

Présentation du projet de travail collectif du GDR ACCORT pour l'intercomparaison de modèles de transferts radiatifs

Frédéric André, Cyril Caliot



Objectifs

- Réaliser des **inter-comparaisons de modèles** de transferts radiatifs : Benchmark
 - Sur la **précision**
 - Et sur le **temps** de calcul
- Créer une **dynamique** entre les équipes (GDR ACCORT) autour du BENCHMARK



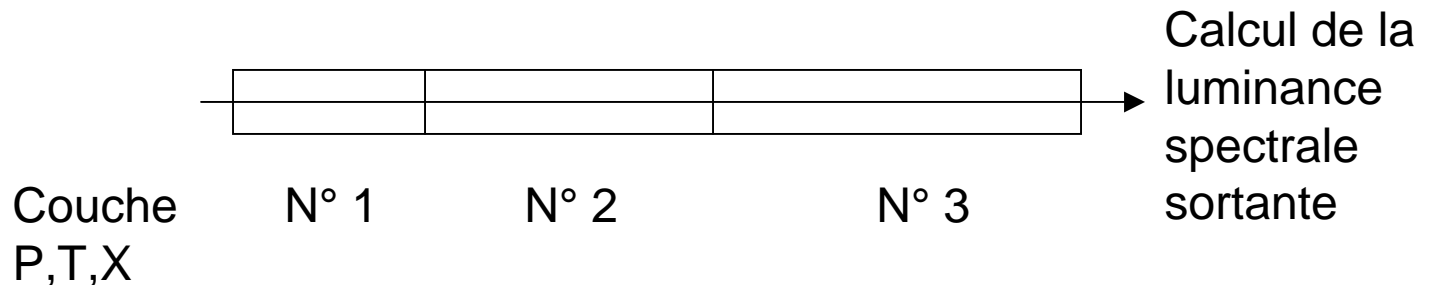
Déroulement

- Les inter-comparaisons de modèles peuvent être réalisées pour différentes **configurations** :
 - Géométries : 0D, 1D, 2D, 3D
 - épaisseurs optiques : minces, épaisses, (constantes ou variables)
 - Milieu participant : émissif, absorbant (gaz haute température) et diffusant (particules, agrégats).
- Les données d'entrée seront **identiques** à tous les modèles (e.g. spectres haute résolution)
- La participation et les configurations sont définies par les **intérêts** de chacun.

Un exemple ...

- Étude de l'influence des **corrélations spectrales** en concentration dans les milieux hétérogènes

1. Production des spectres haute résolution de CO₂ H₂O etc.
(Rapsodee-Laplace)
2. Étude en 0D des corrélations avec différents modèles spectraux



3. Puis, en 1D ... (2D, 3D)

Modèles de transferts radiatifs : forces et faiblesses

LABORATOIRE
PROCÉDÉS, MATÉRIAUX
et ENERGIE SOLAIRE

UPR 8521 du CNRS,
conventionnée avec
l'université de Perpignan

PROCESSES, MATERIALS
and SOLAR ENERGY
LABORATORY

Cyril Caliot



Considérations générales

- La simulation des transferts couplés, écoulement, réactions chimiques et transferts de chaleur (avec rayonnement)
 - Nécessite la résolution des champs de températures, de concentrations, de vitesses et de pressions.
 - Le couplage avec le rayonnement intervient dans l'éq. de l'énergie

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \left(\underbrace{-k \nabla T}_{\text{conduction}} + \underbrace{\mathbf{q}_R}_{\text{radiation}} \right) - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \mu \Phi + \dot{Q}'''$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_R = \kappa_\lambda [4\pi i_{\lambda b}(\tau_\lambda) - G(\tau_\lambda)] \quad G(\tau_\lambda) = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} i(\tau_\lambda, \theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi$$

- Cas des milieux participants à propriétés radiatives non grises
 - Dépendances des propriétés avec la température, la concentration et la pression.

$$\frac{di(\tau_\lambda, \theta, \phi)}{d\tau} + i(\tau_\lambda, \theta, \phi) = (1 - \omega) i_{\lambda b}(\tau_\lambda) + \left(\frac{\omega}{4\pi} \right) \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} i(\tau_\lambda, \theta', \phi') p((\theta', \phi') \rightarrow (\theta, \phi)) \sin \theta' \, d\theta' \, d\phi'$$




