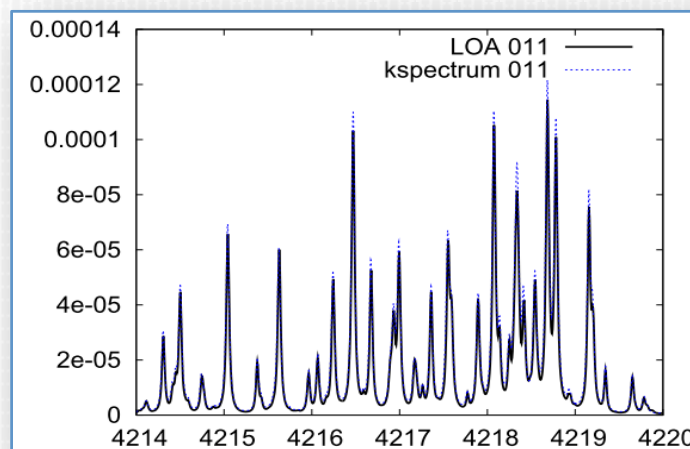


# PRODUCTION DE SPECTRES HAUTE RÉSOLUTION DES MELANGES DE GAZ



**5<sup>èmes</sup> Journées d'Etudes en Rayonnement Thermique**

**8 et 9 décembre 2011**

**Mathieu GALTIER**

**Mouna EL HAFI - Vincent EYMET**

*Laboratoire RAPSODEE - Ecole des Mines d'Albi*

# INTRODUCTION

---

- Une majorité de problématiques scientifiques et donc radiatives requièrent une totale maîtrise des données sur lesquelles elles s'appuient.
- Cela concerne en particulier les hypothèses physiques et les concessions numériques liées à la production de spectres radiatifs haute résolution :
  - ✓ Etude radiative de la combustion (projet ITAAC)
  - ✓ Etude de l'atmosphère terrestre
  - ✓ Etude des atmosphères de Vénus, Mars et d'exoplanètes.
- Développement d'un outil permettant de produire des spectres haute résolution avec une connaissances des divers paramètres et hypothèses posées (Vincent EYMET).



# SOMMAIRE

---

I. GÉNÉRATION DE SPECTRES DE HAUTE RÉOLUTION

II. VERS UNE PRISE EN COMPTE TOTALE DES TRANSITIONS

III. MODULARITÉ DU CODE VIS À VIS DE LA PHYSIQUE SPECTRALE

IV. BASES DE DONNÉES DE TRANSITIONS GÉRÉES



# SOMMAIRE

---

## I. GÉNÉRATION DE SPECTRES DE HAUTE RÉOLUTION

1. DES TRANSITIONS AU SPECTRE HR
2. EXEMPLE DE SPECTRE HR
3. BUT DU CODE KSPECTRUM
4. MOTIVATIONS
5. APPLICATIONS DIRECTES

## II. VERS UNE PRISE EN COMPTE TOTALE DES TRANSITIONS

## III. MODULARITÉ DU CODE VIS À VIS DE LA PHYSIQUE SPECTRALE

## IV. BASES DE DONNÉES DE TRANSITIONS GÉRÉES

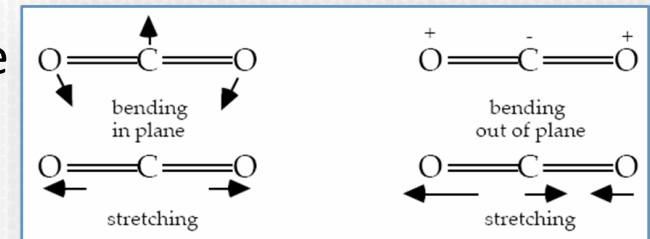


# 1) DES TRANSITIONS AU SPECTRE HR

- Un gaz : mélange de molécules à des conditions thermodynamiques données.

- Chaque molécule possède un **état énergétique** propre

- Translation entre les atomes.
- Rotations entre les atomes.

