_\eta}{dT}\right) \cdot \delta\left(k - \kappa_\eta\right) \, dk \, d\eta$$

On permutte les deux signes *sommes* (variables k et η independantes)

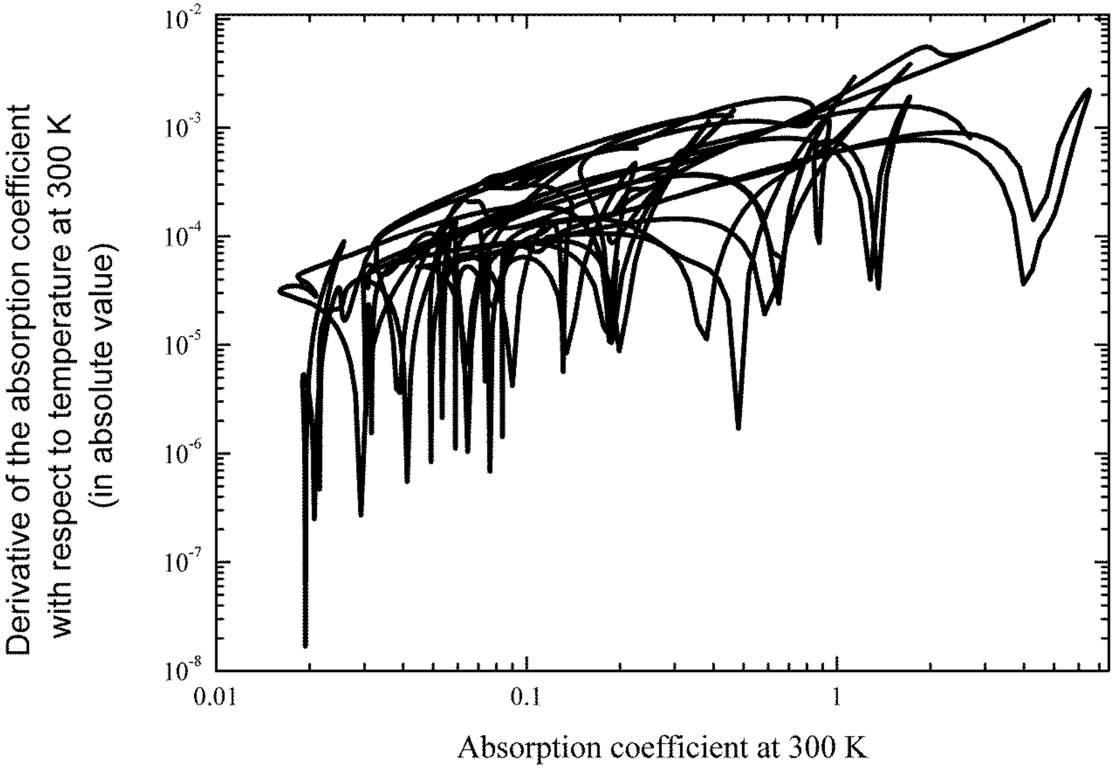
$$F^{\Delta\eta} = \int_0^{+\infty} \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \boxed{F\left(k, \frac{d\kappa_\eta}{dT}\right)} \cdot \delta\left(k - \kappa_\eta\right) d\eta \, dk$$

Pb : ≠ constante en général

κ_η et $d\kappa_\eta/dT$ peuvent-ils être supposés corrélés ?

Le problème du couplage

- Et bien la réponse est NON !



Remarque : cette figure a été modifiée par rapport à celle utilisée lors de la présentation (qui était peut être moins parlante).

Le problème du couplage

- **En d'autres termes** :
  - Les spectres d'absorption et leurs dérivées par rapport à la température ne sont pas rigoureusement corrélés (ni décorrélés d'ailleurs).
  - Ce problème est **formellement similaire à un problème mettant en jeu de forts gradients**.
  - Pour les mêmes raisons que précédemment, il est délicat d'estimer à priori l'impact d'une hypothèse de corrélation sur le résultat final.

Ainsi : faire une hypothèse de corrélation n'a pas de fondement physique. Ce qui ne signifie pas pour autant qu'elle donnera des résultats faux (comme dans les cas fortement anisothermes).

Le problème du couplage

- **Solutions usuelles :**
  - **Utiliser un modèle de type statistique (type SNB) car ces modèles sont dérivables [1].**
    Problème : ils sont moins précis que les approches en *k*-distributions.
  - **Développer un modèle spécifique (Bdéoui et *al*.).**
    Problème : le modèle doit être adapté au cas par cas.
  - **Négliger le terme mettant en jeu** $d\kappa_\eta/dT$.
    Problème : ce terme est en général faible devant les autres mais a été montré comme étant souvent loin d'être négligeable (Goody et Yung 1989).

- **Solution possible** (mais pas réellement étudiée jusqu'à présent)
  - Utiliser les mêmes modèles qu'en signature (gaz fictifs, mapping,..) sous faibles gradients car ils ont les bonnes propriétés pour ce type d'analyse.

[1] ceci peut en partie expliquer pourquoi les modèles de type SNB sont probablement les plus utilisés en analyse spectroscopique.