Méthode idéale de résolution des transferts radiatifs

- Traite des géométries complexes et 3D
- Bonne précision pour des milieux :
 - non diffusant et diffusant anisotropiquement,
 - gris et non gris,
 - optiquement mince et épais,
 - isothermes et anisothermes.
- Mise en œuvre simple
- Faible temps de calcul



Plan

- Solutions « exactes »
- Méthode stochastique
 - Monte Carlo
- Méthodes déterministes
 - Méthode des zones
 - Méthode des Moments, P_N , SKn
 - Méthode pour les milieux épais
 - Méthodes des Flux Multiples
 - Méthodes des Ordonnées Discrètes
 - Méthode des Transferts Discrets
 - Géométries complexes
 - Astuces : MDOM & MDA

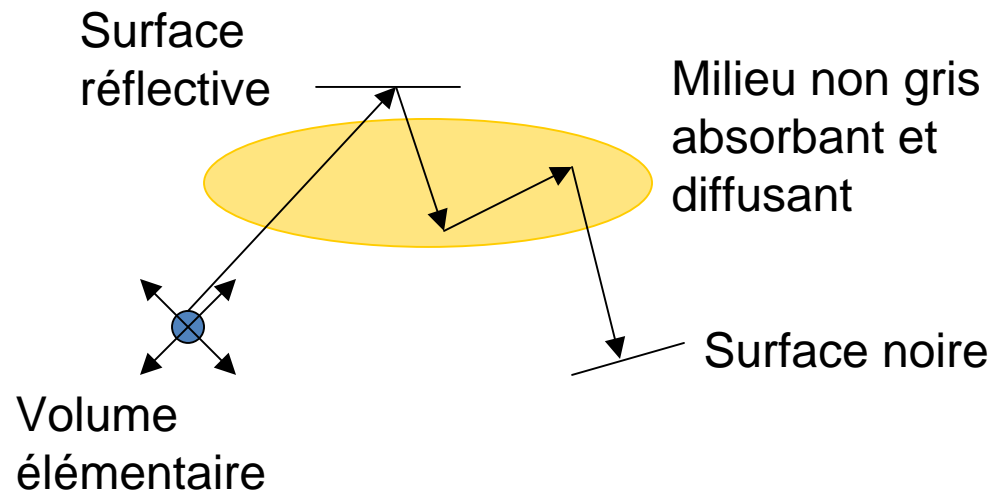


Solutions « exactes »

- Des ***solutions exactes*** sont disponibles pour des configurations 1D (plan, cyl) et 2D, 3D en cylindrique et parallélépipédique.
- Elles contiennent des **hypothèses simplificatrices** empêchant de les appliquer à des cas réels plus complexes (géométries, propriétés radiatives)
- Ces *solutions exactes* servent de **solutions de référence** (benchmark) pour la validation de méthodes approchées

Méthode Stochastique

- Monte Carlo - Lancer de Rayons :
 - Suivi du trajet de **N paquets de photons** depuis l'émission jusqu'à l'absorption, effectuant une marche aléatoire de diffusion dans le milieu (volume et surface)





Méthode de Monte Carlo

- Avantages :

- Traitement facile des **milieux** diffusants **anisotropiquement** et **non gris**, avec des propriétés **dépendantes de T**
- Bonne implémentation en **géométries complexes**
- Bonne **précision** (Nbre d'échantillonnages élevé ; intervalle de confiance) utilisée pour produire des **solutions de référence**

- Inconvénients :

- **Temps de calcul élevé** : difficile de l'utiliser pour des calculs de transferts couplés, bien que fortement parallélisable
- **Fluctuation statistique** des résultats : peut entraîner des difficultés de convergence lors de simulations de transferts couplés



Méthodes Déterministes

- **Discrétisation du domaine spatial**

(en volumes et surfaces élémentaires à propriétés homogènes.)

- Méthodes des Zones, Moments, P_N , SKn

- **Discrétisation du domaine spatial et angulaire**

(en angles solides élémentaires à luminance constante)

- Méthodes des Flux (2, 4 et 6 Flux)