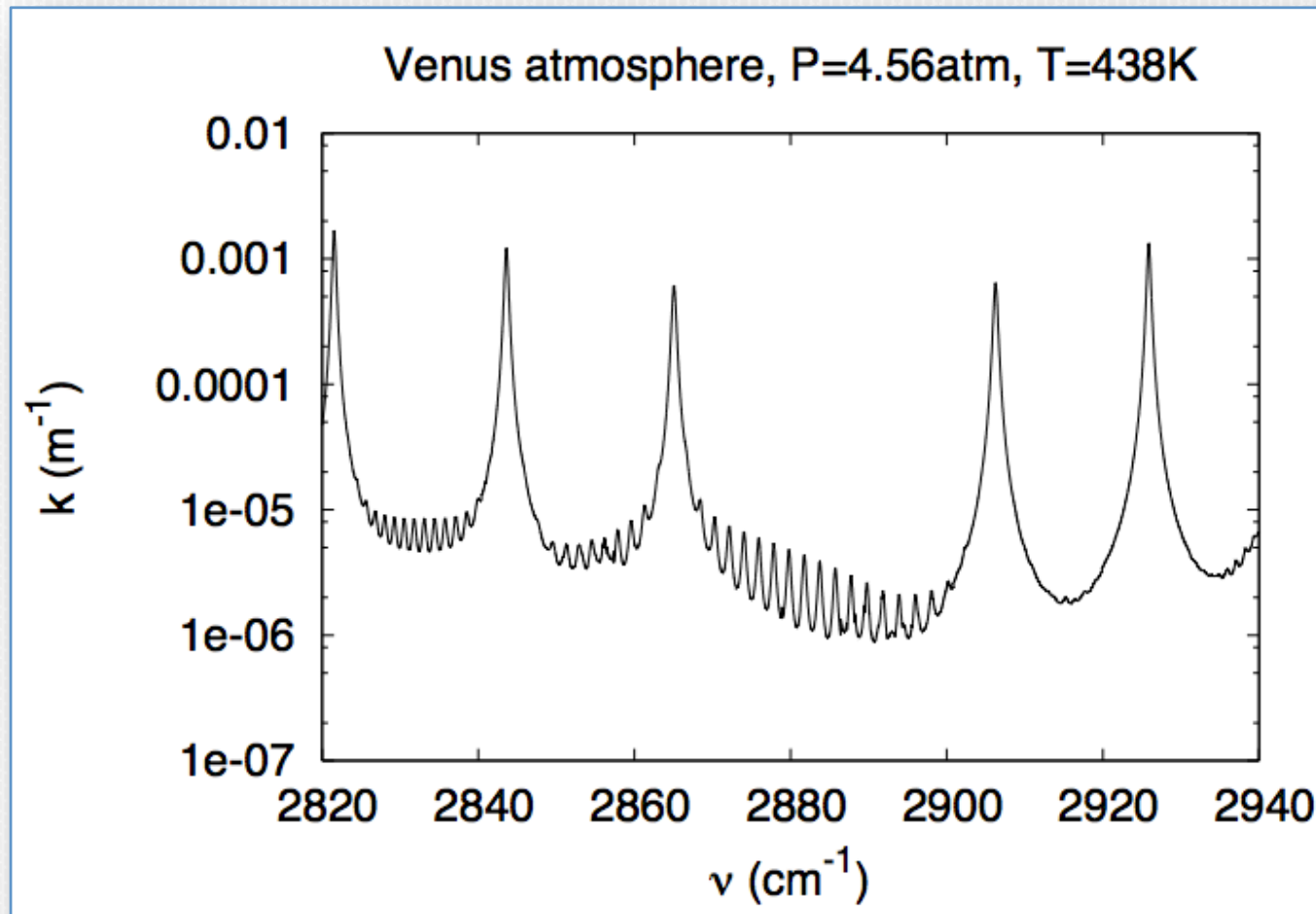


- Lorsqu'un photon est absorbée par la molécule, elle change d'état énergétique : on parle de **transition Energétique** qui se caractérise spectralement sous la forme d'une raie d'absorption.

- Ces transitions sont quantifiées : seuls les photons ayant une énergie et donc une fréquence « compatible » avec l'état de la molécule peuvent être absorbés.

- Un spectre d'absorption haute résolution d'un gaz décrit donc les coefficients d'absorption  $k_a$  (propres à l'ensemble des transitions énergétiques du gaz) en fonction de la fréquence.

## 2) EXEMPLE DE SPECTRE HR



Mélange de 9 molécules, P=4.56atm, T=438K

## 3) BUT DU CODE KSPECTRUM

---

- Les paramètres des transitions énergétiques sont répertoriés dans des bases de données « LBL » ou « de transition ».
- A partir de bases de données « LBL » → **Création de spectres haute définition ...**
  - ... pour un grand nombre de molécules et un nombre illimité de mélanges ...
  - ... pour toutes conditions thermodynamiques ...
    - ✓ Pression
    - ✓ Température
    - ✓ Fraction molaire
  - ... en maîtrisant et garantissant l'incertitude numérique.

### → DEVELOPPEMENT DU CODE KSPECTRUM

## 4) MOTIVATIONS

- De nombreux codes existent mais présentent certaines limites :
  - Codes propriétaires.
  - Développés pour des applications très restrictives.
  - Compromis physiques pour accélérer les temps de calcul.
  - Incertitudes non maîtrisées.
- Désir de maîtriser l'ensemble de la chaîne de production spectrale.



- Sans dépendre de diverses sources pour les données spectrales.
- Latitude sur les conditions thermodynamiques.
- Maîtrise de l'erreur numérique et des incertitudes.
- Recherche de la précision au dépend du temps de calcul.



## 5) APPLICATIONS DIRECTES

---

**A partir des spectres HR créés par KSpectrum, un grand nombre d'applications deviennent possibles.**

- Emploi / Développement de modèles spectraux
  - ✓ k-distributions
  - ✓ ck-distributions
  - ✓ ...
- Simulations haute résolution de transfert radiatif justifiées dans l'étude radiative de :
  - ✓ Systèmes combustifs
  - ✓ Planètes (travaux réalisés sur Vénus)
  - ✓ Atmosphérique
- Création de spectres et simulations de référence
  - Les approximations / incertitudes sont en permanence maîtrisées



# SOMMAIRE

---

## I. GÉNÉRATION DE SPECTRES DE HAUTE RÉOLUTION

## II. VERS UNE PRISE EN COMPTE TOTALE DES TRANSITIONS

1. TECHNIQUES CONVENTIONNELLES
2. TRONCATURES D'AILES DE RAIES
3. SÉLECTION DE RAIES
4. SOLUTION DÉVELOPPÉE DANS KSPECTRUM

