

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

**THÈSE
PRÉSENTÉE À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI
COMME EXIGENCE PARTIELLE
AU DOCTORAT EN INGÉNIERIE**

**PAR
VINCENT GOUTIÈRE**

***COMPARAISON ET ÉVALUATION DE
MODÈLES DE GAZ RÉELS EN RAYONNEMENT
THERMIQUE.***

AOÛT 2000



Mise en garde/Advice

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

Directeur de Thèse: André CHARETTE

Co-directeur: László KISS

Soutenue le 15 mars 2001

Membres du Jury

M.	M. PAQUET	Professeur à l'UQAC, Chicoutimi	Président
MM.	A. CHARETTE	Professeur à l'UQAC, Chicoutimi	Examinateur
	L. KISS	Professeur à l'UQAC, Chicoutimi	Examinateur
	D. ROUSSE	Professeur à l'université Laval, Québec	Examinateur
	J. F. SACADURA	Professeur à l'INSA de Lyon (France)	Examinateur
M.	J. F. MOREAU	Doyen des Études de Cycles Supérieurs et de la Recherche à l'UQAC, Chicoutimi	

*Ce n'est pas une science, c'est
l'harmonie des sciences qui fait la
lumière.*

Bacon (1561-1626)

RÉSUMÉ

Différentes modélisations de gaz réels ont été développées depuis quelques décennies afin de quantifier efficacement le transfert de chaleur par rayonnement dans une enceinte de combustion. Cependant, chacune de ces méthodes possède sa propre formulation (coefficient d'absorption ou transmissivité moyenne) et conduit à différents degrés de précision qui dépendent des caractéristiques de l'enceinte considérée, telles que la distribution en température et en fraction molaire, la nature du gaz, les dimensions de l'enceinte et l'émissivité aux parois. Par ailleurs, chaque modèle nécessite un temps de calcul qui lui est propre et qui varie de façon conséquente d'une méthode à l'autre.

Des études monodimensionnelles et bidimensionnelles pour des géométries complexes sont présentées dans cette thèse et permettent de comparer les performances, pour ces différentes caractéristiques, de modèles actuels formulés en coefficients d'absorption, qui sont les méthodes CK, SNB-CK, SLW et SPGG, ainsi que celles de nouvelles modèles, qui sont des variantes de la méthode SNB-CK utilisant des regroupements uniformes ou sélectifs des bandes étroites de nombre d'ondes. Ces modèles sont, par ailleurs, couplés avec la méthode aux ordonnées discrètes pour la résolution de l'équation de transfert radiatif.

La variante utilisant le regroupement sélectif basé sur les bandes d'émission primaires du CO₂ est particulièrement intéressante et permet un très bon compromis entre la précision des résultats obtenus et le temps de calcul.

REMERCIEMENTS

La réalisation de cette thèse est grandement redevable à plusieurs personnes pour leurs apports scientifiques. Je tiens ainsi à remercier Messieurs Jean Taine, Anouar Soufiani et Rodolphe Vaillon pour les ouvrages qu'ils m'ont transmis et qui m'ont servi tout au long de mon travail. Je voudrais aussi exprimer ma gratitude à Monsieur Mohamed Sakami pour les conseils et les renseignements qu'il m'a prodigués durant trois années, ainsi qu'à Monsieur Fengshan Liu pour sa précieuse collaboration et sa confiance.

J'exprime mes remerciements à Messieurs Jean François Sacadura et Daniel Rousse d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

Je remercie Monsieur Rung Tien Bui pour son apport financier par le biais de la Chaire industrielle CRSNG-UQAC-ALCAN.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Messieurs László Kiss (codirecteur) et André Charette (directeur) pour leur encadrement lors de la réalisation de cette thèse, et pour leurs conseils et leur soutien lors de mes autres travaux au sein de l'Université.

Il me tient aussi à cœur de saluer l'amitié, qui est un transfert de chaleur (et surtout une source) à la fois plus simple et plus complexe que le rayonnement, mais que je ne désirerais pas voir mis en équation. Je laisserais dans l'anonymat mes collaborateurs, mais je pense qu'ils vont pouvoir se reconnaître : le Marseillais, Azatoth, Tit-Dent, Little Orignal, le P'tit Gros, Casanova, Brutus, les Jeunes Mariés, Patou (bon courage pour cette année), M. CA, Pitchoulette, Sylvanovich, Zaza ... Je salue aussi Gilles, Karen, Pierre et leur petites familles pour leur gentillesse et leur attention; et je ne pourrais omettre les judokas du Cégep sans encourir de cruelles représailles. Mes pensées volent enfin vers ma lointaine famille, qui, bien que parfois chagrinée par l'éloignement, ne peut s'empêcher de sourire à l'écoute de mon accent naissant.

Merci enfin à tous ceux que je n'ai pu citer et qui m'ont aidé au cours de cette recherche.

TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ	iii
REMERCIEMENTS	iv
TABLE DES MATIÈRES	v
LISTE DES SYMBOLES	ix
LISTE DES FIGURES	xv
LISTE DES TABLEAUX	xxviii
INTRODUCTION	30
CHAPITRE 1: LE TRANSFERT DE CHALEUR PAR RAYONNEMENT	35
1.1 Le transfert de chaleur par rayonnement	36
1.1.1 Les interactions molécule-photon	37
1.1.1.1 L'émission	38
1.1.1.2 L'absorption	40
1.1.1.3 La dispersion	40
1.1.1.4 Conclusion	41
1.1.2 Les transitions énergétiques	42
1.1.2.1 Mécanismes	42
1.1.2.2 Conclusion	46
1.2 L'équation de transfert radiatif	47
1.3 Résolution spatiale de l'équation de transfert radiatif	48
1.3.1 Hypothèse de gaz gris	49
1.3.2 Méthodes de référence	49
1.3.2.1 La méthode de Monte Carlo	50
1.3.2.2 La méthode de Zones	51
1.4 Les méthodes aux ordonnées discrètes (MOD)	51

1.4.1 Principe de la méthode	52
1.4.2 Choix des directions et de leur facteur de pondération	52
1.4.2.1 Les lois de symétries	53
1.4.2.2 Le choix des directions et de leur poids	53
1.4.3 Résolution de l'ETR à l'aide des méthodes aux ordonnées discrètes	56
1.4.3.1 Géométrie monodimensionnelle	56
1.4.3.2 Géométrie bidimensionnelle	60
1.4.3.2.1 Géométrie bidimensionnelle simple	61
1.4.3.2.2 Géométrie bidimensionnelle complexe	65
1.4.4 Conclusion	74
CHAPITRE 2: LA MODÉLISATION DES GAZ RÉELS	75
2.1 Introduction	75
2.2 Une méthode de référence: le modèle raie par raie	75
2.2.1 Les profils de raie et leur demi-largeur	76
2.2.1.1 Elargissement naturel	76
2.2.1.2 Elargissement collisionnel	77
2.2.1.3 Elargissement Doppler	77
2.2.2 Intensité d'une raie isolée	79
2.2.3 Calcul du coefficient d'absorption	80
2.3 Les méthodes approchées	81
2.3.1 Les modèles à bandes étroites	81
2.3.1.1 Les modèles statistiques à bandes étroites (SNB)	83
2.3.1.2 Le modèle de distribution cumulée du coefficient	
d'absorption (CK)	86
2.3.1.2.1 Description de la méthode	86
2.3.1.2.2 Calcul de la fonction de distribution cumulée de k	91
2.3.1.2.3 Versions de la méthode CK étudiées	93
2.3.1.2.4 Résolution de l'ETR à l'aide de la méthode CK	99