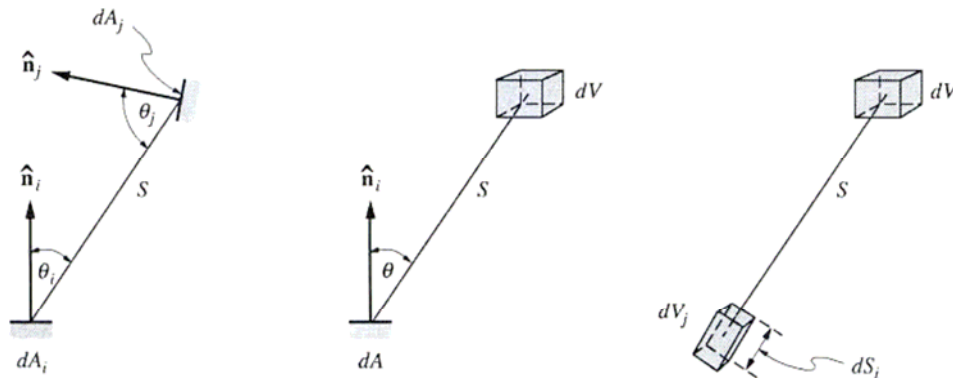
- Méthodes des Ordonnées Discrètes, Volume Finis

- Méthodes des Éléments Finis,

- Méthodes Meshless

Méthode des Zones

- Avantages :
 - **Pre-calcul** des Surfaces d'Échange Direct/Indirect dans le cas où les propriétés radiatives *ne dépendent pas de T* : utile pour les simulations de **transferts couplés**.
- Inconvénients :
 - **Temps de calcul élevé** si :
 - le milieu est **non-gris**,
 - la **diffusion** est fortement **anisotrope**,
 - Et les propriétés radiatives sont **fonction** de la **température**.



Methode des Moments, P_N, SKn

- Méthode des Moments

$$i(x, y, z, \theta, \phi) = A_0 + \sum_{n=1}^N [\zeta^n A_{n,x} + \eta^n A_{n,y} + \mu^n A_{n,z}]$$

- Méthode SKn

$$E_m(x) \cong \sum_{n=1}^N w_n \mu_n^{m-2} e^{-x/\mu_n}$$

- Méthode des Harmoniques Sphériques P_N

$$I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l I_l^m(\mathbf{r}) (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} e^{im\psi} P_l^{|m|}(\cos \theta)$$

- Avantage :

- eq. Integro-differentielle => N +1 eq. Differentielles => plus rapide


- Inconvénients pour Moments et P_N :

- Limitées à des ordres faibles et de fortes épaisseurs optiques (P₃ > P₁)

- Complexité et temps de calculs élevés pour les ordres élevés

- Inconvénients communs

- Choix des conditions aux limites



Méthode pour les milieux optiquement épais

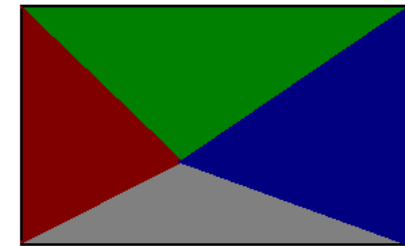
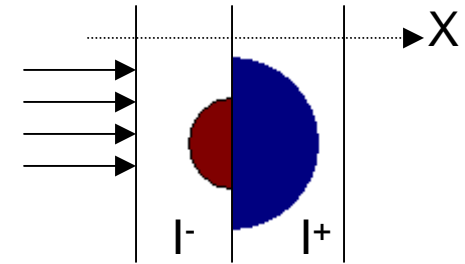
- Milne-Eddington, P1 (Approximation Différentielle, DA)
 - Avantages :
 - transforme une eq. Integro-differentielle en une eq. de diffusion
 - rapide, traite les géométries complexes
 - Inconvénients :
 - luminance supposée isotrope
 - ne fonctionne pas à faible épaisseur optique, et proche des frontières
- Méthode de Rosseland