## III. MODULARITÉ DU CODE VIS À VIS DE LA PHYSIQUE SPECTRALE

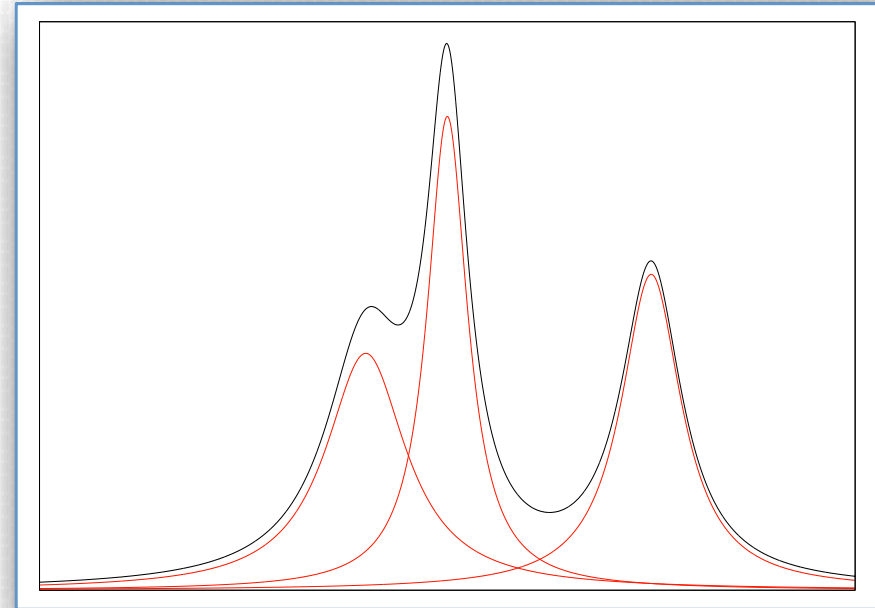
## IV. BASES DE DONNÉES DE TRANSITIONS GÉRÉES



# 1) TECHNIQUES CONVENTIONNELLES

- Théoriquement les contributions de l'ensemble des raies doivent être prises en compte pour une fréquence donnée.

$$ka_{\nu}(\text{mélange}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{raies}}} ka_{\nu}(i)$$



- Généralement les codes de créations de spectres HR usent d'astuces numériques pour réduire les temps de calcul :
  - ✓ Troncature d'ailes de raies
  - ✓ Sélection de raies
- Ces techniques numériques ne garantissent pas l'erreur relative au spectre obtenu.

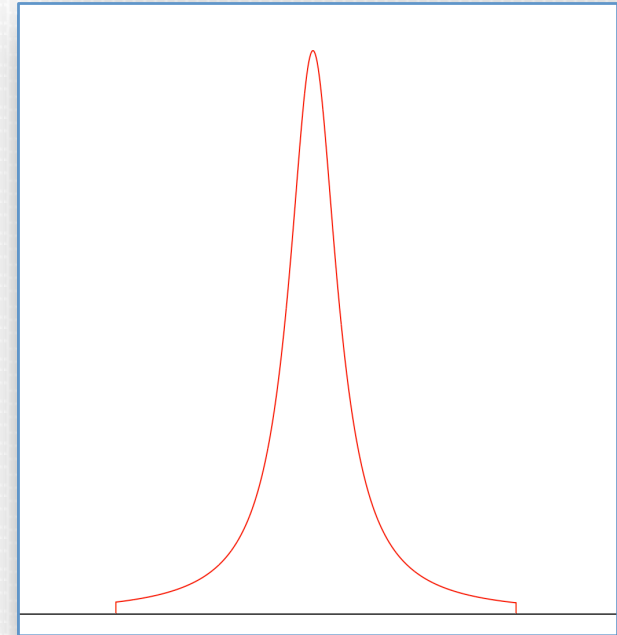
## 2) TRONCATURES D'AILES DE RAIES

- Une manière d'accélérer les calculs : tronquer les raies au niveau de leurs ailes où leur participation est faible.
- La distance de troncature  $d$  est purement arbitraire.
  - ✓ Traditionnellement  $25\text{cm}^{-1}$ .

- On considère donc que :