2.3.1.2.5 Conclusion	104
2.3.2 Les modèles globaux	105
2.3.2.1 La somme pondérée de gaz gris (SPGG)	105
2.3.2.1.1 La méthode de Zone	105
2.3.2.1.2 Interprétation et obtention des coefficients de pondération et d'absorption	111
2.3.2.1.3 Le modèle SPGG et l'équation de transfert	116
2.3.2.1.4 Limitation de la méthode	120
2.3.2.2 Le modèle SLW	121
2.3.2.2.1 Présentation de la méthode	121
2.3.2.2.2 Le calcul du coefficient de pondération	124
2.3.2.2.3 Application de la méthode SLW pour un milieu anisotherme hétérogène	126
2.3.2.2.4 Le modèle SLW et l'équation de transfert	134
2.3.2.2.5 Conclusion	135
CHAPITRE 3: COMPARAISONS MONODIMENSIONNELLES	136
3.1 Introduction	136
3.2 Validation des codes numériques propres aux méthodes SNB-CK, CK, SLW et SPGG	138
3.3 Variantes de la méthode SNB-CK	146
3.3.1 Introduction	146
3.3.2 Les variantes à regroupement uniforme SNB-CK M	146
3.3.3 La variante SNB-CK OPT	148
3.3.4 Tests sur l'ordre de la quadrature	150
3.3.5 Comparaison des efficacités respectives des différents regroupements	158
3.3.6 Influence de la technique de résolution de l'ETR	169
3.3.7 Conclusion	172

3.4 Comparaisons monodimensionnelles des modèles de gaz réels retenus	172	
3.4.1 Comparaisons monodimensionnelles avec le CO ₂	174	
3.4.2 Comparaisons monodimensionnelles avec le H ₂ O	190	
3.4.3 Comparaisons monodimensionnelles avec un mélange	204	
3.4.4 Conclusion	217	
CHAPITRE 4: COMPARAISONS BIDIMENSIONNELLES	220	
4.1 Introduction	220	
4.2 Validation du code 2D relatif à la méthode de référence (SNB-CK 1-7)	221	
4.3 Comparaisons bidimensionnelles	226	
4.3.1 Comparaison sur la précision des résultats	227	
4.3.1.1 Comparaison des résultats avec des parois noires	229	
4.3.1.2 Influence de l'émissivité des parois sur la précision des résultats	244	
4.3.1.3 Conclusion	245	
4.3.2 Comparaison des temps de calculs	252	
4.3.2.1 Comparaison des temps de calculs pour une enceinte à parois noires	253	
4.3.2.2 Influences de l'émissivité des parois sur le temps de calcul	256	
4.3.2.3 Conclusion	259	
CONCLUSION	261	
BIBLIOGRAPHIE	265	
APPENDICE A	Propriétés des coefficients d'Einstein - Établissement de l'ETR pour une transition	272
APPENDICE B	Quadrature de Gauss-Legendre	275
APPENDICE C	Maillage non uniforme 1D à 20 et 30 cellules	277
APPENDICE D	Comparaisons monodimensionnelles	278

LISTE DES SYMBOLES

Abréviations

CK	modèle de distribution Cumulée du coefficient d'absorption K
ETR	Équation de Transfert Radiatif
EWB	modèle exponentiel à bandes larges - Exponentiel Wide Bands
IR	Infra Rouge
LBL	méthode raie par raie - Line By Line
MC	méthode de Monte Carlo
MOD	Méthode des Ordonnées Discrètes
NA	Non Applicable
RT	Lancer de rayons - Ray Tracing
SPGG	Somme Pondérée de Gaz Gris - Weighted-sum-of-gray-gases model
SLW	Spectral Line-baseb Weighted-sum-of-gray-gases model
SNB-CK	méthode hybride utilisant les méthodes SNB et CK
SNB	modèle statistique à bandes étroites - Statistical Narrow Band model
UV	Ultra Violet

Symboles latins

$a_{e,i}(T)$	coefficient de pondération pour le $i^{\text{ième}}$ gaz gris (SPGG)
$a_i(s)$	coefficient de pondération pour la $i^{\text{ième}}$ section d'absorption (SLW)
A_{12}, A_{21}, B_{12}	coefficients d'Einstein
$b_{lmn}, c_{lmn}, d_{lmn}$	coefficients introduits pour la méthode SLW
$C (C_o)$	célérité molaire des ondes électromagnétiques (vide) m s^{-1}
$C_{abs,i}$	section d'absorption $\text{m}^2 \text{ mol}^{-1}$

$\operatorname{div} q$	divergence du flux	W m^{-3}
d	diamètre	m
d	longueur	m
E_1, E_2	états énergétiques	J
E_s, E_g	émittance	W m^{-3}
$F(\nu \cdot \nu_r)$	profil de raie	
$f(k)$	fonction de distribution du coefficient d'absorption	
\overline{G}	fonction moyennée sur une bande spectrale	
$\overline{G_i S_j}, \overline{G_i G_j}$	aires d'échange total pour un gaz gris	m^2
$\overrightarrow{G_i S_j}, \overrightarrow{G_i G_j}$	aires d'échange total pour un gaz réel	m^2
$g(k)$	fonction de distribution cumulée du coefficient d'absorption	
g_1, g_2	fonctions de dégénérescence	
k	conductivité thermique	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
k	constante de Boltzmann	J K^{-1}
$k(s)$	coefficient d'absorption à l'abscisse s	m^{-1}
h	constante de Planck	J s
h	coefficient de convection	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
$I_\nu(T)$	intensité radiative monochromatique	$\text{W m}^{-3} \text{sr}^{-1}$
$I(T)$	intensité radiative totale	$\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1}$
L	longueur caractéristique (SNB)	m
$l_{i,k}$	longueur du $k^{\text{ième}}$ côté de la $i^{\text{ième}}$ cellule	m
M	nombre de directions angulaires	
M	nombre de bandes regroupées ensemble	
n	nombre de gaz gris	
N	ordre d'une quadrature angulaire (S_N, T_N)	
N	nombre de points d'une quadrature numérique de Gauss	
N	nombre de résolutions de l'ETR	
N_1, N_2	nombre de particules dans les états E_1, E_2	

$N(s)$	densité molaire locale	mol m^{-3}
N_{bandes}	nombre totale de bandes (intervalles de nombre d'ondes)	
P	point d'une paroi	
p	pression	atm ou bar
$P(S_r)$	loi de distribution d'intensité de raies	
q	flux pariétal	W m^{-2}
$r(x,y)$	distance	m
R	rayon	m
s	abscisse spatiale	
$S(s, \vec{\Omega})$	terme source radiatif	$\text{W m}^{-2} \text{ sr}^{-1}$
S_i	surface de la $i^{\text{ème}}$ cellule	m^2
S_r	intensité d'une raie	eV m^{-1}
$\overline{S_i G_j}$	aire d'échange total pour un gaz gris	m^2
$\overrightarrow{S_i G_j}$	aire d'échange total pour un gaz réel	m^2
t	temps	s
T	température	K
$x, X(s)$	fractions molaire	