Le problème du couplage

- **Problèmes des gaz fictifs** :
  - Leur **formulation en *k* peut s'avérer plus coûteuse qu'un calcul RPR**.
  - Peuvent **générer des erreurs dans des cas faiblement anisothermes** (Rivière, JQSRT 1992).

  Cependant ils ont été montrés comme plus précis que des modèles simples en analyse spectroscopique (André, ISTP23, 2012) et donc ont les bonnes propriétés.

- **Autres approches ?**
  - Développements spécifiques menés depuis 2008 visant à **généraliser l'approche en *k*-distribution à des milieux anisothermes.**
  - Cette approche repose sur une **formulation exacte du problème** (donc ne souffre pas des problèmes rencontrés avec les gaz fictifs).

  Pb : la formulation exacte est **coûteuse en calculs**.

  - **Une formulation simplifiée existe** (Multi-spectrale) mais elle reste à valider en calculs couplés (elle l'a été en calculs 1D, et montrée comme plus précise que le CK sur des profils de TRI).

Conclusion

Faut-il ou pas des modèles sophistiqués de rayonnement des gaz pour des transferts couplés ?

OUI et NON

OUI :

- **Car rien ne prouve qu'un modèle "simple" marchera dans un cas général.**
- **Les modèles "sophistiqués" usuels ont les bonnes propriétés pour traiter ces cas.**
- **Ils permettent de travailler avec des bandes spectrales larges en maintenant (ou améliorant, Pierrot, JQSRT 1999; Zhang et Modest, IJHMT 2003) la précision des calculs.**

NON :

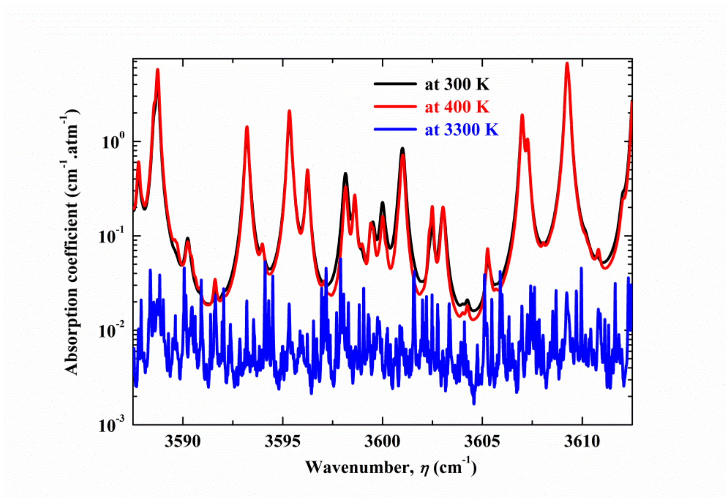
- **Car rien ne prouve qu'un modèle simple ne marchera pas dans un cas général.**
- **La précision a un coût qu'il faut accepter de payer.**

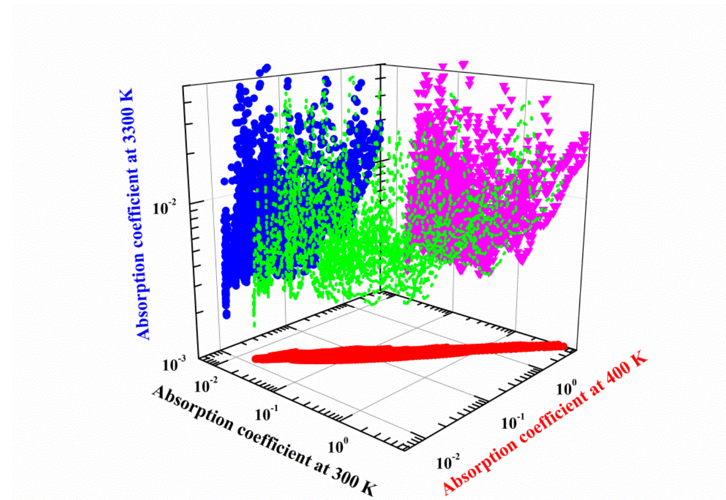
L'APPROCHE MULTISPECTRALE EST PROMETTEUSE[1] MAIS RESTE A VALIDER COMPLETEMENT DANS CE GENRE DE SITUATIONS.

[1] Elle s'applique en *k*, est compatible avec des parois réfléchissantes, son surcoût est raisonnable par rapport aux FG.

MERCI POUR VOTRE ATTENTION !

$$\overline{\tau}^{\Delta\eta}(l)=\int_{\mathbb{R}^+} f(k)\ exp(-kl)\ dk \rightarrow \overline{\tau}^{\Delta\eta}(l)=\int_{\vec{k}\in\mathbb{R}^n_+} f(\vec{k})\ exp\left[-\vec{k}.(\overrightarrow{xPl})\right]\ d\vec{k}$$





USING DISTRIBUTIONS IN HIGH DIMENSIONS ENABLES TO CALCULATE RIGOROUSLY THE SENSITIVITIES OF SPECTRA WITH RESPECT TO TEMPERATURE,COMPOSITION AND PRESSURE (ANDRE, JQSRT 2014)