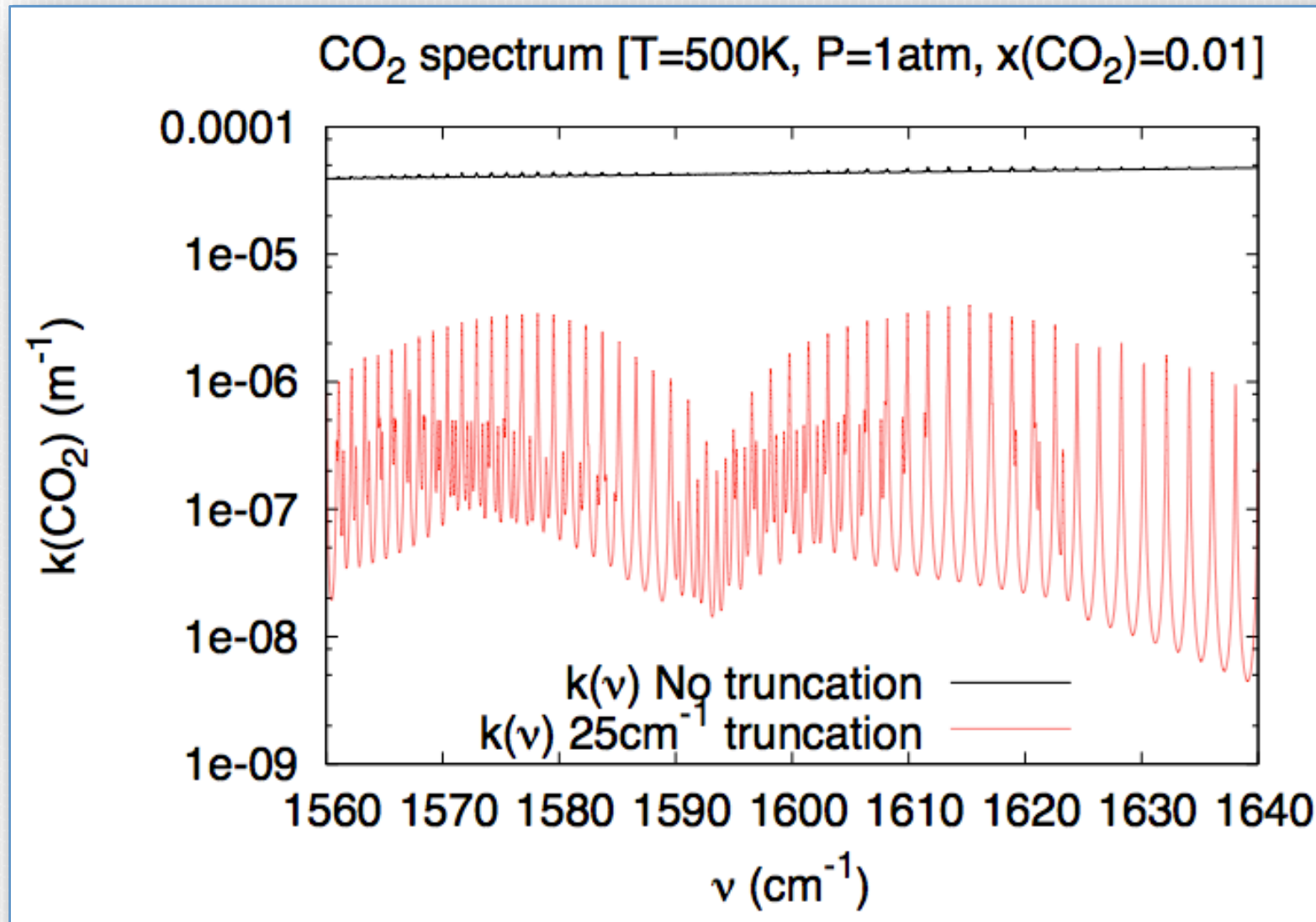
$$f(\nu - \nu_0) = 0 \quad \text{pour } |\nu - \nu_0| > d$$

- Le temps de calcul gagné est conséquent au dépend de la précision.
  - La somme d'un grand nombre de contributions faibles n'est pas négligeable.