Symboles grecs

α	angle	radians
α	absorptivité	
$\beta(s)$	coefficient d'extinction	m^{-1}
δ	espacement moyen entre deux raies	m
$\Delta\nu$	intervalle de nombre d'onde	m^{-1}
$\Delta x, \Delta y$	largeur, hauteur d'une cellule	m
$d\Omega$	angle solide élémentaire	Sr
$d\Sigma$	élément de surface	m^2
ε	émissivité	

$\varphi_{i,k,m}$	produit scalaire $\vec{\Omega}_m \bullet \vec{n}_{i,k}$	
$\phi(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}_m)$	fonction de phase	
γ	angle	radians
κ	coefficient d'absorption	$m^{-1} atm^{-1}$
λ	longueur d'onde	μm
(μ, η, ξ)	cosinus directeurs	
ν	nombre d'onde	m^{-1}
θ	angle	radians
ρ	facteur d'interpolation	
$\sigma(s)$	coefficient de dispersion	m^{-1}
σ	intensité moyenne (SNB)	
$\bar{\tau}_{\Delta\nu}$	transmissivité moyenne	
τ	épaisseur optique	
$\alpha(s)$	albédo	
ω_m	poids associé à la $m^{\text{ième}}$ direction	
$\tilde{\omega}_m$	poids associé à la $m^{\text{ième}}$ point de la quadrature numérique	

Vecteurs

\vec{n}	normale extérieure à une paroi
$\vec{n}_{i,k}$	normale extérieure du $k^{\text{ième}}$ côté de la $i^{\text{ième}}$ cellule
$\vec{\Omega}$	direction de propagation du rayonnement

Indices inférieurs

b	terme source
c	conductif
c	CO_2
cv	convectif

<i>d</i>	point de départ
<i>D</i>	Doppler
<i>E, W, S, N</i>	Est, Ouest, Sud, Nord
<i>e</i>	transition électronique
<i>f</i>	point final
<i>g</i>	cellule gazeuse
<i>h</i>	H_2O
<i>i</i>	indice d'une cellule monodimensionnelle
<i>i</i>	indice selon l'axe x d'une cellule rectangulaire
<i>i</i>	indice d'une cellule triangulaire (CK)
<i>i</i>	indice du <i>gaz gris</i> (SPGG)
<i>i</i>	indice d'une section d'absorption (SLW)
<i>i</i>	indice d'un élément surfacique ou volumique (Zone)
<i>j</i>	indice d'une cellule triangulaire (SPGG)
<i>j</i>	indice d'un intervalle de nombre d'onde
<i>j</i>	indice d'un élément surfacique ou volumique (Zone)
<i>k</i>	indice du numéro du côté d'une cellule triangulaire
<i>L</i>	Lorentz
<i>m</i>	direction angulaire
<i>m</i>	valeur moyenne
<i>mél</i>	mélange
<i>p</i>	centre d'une bande de nombre d'onde
<i>p</i>	indice pour la quadrature numérique
<i>p</i>	pression partielle
<i>q</i>	indice pour la quadrature numérique
<i>r</i>	rayonnement
<i>r</i>	raie
<i>r</i>	transition rotationnelle
<i>s</i>	surfacique

<i>st</i>	stéradian
<i>v</i>	transition vibrationnelle
<i>v</i>	monochromatique
Δv	relatif à une bande de nombre d'onde

Indices supérieurs

°	corps noir
<i>M</i>	nombre de bandes étroites regroupées
+	dans la direction positive
-	dans la direction négative
*	valeurs tabulées

LISTE DES FIGURES

CHAPITRE 1: LE TRANSFERT DE CHALEUR PAR RAYONNEMENT

<u>Figure 1.1:</u> Rayonnement monochromatique directionnel émis d'un élément de surface s_1 .	37
<u>Figure 1.2:</u> Schématisation de l'émission spontanée.	38
<u>Figure 1.3:</u> Schématisation de l'émission induite.	39
<u>Figure 1.4:</u> Schématisation de l'absorption spontanée.	40
<u>Figure 1.5:</u> Schématisation de la dispersion.	41
<u>Figure 1.6:</u> Évolution de la fonction de Planck en fonction de la longueur d'onde et de la température.	44
<u>Figure 1.7:</u> Variation du coefficient d'absorption de la vapeur d'eau à 1 000K, 1 bar pour l'intervalle de nombre d'onde [660; 670].	46
<u>Figure 1.8:</u> Schématisation des transformations apparaissant au cours de la propagation du rayonnement.	48
<u>Figure 1.9:</u> Discrétisation T_3 sur le premier octant.	55
<u>Figure 1.10:</u> Schématisation du milieu monodimensionnel.	57
<u>Figure 1.11:</u> Relation entre deux intensités directionnelles consécutives.	60
<u>Figure 1.12:</u> Discrétisation pour une géométrie simple bidimensionnelle.	61
<u>Figure 1.13:</u> Propagation des informations dans le cas d'une géométrie simple.	64
<u>Figure 1.14:</u> Exemple de maillage triangulaire non structuré.	66

Figure 1.15: Obtention de l'intensité latérale inconnue du côté 1 à partir de celles des deux autres côtés.	69
Figure 1.16: Illustration des six cas possibles pour le calcul des intensités latérales inconnues.	70
Figure 1.17: Renumérotation des cellules relative à la $m^{\text{ième}}$ direction.	72
CHAPITRE 2: LA MODÉLISATION DES GAZ RÉELS	
Figure 2.1: Profil de Lorentz d'une raie.	77
Figure 2.2: Profil Doppler d'une raie isolée.	78
Figure 2.3: Modèle d'Elsasser.	83
Figure 2.4: Modèle statistique aléatoire.	84
Figure 2.5: Transformation du spectre en utilisant la fonction de distribution du coefficient d'absorption $f_{\Delta\nu}(k)$.	87
Figure 2.6: Construction schématique de la fonction de distribution cumulée.	90
Figure 2.7: Fonction de distribution cumulée de k pour la vapeur d'eau à 300K.	90
Figure 2.8: Regroupement de M bandes étroites identiques en une large bande.	96
Figure 2.9: Évolution du pseudo nombre d'onde en fonction du coefficient d'absorption.	98
Figure 2.10: Découpage partiel du domaine en zones volumiques et surfaciques.	106
Figure 2.11: Approximation d'un spectre réel par la somme de deux gaz gris.	111
Figure 2.12: Obtention graphique des coefficients de la somme pondérée.	115
Figure 2.13: Coefficients de pondération pour une somme de deux gaz gris et d'un gaz transparent pour un fuel de pétrole.	115
Figure 2.14: Subdivision du spectre en sous intervalles associés aux différentes valeurs du coefficient d'absorption.	121