$$\mathbf{q} = - \frac{16n^2\sigma T^3}{3\beta_R} \nabla T$$



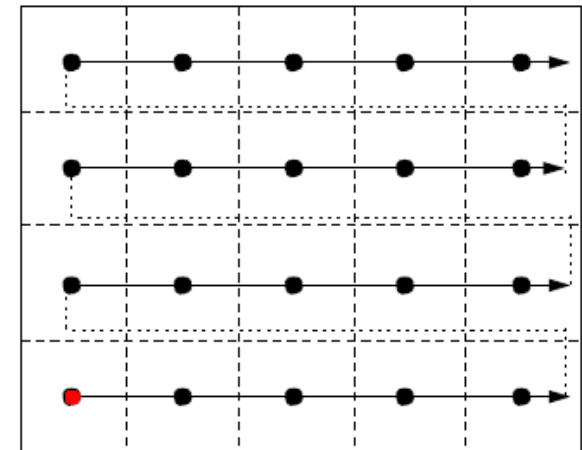
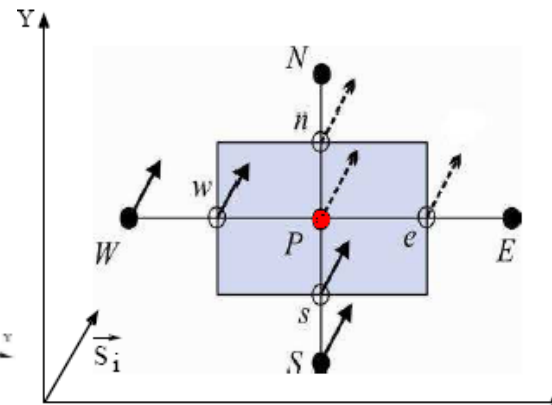
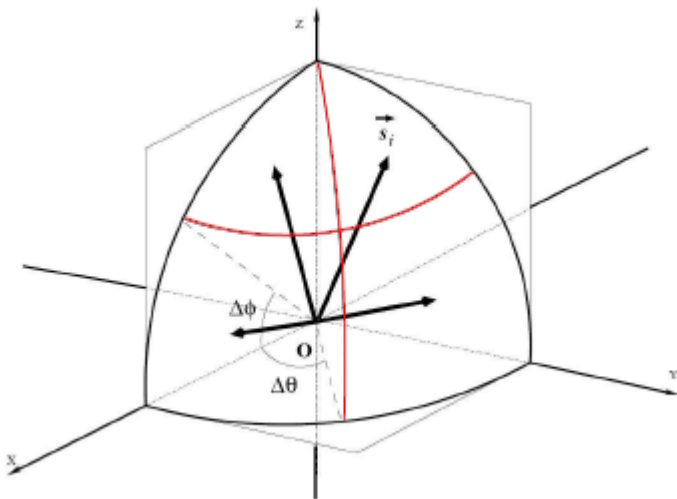
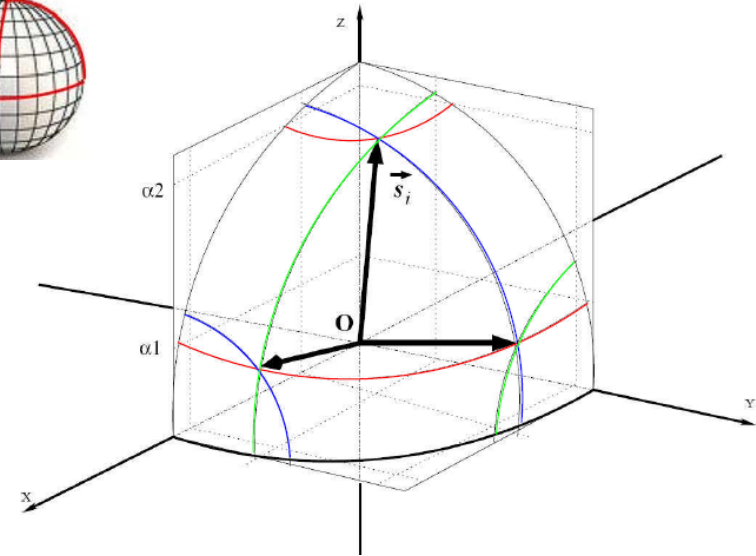
Méthode des Flux Multiples

- 2 Flux (1D):
 - rapide,
 - mais forte hypothèse sur la direction de propagation du rayonnement.
- 4 Flux (2D) et 6 Flux (3D),
 - rapide,
 - mais les flux perpendiculaires (axial, radial) ne sont pas couplés (irréaliste)



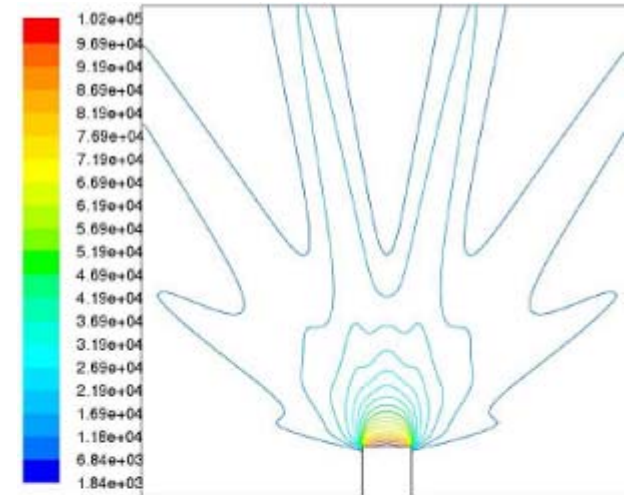
Méthodes aux Ordonnées Discrètes

- Ordonnées discrètes
 - Intégration angulaire par **quadratures numériques**
 - Intégration spatiale par :
 - différences finies (FDM-DOM)
 - Volumes finis (FVM)