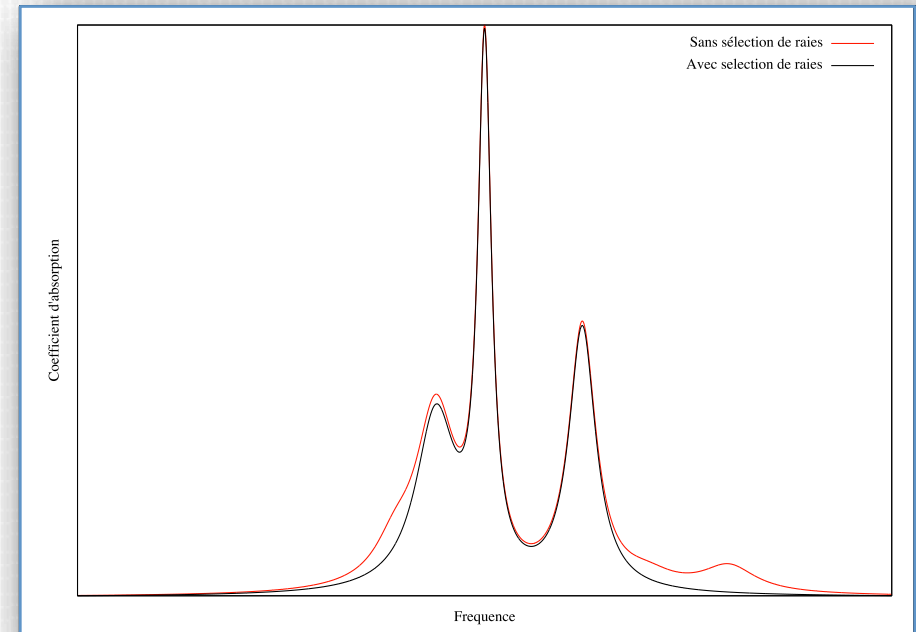
➔ ERREURS NON MAITRISEES

## 2) TRONCATURES D'AILES DE RAIES



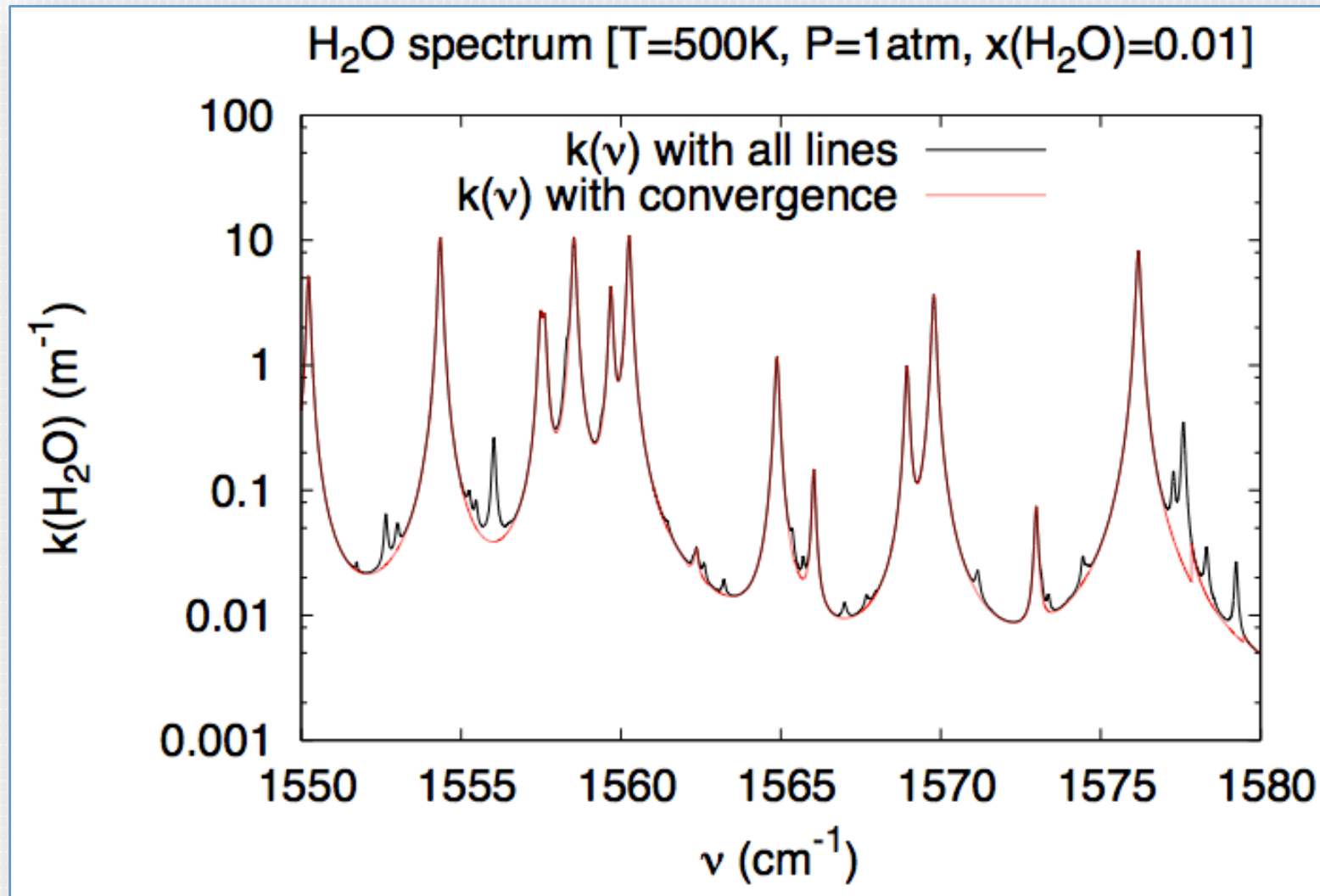
### 3) SÉLECTION DE RAIES

- Une autre solution : ne prendre en considération que les raies supérieures à une intensité donnée.
- On perd alors beaucoup d'information car beaucoup de transitions sont exclues du processus de calcul.
- Le coefficient d'absorption est systématiquement sous-estimé.



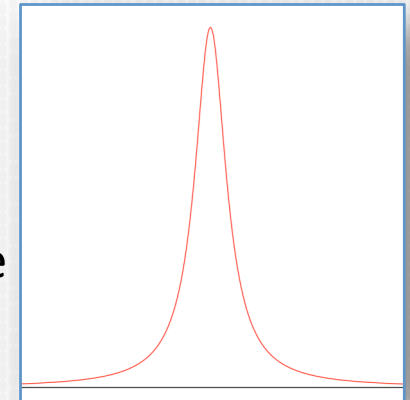
➔ ERREURS NON MAITRISEES

### 3) SÉLECTION DE RAIES



## 4) SOLUTION DÉVELOPPÉE DANS KSPECTRUM

- Les participations de toutes les transitions sont prises en compte.
  - ✓ Il est possible de recourir aux « astuces numériques » précédentes.
- Pour accélérer le calcul, les ailes de raies sont considérées comme constantes par morceaux en dessous d'une certaine pente (définie par l'utilisateur).
- Le reste des raies est maillé « intelligemment » de façon à minimiser le temps de calcul tout en respectant en permanence un écart inférieur à une valeur définie par l'utilisateur.
- L'erreur maximale est donc garantie par les définitions de l'utilisateur.
  - ✓ Solution de référence.
  - ✓ S'allie parfaitement en post-processing avec des algorithmes de Monte Carlo.



*[Possibilité de revenir sur ces algorithmes d'incertitudes contrôlées en fin d'exposé]*