Figure 2.15: Représentation graphique de la fonction de distribution $F_i(s)$ sur un intervalle du domaine de nombre d'onde.	125
Figure 2.16: Représentation graphique du coefficient de pondération sur un intervalle de nombre d'onde.	126
Figure 2.17: Profils parabolique et cosinusoïdal de température entre deux plaques planes	127
Figure 2.18: Illustration d'un spectre idéal.	133
CHAPITRE 3: COMPARAISONS MONODIMENSIONNELLES	
Figure 3.1: Cas 1, évolution de la valeur de la divergence du flux pariétal pour un milieu isotherme (1 000 K) et homogène (100%) de H ₂ O, valeur du flux pariétal en x=0.	140
Figure 3.2: Cas 2, évolution de la valeur de la divergence du flux pariétal pour un milieu anisotherme (cosinusoïdal) et homogène (10%) de H ₂ O, valeur du flux pariétal en x=2.	140
Figure 3.3: Cas 3, évolution de la valeur de la divergence du flux pariétal pour un milieu isotherme (1000 K) et inhomogène (parabolique) de H ₂ O, valeur du flux pariétal en x=0.	141
Figure 3.4: Cas 4, évolution de la valeur du flux pariétal en fonction de la distance entre les plaques parallèles, pour un milieu anisotherme (parabolique) et homogène (10%) de H ₂ O.	141
Figure 3.5: Cas 5, évolution de la valeur de la divergence du flux pariétal pour un milieu isotherme (1000 K) et homogène (20%) de CO ₂ , valeur du flux pariétal en x=0.1.	142
Figure 3.6: Cas 6, évolution de la valeur de la divergence du flux pariétal pour un milieu anisotherme (cosinusoïdal) et homogène (30%) de CO ₂ , valeur du flux pariétal en x=0,2.	142
Figure 3.7: Cas 7, évolution de la valeur de la divergence du flux pariétal pour un milieu isotherme (1 250 K) et homogène (20% - 40%) de CO ₂ et de H ₂ O. Le flux pariétal est calculé en x=0.	143
Figure 3.8: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 500 K) et homogène (20%) de vapeur d'eau (Cas 1), valeur du flux pariétal en x=0.	152

Figure 3.9: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1500 K) et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 2), valeur du flux pariétal en x=0.	152
Figure 3.10: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 800 K) et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 3), valeur du flux pariétal en x=0.	153
Figure 3.11: Évolution de la divergence du flux pour un milieu anisotherme (cosinusoidal) et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 4), valeur du flux pariétal en x=0.	153
Figure 3.12: Évolution de la divergence du flux pour un milieu parabolique et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 5), valeur du flux pariétal en x=0.	154
Figure 3.13: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 600 K) et inhomogène (parabolique) de vapeur d'eau (Cas 6), valeur du flux pariétal en x=0.	154
Figures 3.14. Cas 1, milieu isotherme (1 500 K), homogène (20%), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.	163
Figures 3.15. Cas 2, milieu isotherme (1 500 K), homogène (10%), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.	164
Figures 3.16. Cas 3, milieu isotherme (1 800 K), homogène (10%), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.	165
Figures 3.17: Cas 4, milieu anisotherme (cosinusoidal), homogène (20%), parois grises. (a) Évolution des divergences du flux trouvées avec les méthodes SNB-CK 1-20, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK	

OPT 5, SNB-CK OPT 7. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les différentes variantes et la méthode SNB-CK 1-20, pour x compris entre 0 et 20 cm (paroi chaude). (c) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les différentes variantes et la méthode SNB-CK 1-20, pour x compris entre 40 et 70 cm (paroi froide).

166

Figures 3.18: Cas 5, milieu anisotherme (parabolique), homogène (20%), parois noires maintenues à 300K. (a) Évolution des divergences du flux trouvées avec les méthodes SNB-CK 1-20, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT -7. (b) et (c) Agrandissement de ces évolutions sur deux zones, l'une pariétale, l'autre centrale. (d) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT-5, SNB-CK OPT-7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (e) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.

168

Figures 3.19. Cas 6, milieu isotherme (1 600 K), inhomogène (parabolique), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.

169

Figure 3.20: Comparaison des deux techniques de résolution de l'ETR avec la méthode SNB-CK 1-20 et pour un milieu isotherme (1800 K) et homogène (10%)

171

Figure 3.21: Comparaison des deux techniques de résolution de l'ETR avec les différents regroupements uniformes et spécifique de la méthode SNBCK et pour un milieu isotherme (1800 K) et homogène (10%)

171

Figure 3.22: Évolutions des écarts relatifs de la méthode SNB-CK OPT pour un milieu isotherme homogène (10% de CO₂) en fonction de la température.

175

Figure 3.23: Variation des divergences du flux calculées avec les méthodes CK, SNB-CK 1 et SNB-CK OPT pour un milieu isotherme à 1 300K et homogène (10% CO₂) en fonction de l'épaisseur d de l'enceinte.

176

Figure 3.24: Évolutions des écarts relatifs de la méthode SNB-CK 10 pour un milieu homogène (10% de CO₂) en fonction de la température. Trois courbes correspondent aux milieux homogènes et isothermes à 1 000K, 1 300K et 1 800K,

deux autres aux milieux hétérogènes (distribution parabolique, de fraction molaire maximale $x_m=10\%$) et isothermes c1300K et c1800K, et la dernière au milieu homogène (10% de CO₂) et anisotherme (distribution parabolique, T_m=1 267K) p1500K.

177

Figure 3.25: Valeurs des écarts relatifs obtenus avec les méthodes SNB-CK 10, SNB-CK 20 et SNB-CK OPT en fonction de l'épaisseur optique (obtenue pour trois fractions massiques 5%, 10% et 20%) pour un milieu homogène isotherme à 1 300K.

179

Figure 3.26: Valeurs des écarts relatifs obtenus avec les méthodes CK, SPGG et SLW en fonction de l'épaisseur optique (obtenue pour trois fractions massiques 5%, 10% et 20%) pour un milieu homogène isotherme à 1 300K.

180

Figure 3.27: Variation en fonction de la température des écarts relatifs de la divergence du flux calculée avec la méthode SNB-CK OPT pour une enceinte contenant 4% de CO₂ et ayant 0,4 m d'épaisseur .

182

Figure 3.28: Évolution des écarts relatifs propres à chaque méthode, pour une même épaisseur optique de 0,032 m.atm pour deux distances interplaques différentes: 0,4 m (trait plein) et 1,6 m (trait pointillé). a) Avec les méthodes hybrides SNB-CK OPT, SNB-CK 10 et SNB-CK 20. b) Avec les méthodes CK, SLW et SPGG.

182

Figure 3.29: Amplitude maximale des variations de l'écart relatif pour la méthode SNB-CK 20, les écarts sont de 25% à x=0.75 m et de -13% à x=0.2 m.

184

Figure 3.30: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne précision et de préférences pour le calcul du flux pariétal. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquels les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.