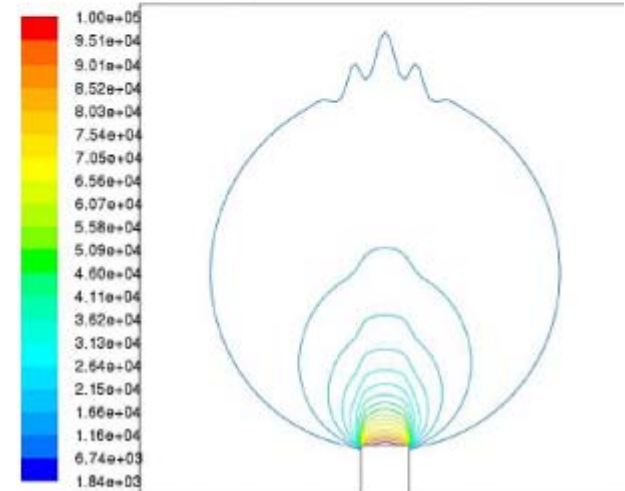


Méthodes aux Ordonnées Discrètes

- Avantages :
 - Traite les géométries complexes 3D,
 - Compatibilité avec les codes CFD
- Inconvénients :
 - Effet de rayon important pour:
 - Une émission localisée
 - Et lorsque la diffusion est plus faible que l'absorption
 - Temps de calcul et mémoire élevés ($> P_N$, Zones)
 - Mauvaise convergence pour des albédos ou épaisseurs optiques forts



$$N_{\theta} * N_{\phi} = 4 * 4$$



$$N_{\theta} * N_{\phi} = 20 * 20$$

Méthode des Transferts Discrets

- Transferts Discrets (DTM) :

- Pour chaque volume et surface élémentaires, le flux radiatif est calculé par une quadrature angulaire,

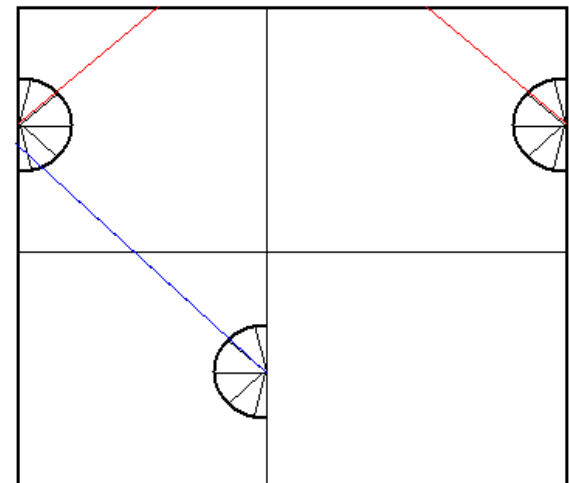
$$q^- = \sum i_w^-(\theta, \phi) \cos \theta \sin \theta \Delta \theta \Delta \phi$$

- La luminance incidente est obtenue en suivant le rayon jusqu'à la paroi, puis on comptabilise en sens inverse l'émission et l'absorption :

$$i_{n+1} = i_n \exp(-\kappa \Delta s) + \frac{\kappa \sigma T_c^4}{\pi} (1 - \exp(-\kappa \Delta s)).$$