# SOMMAIRE

---

## I. GÉNÉRATION DE SPECTRES DE HAUTE RÉOLUTION

## II. VERS UNE PRISE EN COMPTE TOTALE DES TRANSITIONS

## III. MODULARITÉ DU CODE VIS À VIS DE LA PHYSIQUE SPECTRALE

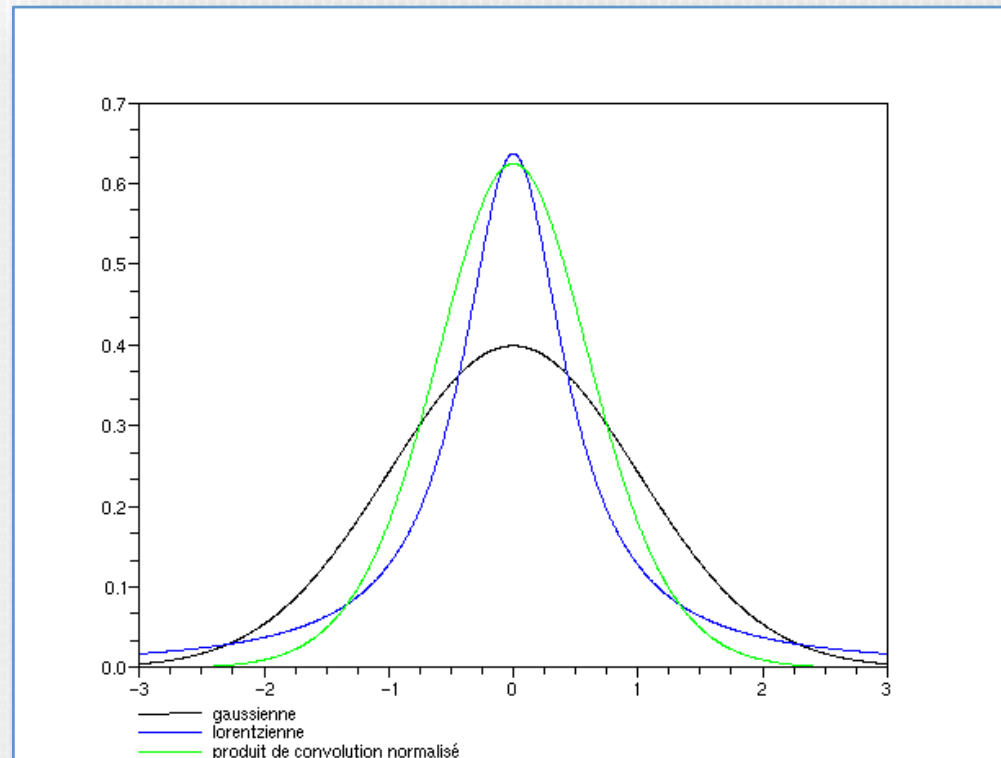
1. PROFILS DE LORENTZ ET DE VOIGT
2. ELARGISSEMENT DE RAIES PAR LES AUTRES GAZ
3. ABSORPTION INDUITE PAR COLLISIONS
4. PROFIL SUB-LORENTZIEN

## IV. BASES DE DONNÉES DE TRANSITIONS GÉRÉES



# 1) PROFILS DE LORENTZ ET DE VOIGT

- Plusieurs phénomènes sont à l'origine d'un élargissement des raies :
  - ✓ Elargissement naturel (incertitude d'Heisenberg)
  - ✓ Elargissement par effet Doppler
  - ✓ Elargissement collisionnel
  
- Les deux principaux profils modélisant ces élargissements sont gérés par Kspectrum :
  - ✓ Profil de Lorentz
  - ✓ Profil de Voigt
  
- Le profil de Voigt (par défaut) est privilégié pour les basses pressions.



## 2) ELARGISSEMENT DE RAIES PAR LES AUTRES GAZ

---

- Les raies de transition de molécules peuvent être élargies par des collisions dues aux molécules voisines.
- Dans les bases de données LBL, les paramètres (largeurs de raies à mi-hauteur) sont définis pour les participations de :
  - ✓ Gaz de molécules de même espèce ( $\gamma_{self}$ )
  - ✓ Air ( $\gamma_{other}$ )

$$\gamma_{Lorentz} = \left( \frac{T_{ref}}{T} \right)^{n_{other}} \left[ \gamma_{self} P_s + \gamma_{other} P_s \right]$$

- Faute de mieux, seuls ces paramètres sont intégrées à Kspectrum.
- En effet, il n'existe pas de modèle absolu permettant une prise en compte globale de ce phénomène (pour tout mélange par exemple).



## 3) ABSORPTION INDUITE PAR COLLISION

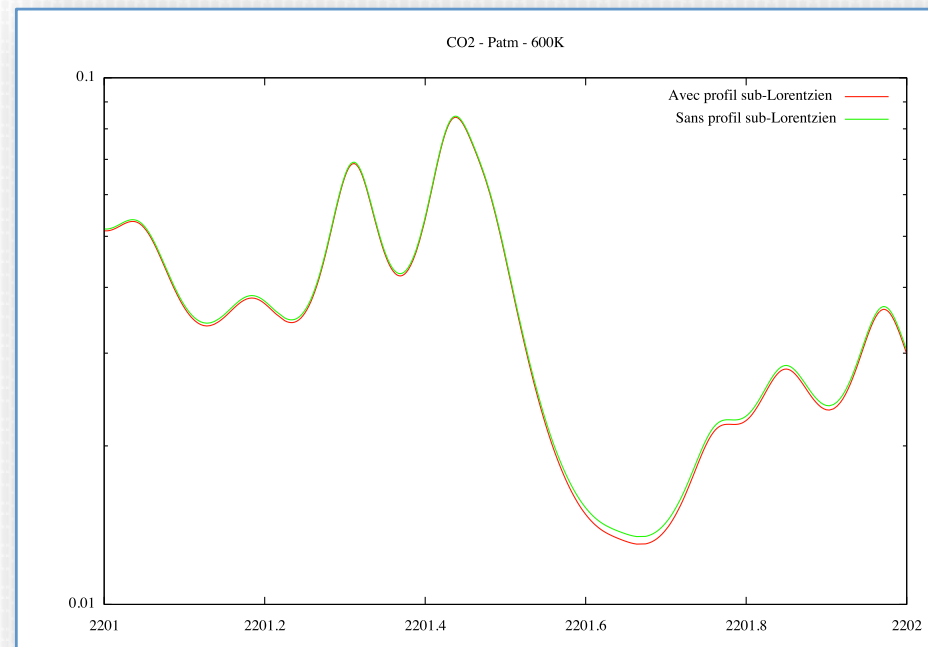
---

- A de très haute températures et/ou pressions, les collisions entre les différentes molécules produisent temporairement de nouvelles espèces avec leurs propres transitions énergétiques.
- En particulier, les modèles proposés par Gruszka et Borysow<sup>1</sup> ont été intégrés à Kspectrum.
- Cependant, leurs conditions d'applications demeurent relativement restrictives.