188

Figure 3.31: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne précision et de préférences pour le calcul de la divergence du flux. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent

les valeurs des paramètres pour lesquels les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.	189
Figure 3.32: Influence de la température sur la valeur des écarts relatifs maximums propres à la méthode SNB-CK 20 pour 5% de H ₂ O.	191
Figure 3.33: Influence de la valeur de la fraction molaire de H ₂ O sur l'évolution des écarts relatifs de la méthode SNB-CK 20 pour deux milieux isothermes homogènes, l'un maintenu à 1 000K l'autre à 1 800K.	191
Figure 3.34: Variation des écarts relatifs pour les méthodes hybrides, pour un milieu homogène et isotherme (1 300 K) en fonction de la longueur optique et de la fraction molaire.	192
Figure 3.35: Variation des écarts relatifs des méthodes SPGG (Pierrot) et SNB-CK OPT lors d'une augmentation de la fraction molaire pour un milieu homogène isotherme à 1 800K.	194
Figure 3.36: Variation des écarts relatifs au niveau des parois propre à la méthode CK pour deux milieux isothermes à 1 300K de même fraction molaire maximale de 10%, mais dont l'un est homogène (1300K) et dont l'autre est hétérogène (c1300 K).	195
Figure 3.37: Variation des écarts relatifs propres à la méthode SLW pour deux milieux homogènes (10% de CO ₂) et isothermes, l'un à 1 000 K, et l'autre à 1 800 K.	197
Figure 3.38: Influence de la distribution des fractions molaires (homogène ou parabolique) pour un milieu isotherme à 1 300K. La courbe en trait plein correspond au cas homogène avec une concentration de 5% (cas défavorable, Cf. planche 28b), celle en pointillée au cas hétérogène avec une concentration maximale de 50% (cas défavorable, Cf. planche 32b).	198
Figure 3.39: Schématisation pour chacune des méthodes des zones de précision et de préférences pour le calcul du flux pariétal. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.	201

Figure 3.40: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne précision et de préférences pour le calcul de la divergence du flux. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.

203

Figure 3.41: Influence de la fraction molaire sur la valeur des écarts relatifs maximums pour les méthodes CK (trait plein) et SNB-CK OPT (trait pointillé) pour un mélange homogène et isotherme à 1 000 K.

205

Figures 3.42: Influence de la température sur la valeur des écarts relatifs maximums pour les méthodes a) CK et b) SNB-CK OPT, pour des milieux dont la concentration maximale est de 5% CO₂ et 10% H₂O. Les annotations 1000, 1300 et 1800 font références aux milieux isothermes, 1300c et 1800c aux milieux hétérogènes et 1500p au milieu anisotherme.

205

Figure 3.43: Évolutions des écarts pour un milieu hétérogène (10% CO₂ + 20% H₂O) isotherme (1 300K) pour les méthodes CK, SNB-CK OPT et SNB-CK 10.

206

Figure 3.44: Influence de la fraction molaire sur la valeur des écarts relatifs pour la méthode SNB-CK 20 selon les trois types de gaz (CO₂, H₂O ou mélange) pour un mélange homogène et isotherme à 1 000K.

207

Figure 3.45: Influence de l'épaisseur de la plaque sur les écarts relatifs du flux pour deux méthodes, SLW et SNB-CK OPT, pour un milieu homogène (10% CO₂ et 20% H₂O) et isotherme (1 800K).

208

Figure 3.46: a) Variation de la divergence du flux pour la méthode SNB-CK 1-7 et des différences sur la divergence du flux trouvées entre les méthodes SNB-CK OPT, SNB-CK 10, CK et la méthode SNB-CK 1-7; le milieu considéré est anisotherme (parabolique). b) Variation des écarts relatifs correspondant.

210

Figure 3.47: Augmentation des écarts relatifs et de l'amplitude de leur variation en fonction de l'épaisseur de la plaque, pour la méthode SLW et un milieu homogène isotherme à 1 300K.

212

Figure 3.48: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne prédiction et de préférences pour le calcul du flux pariétal. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone

où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées. NA signifie Non Applicable.

215

Figure 3.49: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne prédiction et de préférences pour le calcul de la divergence du flux .Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées. NA signifie Non Applicable.

216

CHAPITRE 4: COMPARAISONS BIDIMENSIONNELLES

Figure 4.1: Enceinte bidimensionnelle utilisée pour les validations. Le trait discontinu correspond à l'axe sur lequel sera représenté la divergence du flux. Le flux pariétal sera explicité sur les parois horizontales.

222

Figure 4.2: Champ de température anisotherme.

222

Figure 4.3: Évolution du flux pariétal sur le murs horizontaux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le CO₂.

223

Figure 4.4: Évolution de la divergence du flux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le CO₂.

224

Figure 4.5: Évolution du flux pariétal sur le murs horizontaux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le H₂O.

224

Figure 4.6: Évolution de la divergence du flux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le H₂O.

225

Figure 4.7: Évolution des écarts relatifs de la divergence du flux entre d'une part les méthodes SNB (Liu) et SNB-CK (Liu), d'autre part les méthodes SNB-CK 1-7 et SNB et enfin les méthodes SNB-CK 1-7 et SNB-CK (Liu). Le gaz considéré est le CO₂.

225

Figure 4.8: Géométrie de l'enceinte complexe.

226

Figure 4.9: a) Champ de températures utilisé pour les cas anisothermes. b) Champ de fractions molaires pour le cas hétérogènes.	228
Figure 4.10: Maillage utilisé lors des tests effectués en 2D avec le CO ₂ ou le H ₂ O (1236 cellules). Les cellules grisées désignent les axes considérés pour les comparaisons de la divergence du flux.	228
Figure 4.11: Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO ₂ .	230
Figure 4.12: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO ₂ .	231
Figure 4.13: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO ₂ .	231
Figure 4.14: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO ₂ .	232
Figure 4.15: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO ₂ .	232
Figure 4.16: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO ₂ .	233
Figure 4.17: Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H ₂ O.	234
Figure 4.18: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H ₂ O.	234
Figure 4.19: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H ₂ O.	235
Figure 4.20: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence	

- du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O. 235
- Figure 4.21:** Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O. 236
- Figure 4.22:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O. 236
- Figure 4.23:** Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 238
- Figure 4.24:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 238
- Figure 4.25:** Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 239
- Figure 4.26:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 239
- Figure 4.27:** Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 240
- Figure 4.28:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 240
- Figure 4.29:** Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 241
- Figure 4.30:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 241

- Figure 4.31:** Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 242
- Figure 4.32:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 242
- Figure 4.33:** Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO₂ et de H₂O. 243
- Figure 4.34:** Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux sur le mur 1 pour le milieu non homogène isotherme le mélange de CO₂ et de H₂O. 243
- Figure 4.35:** a) Évolution du flux pariétal avec le CO₂ et pour une émissivité $\epsilon=0,5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0,5$, $\epsilon=0,7$ et $\epsilon=1$. 246
- Figure 4.36:** a) Évolution de la divergence du flux avec le CO₂ et pour une émissivité $\epsilon=0,5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0,5$, $\epsilon=0,7$ et $\epsilon=1$. 247
- Figure 4.37:** a) Évolution du flux pariétal avec le H₂O et pour une émissivité $\epsilon=0,5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0,5$, $\epsilon=0,7$ et $\epsilon=1$. 248
- Figure 4.38:** a) Évolution de la divergence du flux avec le H₂O et pour une émissivité $\epsilon=0,5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0,5$, $\epsilon=0,7$ et $\epsilon=1$. 249
- Figure 4.39:** a) Évolution du flux pariétal avec le mélange et pour une émissivité $\epsilon=0,5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0,5$, $\epsilon=0,7$ et $\epsilon=1$. 250
- Figure 4.40:** a) Évolution de la divergence du flux avec le mélange et pour une émissivité $\epsilon=0,5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0,5$, $\epsilon=0,7$ et $\epsilon=1$. 251