- La résolution est itérative dans le cas de parois non noires

$$q_+ = (1 - \varepsilon)q_- + \varepsilon E_s$$



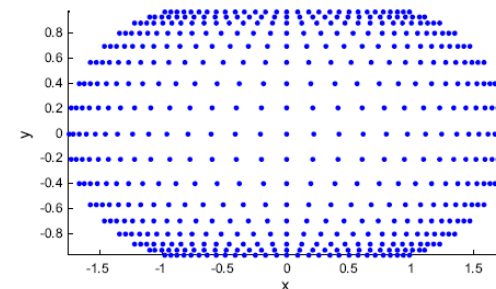
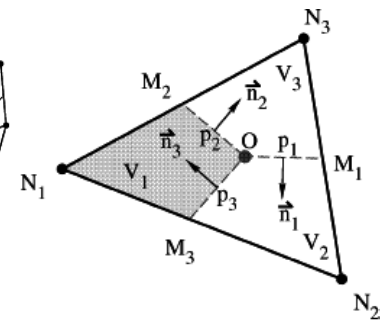
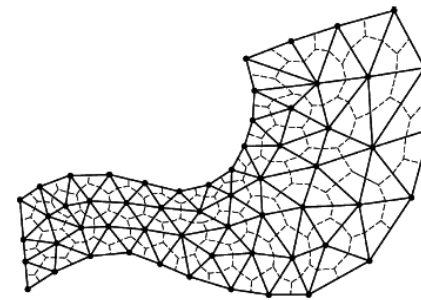
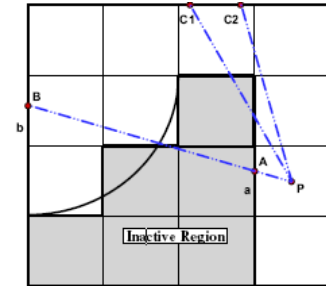
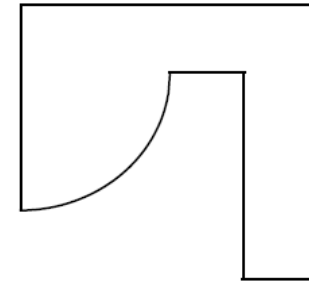


Méthode des Transferts Discrets

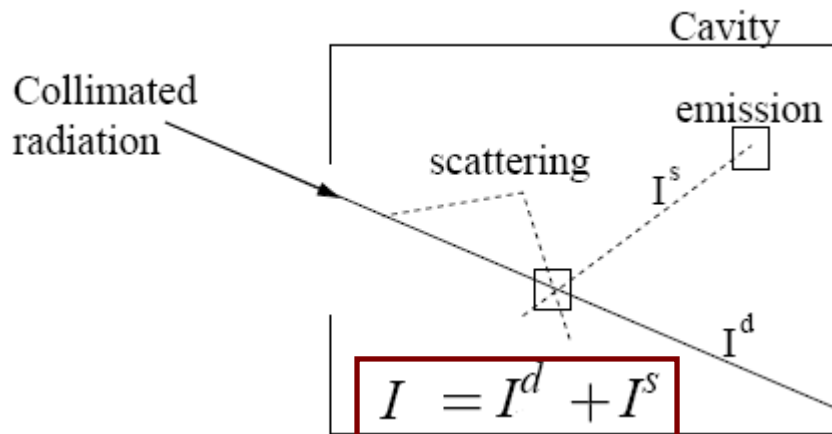
- **Avantages :**
 - traite les géométries complexes
 - donne de bon résultats en milieux purement absorbant
- **Inconvénients :**
 - non conservative, sujet à l'effet de rayon (DOM)
 - nécessite des itérations pour des parois non noires et un milieu diffusant
 - mauvais résultats pour des milieux diffusants
 - temps de calcul élevé

Géométries Complexes

- Méthode Block-off
 - Demande de raffiner le maillage proche des parois courbes
- Méthodes des Éléments Finis
 - FEM, FEDOM, CVFEM, DG FEM etc.
- Méthodes Meshless
 - MLPG, LSCM etc.



Astuces : MDOM & MDA



$$\vec{s}_i \cdot \vec{\nabla} I^d = -\beta I^d$$

$$I^d = I_0^d \exp \left[-\beta |\vec{r} - \vec{r}_w| \right]$$

$$\vec{s}_i \cdot \vec{\nabla} I^s = -\beta I^s + S^s$$

$$S^s = \kappa_a I_b + \kappa_s \int_{4\pi} \left(I^d + I^s \right) P(\vec{r}, \vec{s}_j \rightarrow \vec{s}_i) d\Omega_j$$

$$S^s = \kappa_a I_b + \kappa_s \int_{4\pi} I^s P(\vec{r}, \vec{s}_j \rightarrow \vec{s}_i) d\Omega_j$$

$$+ \kappa_s \int_{A_w} I_0^d \exp[-\beta_v |\vec{r} - \vec{r}_w|] P(\vec{r}, \vec{s}_j \rightarrow \vec{s}_i) \frac{\vec{n}_w \cdot \vec{s}_i}{\|\vec{r} - \vec{r}_w\|^2} dA_w$$



Conclusion

- Orientation du choix d'un modèle :
 - en fonction des caractéristiques du problème radiatif à traiter :
 - Géométrie complexe
 - Épaisseur optique
 - Diffusion anisotrope
 - etc. (rapidité)