1) Gruszka & Borysow. *Icarus* 129, 172-177

## 4) PROFIL SUB-LORENTZIEN

- Il a été mis en évidence que les profils de Lorentz et Voigt surestiment les valeurs au niveau des ailes de raies.
- Plusieurs modèles correctifs ont été avancés par la communauté :
  - ✓ Burch & al. , 1969
  - ✓ Cousin & al. , 1985
  - ✓ Doucen & al. , 1985
  - ✓ Menoux & al. , 1987
  - ✓ Perrin & Hartmann , 1989
  - ✓ Tonkov & al. , 1996
- Ces modèles sont implémentés dans Kspectrum et laissés au choix de l'utilisateur (selon les conditions).



# SOMMAIRE

---

I. GÉNÉRATION DE SPECTRES DE HAUTE RÉOLUTION

II. VERS UNE PRISE EN COMPTE TOTALE DES TRANSITIONS

III. MODULARITÉ DU CODE VIS À VIS DE LA PHYSIQUE SPECTRALE

IV. BASES DE DONNÉES DE TRANSITIONS GÉRÉES

1. BASES DE DONNÉES BASSES TEMPÉRATURES
2. BASES DE DONNÉES HAUTES TEMPÉRATURES
3. COMPARAISON HITRAN 2008 / HITEMP 2010



# 1) BASES DE DONNÉES BASSES TEMPÉRATURES

- KSpectrum est capable de gérer (manuellement ou automatiquement) les bases de données LBL suivantes

BASES DE DONNEES	CARACTERISTIQUES
HITRAN 2004	39 molécules (H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , O <sub>3</sub> , N <sub>2</sub> O, CO, CH <sub>4</sub> , O <sub>2</sub> , NO, SO <sub>2</sub> ...)
HITRAN 2008	42 molécules (H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , O <sub>3</sub> , N <sub>2</sub> O, CO, CH <sub>4</sub> , O <sub>2</sub> , NO, SO <sub>2</sub> ...)

- De par leur relative légèreté, ces bases sont très intéressantes pour de faibles températures (<800K)
- L'extrapolation des données LBL pour créer des spectres de plus hautes températures s'avère très incertain

## 2) BASES DE DONNÉES HAUTES TEMPÉRATURES

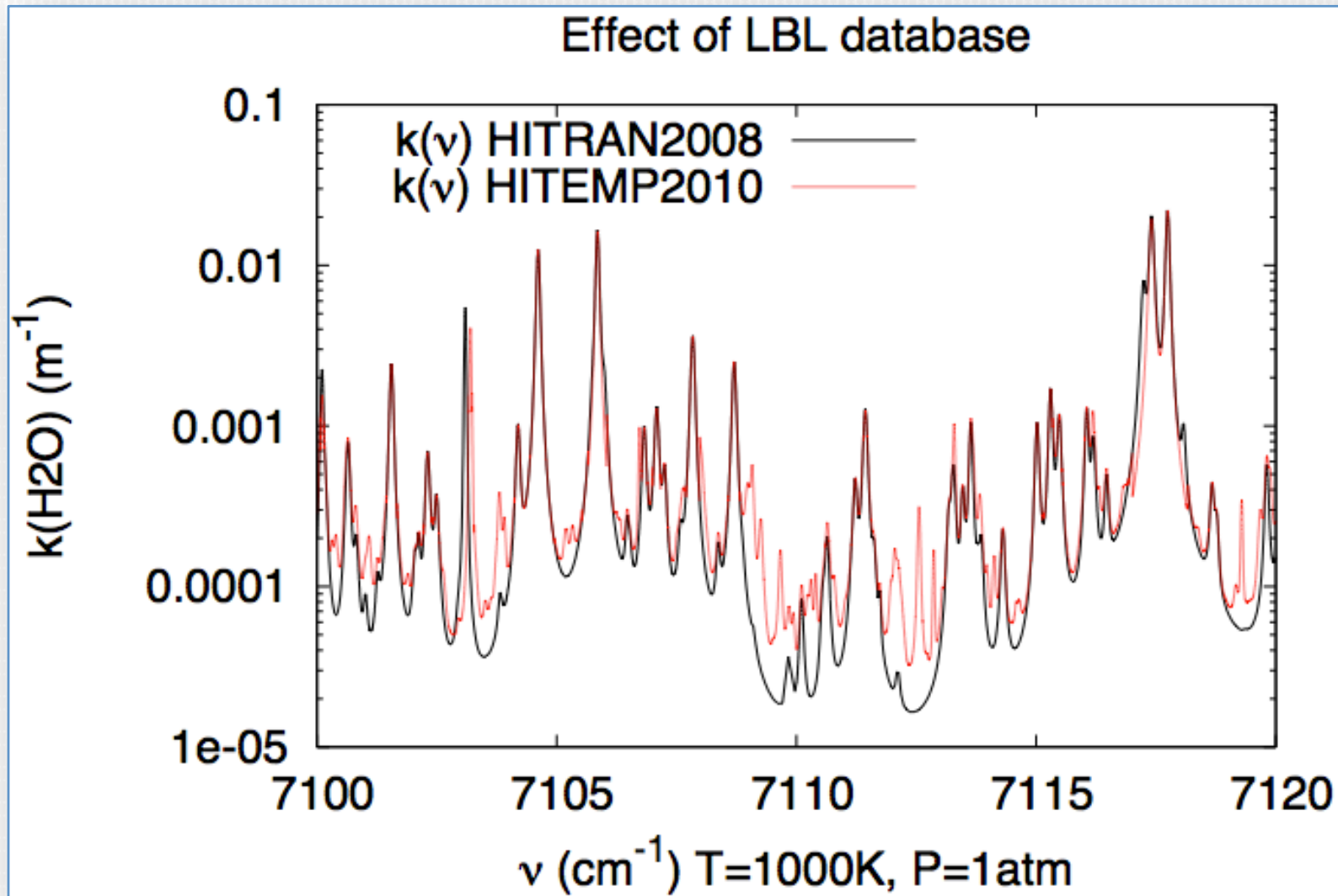
- A hautes températures de nouvelles transitions s'activent, d'autres s'annihilent.