Figure 4.41: Évolution du rapport des temps de calcul $\frac{T_\varepsilon}{T_{\varepsilon=1}}$ en fonction de l'émissivité et des méthodes considérées avec le dioxyde de carbone	258
Figure 4.42: Évolution du rapport des temps de calcul $\frac{T_\varepsilon}{T_{\varepsilon=1}}$ en fonction de l'émissivité et des méthodes considérées avec la vapeur d'eau	258
Figure 4.43: Variation quasi-linéaire du rapport des temps de calcul $\frac{T_\varepsilon}{T_{\varepsilon=1}}$ en fonction de l'émissivité pour les méthodes SNB-CK 20, CK et SLW avec la vapeur d'eau.	259

LISTE DES TABLEAUX

CHAPITRE 2: LA MODÉLISATION DES GAZ RÉELS

Tableau 2.1: Quadrature de Gauss-Lobatto à sept points 95

Tableau 2.2: Valeur des sections d'absorption pour n=15 128

CHAPITRE 3: COMPARAISONS MONODIMENSIONNELLES

Tableau 3.1: Cas tests utilisés pour la validation des méthodes SNB-CK 1, CK, SLW, SPGG. La distribution cosinusoidale décrite par (T_m , ΔT) est calculée comme suit: $T(x) = T_m + \frac{\Delta T}{2} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, et celle parabolique (T_0, T_1, T_0) comme suit $T(x) = 4\frac{T_1 - T_0}{L}(x - \frac{x^2}{L}) + T_0$. L correspond à la distance entre les plaques. 139

Tableau 3.2: Écart relatif (en %) entre les valeurs des flux pariétaux trouvés avec les différents modèles de gaz réels et celles trouvées par Denison. 145

Tableau 3.3: Nombre d'équations de transfert radiatif à résoudre en fonction du regroupement et de l'ordre de la quadrature considérés. 147

Tableau 3.4: Regroupement des bandes en tenant compte des bandes primaires d'émissivité du CO₂. 149

Tableau 3.5: Nombre de résolutions de l'ETR à effectuer avec la version optimisée. 150

Tableau 3.6: Cas tests utilisés pour la visualisation de l'influence des différentes quadratures. 151

Tableau 3.7: Écart relatif (en %) entre les résultats du flux pariétal fournis par les quadratures à 15, 7, 5 et 3 points et ceux fournis par la quadrature à 20 points.	157
Tableau 3.8: Écart relatif (en %) entre les résultats des divergences du flux fournis par les quadratures à 15, 7, 5 et 3 points et ceux fournis par la quadrature à 20 points.	157
Table 3.9: Écart relatif (en %) entre les résultats du flux pariétal fournis par les 12 variantes et ceux fournis par la méthode SNB-CK 1-20.	161
Tableau 3.10: Écarts relatifs (%) pour les différentes variantes de la divergence du flux.	161
CHAPITRE 4: COMPARAISONS BIDIMENSIONNELLES	
Tableau 4.1: Cas considérés pour les comparaisons de temps de calcul.	252
Tableau 4.2: Temps de calcul (en seconde) et facteurs de réduction obtenus pour les cinq cas avec les différentes méthodes. Une cellule grisée indique que pour le cas considéré, la méthode correspondante n'est pas applicable.	253
Tableau 4.3: Comparaison entre les facteurs de réduction du temps de calculs (moyenne) et du nombre de résolutions à effectuer.	255
Tableau 4.4: Influence de l'émissivité des parois sur le temps de calcul (en secondes) pour le dioxyde de carbone.	256
Tableau 4.5: Influence de l'émissivité des parois sur le temps de calcul (en secondes) pour la vapeur d'eau.	257

INTRODUCTION

Le milieu industriel est un secteur en constante mouvance. Les procédés, à leur création, possèdent des paramètres intrinsèques qui ne sont pas fixés inéluctablement mais qui risquent au contraire d'être modifiés au cours de leur utilisation afin de répondre à de nouveaux besoins. Soit par exemple un four de combustion; celui-ci sera conçu selon certaines caractéristiques (géométrie, nature des matériaux, débits des brûleurs, filtres, mélangeurs....), qui correspondent au cahier des charges initial (quantité de matière utilisée, nature de cette matière ...). Cependant, ce cahier des charges, qui reflétait les demandes d'une certaine période économique, peut être appelé à varier afin de répondre à de nouvelles normes environnementales, à de nouvelles normes de sécurité, ou enfin afin d'obtenir un meilleur rendement. Des transformations du procédé seraient alors nécessaires afin de l'adapter adéquatement. Ces modifications peuvent être réalisées par le biais de deux méthodes. La première est expérimentale et consiste à observer directement sur les procédés les effets de diverses transformations réalisées physiquement. Ces modifications présentent les désavantages d'être onéreuses (coût des transformations, immobilisation du procédé) et d'avoir des influences difficiles à prédire (complexité du procédé). La seconde méthode est mathématique; elle consiste à modéliser le procédé étudié et à prédire les effets dus aux modifications des variables du modèle. Tous les résultats obtenus étant virtuels, les

"transformations" engendrent des coûts minimes et sont relativement rapides. Une phase de validation du modèle numérique est cependant obligatoire avant de pouvoir les effectuer. Durant cette phase, un modèle réduit expérimental est souvent développé de concert. Il permet non seulement d'obtenir des résultats pouvant servir de référence au code numérique, mais aussi de visualiser les phénomènes réels.

La modélisation numérique adéquate d'un procédé industriel est assez délicate. Les procédés sont en effet de nature assez complexe et font intervenir des couplages de divers modes de transfert de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Ainsi, dans les fours de combustion, des phénomènes de turbulence (brassage), de rayonnement, de conduction et de convection sont généralement superposés à la combustion elle-même. La modélisation *idéale* de tels fours nécessiterait le couplage de modèles prenant en compte ces cinq phénomènes. Elle serait certes idéale d'un point de vue quantitatif, mais malheureusement pas d'un point de vue du temps de calcul. Et si ce dernier devient prohibitif, la modélisation ne permettra plus une étude suffisamment rapide de l'influence des divers paramètres de l'enceinte. Afin de pallier à ce problème, une pré-étude est nécessaire pour mettre en évidence l'influence relative de chacun des modes de transfert présents. Suite à cette analyse, seuls les modes principaux ou prépondérants seront conservés.

Cette étude de prépondérance s'applique en particulier aux trois modes classiques de transfert de chaleur : la conduction, la convection et le rayonnement. Elle se base sur l'analyse des expressions des densités de flux (notés q), qui sont des valeurs caractéristiques correspondant à la quantité d'énergie traversant une aire unité donnée pendant un temps

unitaire. Les expressions de ces flux sont explicitées pour un transfert unidirectionnel par les formules suivantes:

$$\begin{cases} \text{conduction} & q_c = -k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{milieu} \\ \text{convection} & q_{cv} = -k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{paroi} = h \Delta T \\ \text{rayonnement} & q_r = \varepsilon \sigma (T_i^4 - T_j^4) \end{cases}$$

Elles permettent de constater que les flux conductif et convectif sont engendrés par une différence de température (plus précisément, un gradient de température), tandis que le flux radiatif est proportionnel à la puissance quatrième de la température. Ceci permet de considérer, en première phase de calcul, le rayonnement comme mode de transfert prépondérant lorsque le milieu étudié est soumis à de hautes températures. De telles températures sont, par exemple, atteintes dans les chambres de combustion (réacteurs, fours), lors d'entrées d'aéronefs dans l'atmosphère, dans les sillages des missiles (étude de télédétection de signature infrarouge des missiles); dans de tels cas, les températures varient habituellement entre 1 000 et 2 500K.

Cependant, si une vitesse d'écoulement suffisante est imposée, ou si un puits de chaleur est créé au niveau des parois, il peut advenir que les termes convectif ou conductif ne soient pas négligeables. Il faudra alors coupler l'un ou l'autre de ces modes de transfert avec le rayonnement.

Du fait de la forte implantation des industries Alcan dans la région du Saguenay Lac St-Jean, et de l'utilisation importante par cette société de chambres de combustion, une étude approfondie des modèles radiatifs dans des enceintes contenant des gaz de

combustion (principalement de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone) a paru primordiale afin d'améliorer leurs modélisations actuelles.

La problématique inhérente à ces modèles réside dans la forte variation des caractéristiques de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone en fonction de la température, de la longueur d'onde et de la fraction molaire de ces substances dans le mélange gazeux. Cette problématique fut pendant quelques décennies contournée en recherchant des valeurs spectrales moyennes calculées en fonction de ces caractéristiques et des paramètres géométriques de l'enceinte; cette méthode fut nommée la méthode des gaz gris. A l'aide de ces valeurs moyennes, il est ensuite possible de résoudre l'équation de transfert radiatif (ETR), qui décrit la variation de l'intensité du rayonnement dans un milieu gazeux, en utilisant une méthode numérique telle que la méthode de Monte Carlo, la méthode de lancer de rayons (RT), la méthode aux ordonnées discrètes (MOD)...

OBJECTIFS

La première partie de cette thèse explicite cette problématique ainsi que la philosophie et l'utilisation de la méthode des ordonnées discrètes appliquée à un gaz gris. L'approximation des gaz gris, bien que longtemps utilisée en industrie, présente le désavantage d'être peu utilisable lorsque le milieu est fortement hétérogène en température ou en concentration (le calcul des paramètres est basé sur des valeurs moyennes) et de ne fournir que des valeurs qualitatives des flux pariétaux pour les cas homogènes. Afin d'obtenir de meilleurs résultats sur les flux d'une part et la divergence des flux d'autre part, des modélisations plus sophistiquées furent développées. De nombreuses méthodes sont actuellement disponibles dans la littérature. Les plus classiques sont le modèle raie par raie

(LBL), la méthode statistique à bandes étroites (SNB), la méthode exponentielle à larges bandes (EWB), la méthode de fonction cumulée du coefficient d'absorption (CK), une méthode hybride des modèles CK et SNB (SNB-CK), la méthode de somme pondérée de gaz gris classique (SPGG ou WSGG) et la méthode de somme pondérée de gaz gris basée sur les lignes spectrales (SLW). Chacune de ces méthodes ayant été développée dans une optique particulière, elles se distinguent les unes des autres par leur **formulation**, leur capacité à s'adapter à des **calculs globaux** (flux dans un four) ou par **intervalles** (signature infrarouge d'un missile) sur le domaine spectral, leur **champ d'utilisation** (plage de température, distribution uniforme ou non en température ou en concentration, paroi réelle ou grise...), leur **précision de calcul** et leur **rapidité**.

Lors de la modélisation d'un procédé, le modélisateur devra ainsi choisir sa méthode en fonction des caractéristiques du procédé, de la nature des résultats escomptés et du solveur de l'équation de transfert radiatif qu'il utilise. Les trois autres parties de cette thèse sont vouées à fournir des **critères** permettant de faciliter ce choix.

Dans la seconde partie, les méthodes citées auparavant, à l'exception de la méthode EWB, sont explicitées en mettant en évidence leur possibilité de calculer des transferts par bandes ou uniquement globaux. De plus, lorsque leur formulation est en coefficient d'absorption, leur couplage avec la MOD est formulé. Dans les deux dernières parties, les résultats obtenus avec les méthodes GG, SPGG, SLW, SNBCK et CK pour divers cas mono et bidimensionnels sont présentés et servent de bases pour des comparaisons selon les trois critères suivants: le champ d'utilisation, la précision des calculs et la rapidité d'exécution.

CHAPITRE 1

LE TRANSFERT DE CHALEUR PAR RAYONNEMENT

Le rayonnement est un mode de transfert de chaleur présent usuellement tant dans la vie courante que dans le domaine industriel. Adéquatement utilisé, il permet en effet d'assurer un apport de chaleur conséquent et ainsi répondre à des sollicitations en énergie. La source de rayonnement thermique naturelle la mieux connue est assurément le soleil, dont de nombreuses utilisations peuvent être citées: transformation du rayonnement en chaleur à l'aide de verrières dans les habitations ou les serres, transformation du rayonnement en électricité à l'aide de panneaux solaires, utilisation du rayonnement par les plantes (photosynthèse)... Cependant de nombreuses autres sources existent, certaines naturelles, d'autres confectionnées telles que les feux, les fours (ménagers ou industriels), les lampes UV ...

Le mécanisme de propagation du rayonnement est cependant fort complexe et son explication nécessite d'analyser les phénomènes de propagation d'ondes ainsi que les interactions ayant lieu entre les molécules ou au sein même de ces dernières. La première partie de cette thèse est dédiée tout d'abord à expliciter ces phénomènes, puis à montrer des méthodes de résolutions pour des gaz idéaux, les gaz gris.