BASES DE DONNEES	CARACTERISTIQUES
HITEMP 2004	H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CO, NO, OH
HITEMP 2010	H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CO, NO, OH
CSDS 4000	CO <sub>2</sub>

- Ces bases de données sont très gourmandes en ressources (plusieurs dizaines de Giga-octets)
  - Augmentation conséquente des temps de calcul
- Leur usage doit être privilégié pour les hautes températures



### 3) COMPARATIF HITRAN 2008 / HITEMP 2010



# CONCLUSION

---

- KSpectrum est un code libre qui permet :
  - ✓ Une maîtrise permanente de l'incertitude numérique
  - ✓ D'atteindre un degré de précision spécifié
  - ✓ Une entière reproductibilité des spectres HR
  - ✓ Une totale paramétrisation des hypothèses physiques
  - ✓ Une gestion des principales bases de données de transitions
- Plusieurs applications de ce code vont voir le jour :
  - ✓ Création d'une base de données spectrale HR haute température
  - ✓ Développement de modèles spectraux pour une intégration dans les méthodes de Monte Carlo
- Pour en savoir plus et/ou télécharger le code :
  - ✓ <http://code.google.com/p/kspectrum/>

*MERCI DE VOTRE ATTENTION*

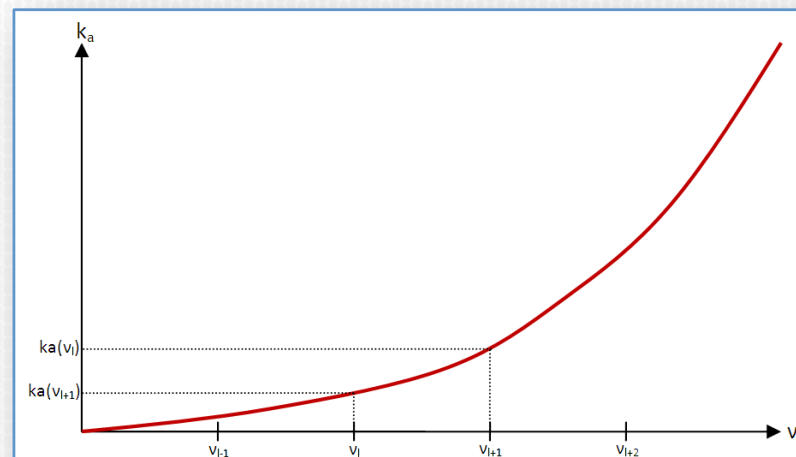
*DES QUESTIONS ?*



# INCERTITUDES POUR UNE FRÉQUENCE DONNÉE

- Les participations de toutes les transitions sont prises en compte tout en garantissant une incertitude spécifiée.
- Pour accélérer le calcul :
  - La plage spectrale d'étude est maillé (automatiquement ou manuellement)
  - L'utilisateur définit une incertitude maximale  $\epsilon_1$
  - Si l'**erreur relative** d'une raie au sein d'une maille est inférieure à  $\epsilon_1$ , on moyenne la valeur du **ka** sur la maille (la courbe est considérée constante)
  - Sinon : la variation du **ka** au sein de la maille maille est prise en compte

$$\epsilon = \frac{|ka_{i+1} - ka_i|}{\min(ka_{i+1} ; ka_i)}$$



# INCERTITUDES LIÉES A L'INTERPOLATION DES RAIES

- Le maillage des portions de raies à forts gradients se fait de manière intelligente.
- Il est réalisé de sorte que la linéarisation du profil sur une maille ne diffère du profil théorique au maximum que de l'erreur définie par l'utilisateur.
- Pour se faire, les profils de Lorentz et de Voigt sont tabulés de façon à déterminer la maille suivante.

$$\text{Ex : } f(v) = \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (v - v_c)^2} \Rightarrow f(x) = \frac{1}{\gamma_L} \frac{1}{1 + x^2}$$

$X_{\min}$	$X_{\max}$	$X_{i+1}$
-38.7956742	-38,7128804	-34,655985
-38,7128804	-38,6303453	-34,5861283