1.1 Le transfert de chaleur par rayonnement

Afin d'expliciter le transfert par rayonnement, considérons deux plaques maintenues aux températures constantes T_1 et T_2 , et séparées par un milieu gazeux (Figure 1.1). Les deux plaques émettent une multitude d'ondes (formées de photons) dont les intensités respectives dépendent des propriétés des plaques (nature du matériau, état de surface, température), de l'angle d'émission θ , et de la longueur d'onde λ ou de son inverse, le nombre d'onde ν . Un élément de surface s_1 émet ainsi selon θ_0 et ν_0 , une série de photons (d'énergie propre $hC\nu_0$), formant une onde monochromatique d'énergie initiale I_1 . Cette intensité est définie par la relation:

$$I_1(\theta_0, \nu_0) = \frac{2hC^2\lambda^{-5}}{\exp\left[\frac{hC}{k\lambda T}\right] - 1} \quad (1.1)$$

avec $C=C_0/n$ où C correspond à la célérité des ondes dans le vide ($C_0 \approx 3 \cdot 10^8$ m/s)

et n à l'indice de réfraction du milieu traversé

h est la constante de Planck, $h=6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s

k est la constante de Boltzmann, $k=1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K

Cette onde est émise en direction de l'élément de surface s_2 , cependant son intensité I_2 (en s_2) pourra être différente de I_1 , tout dépendant de la réponse du milieu gazeux à la propagation de l'onde. Si aucune interaction n'est observée entre les molécules du gaz et les photons formant l'onde qui le traverse, le milieu sera transparent pour cette longueur d'onde; le rayonnement monochromatique émis en s_1 sera intégralement transmis en s_2 . Le vide est un exemple de milieu transparent pour toutes les longueurs d'ondes. Si par contre

des interactions interviennent entre les photons et les molécules gazeuses, l'intensité de l'onde émise en s_1 va varier au cours de sa propagation. Ces interactions peuvent avoir deux incidences: - une augmentation du nombre de photons si l'interaction est une émission ou une dispersion (in-scattering),

- une diminution de ce nombre si c'est une absorption ou une dispersion (out-scattering).

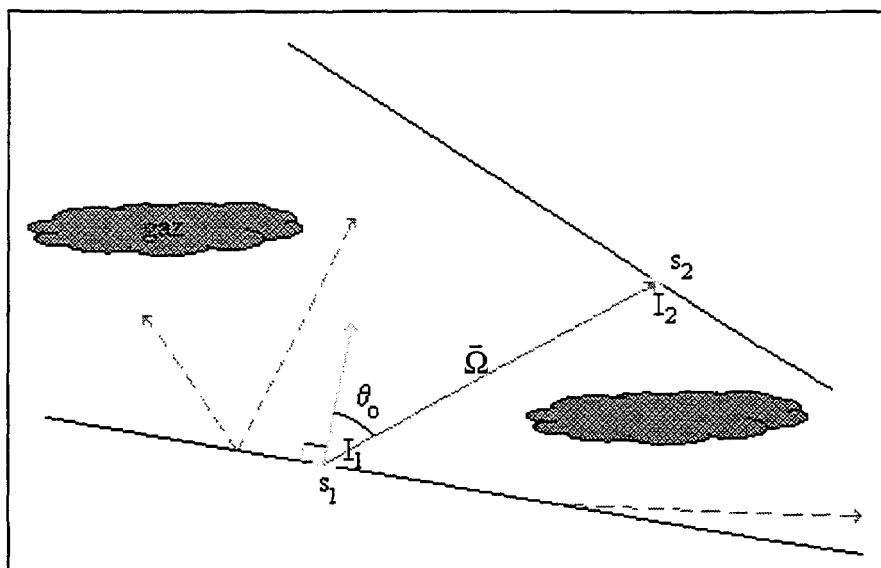


Figure 1.1: Rayonnement monochromatique directionnel émis d'un élément de surface s_1

1.1.1 Les interactions molécule-photon [1]

Une brève description des interactions qui s'opèrent entre les photons et les molécules gazeuses est présentée ci-dessous. Lorsque ces interactions ont pour résultat des phénomènes d'émission ou d'absorption, deux niveaux d'énergie différents E_1 et E_2 de la molécule gazeuse sont considérés; lors d'un phénomène de dispersion, un seul niveau énergétique E_1 est parfois suffisant.

1.1.1.1 L'émission

a. L'émission spontanée

La molécule de gaz dans l'état énergétique E_2 , transite vers un état inférieur E_1 , en émettant un photon de longueur d'onde λ (Figure 1.2). La valeur de la fréquence est déterminée à partir de la variation d'énergie entre les deux états 1 et 2: $\lambda = \frac{hc}{E_2 - E_1}$, où h est la constante de Planck.

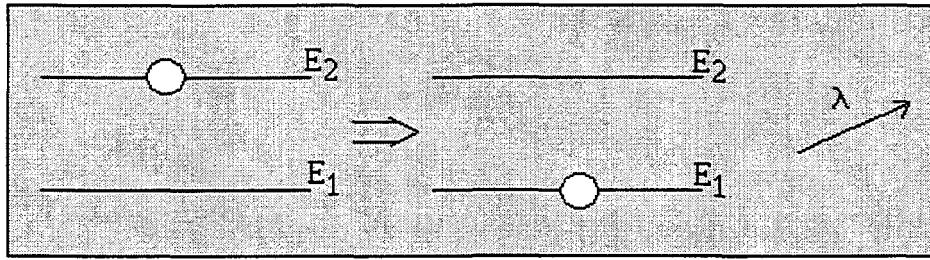


Figure 1.2 Schématisation de l'émission spontanée

Si N_i est le nombre de molécules dans l'état excité E_i ($i=1$ ou 2), la variation par émission spontanée de la population d'un niveau, noté 2, peut s'exprimer, en utilisant le coefficient d'Einstein A_{21} ¹ d'émission spontanée de 2 vers 1 [1] [2]:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} \Big|_{sp} = - \frac{\partial N_2}{\partial t} \Big|_{sp} = N_2 A_{21} \quad (1.2a)$$

¹ Des précisions supplémentaires sur les coefficients d'Einstein sont présentées en Annexe A.

Si le gaz contenu entre les deux plaques (Figure 1.1) possède deux niveaux énergétiques E_1 et E_2 tels qu'il puisse y avoir une émission spontanée d'un photon de nombre d'onde ν_0 , on observe un phénomène de renforcement du rayonnement monochromatique initial I_l .

b. L'émission induite

Un phénomène analogue peut intervenir sous l'action d'un photon incident sur une molécule de gaz. Ce photon d'énergie $hC/\lambda = E_2 - E_1$ interagit avec une molécule dans l'état excité E_2 et la fait entrer en résonance. Afin de se stabiliser à un état inférieur 1, la molécule émet un photon de même énergie hC/λ que le quantum excitateur.

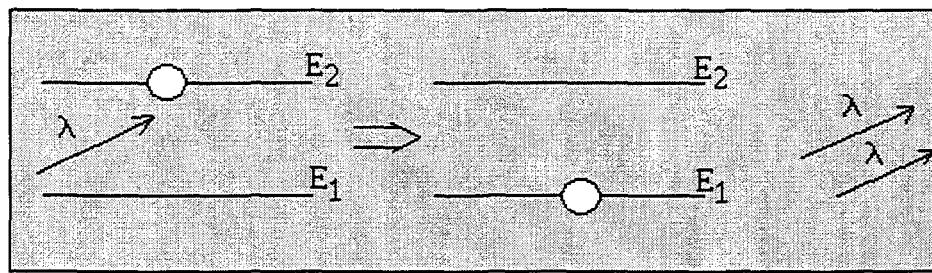


Figure 1.3 Schématisation de l'émission induite

La variation de la population de l'état 2 par ce phénomène est:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} \Big|_i = -\frac{\partial N_2}{\partial t} \Big|_i = N_2 B_{21} u_\nu \quad (1.2b)$$

où u_ν représente la densité d'énergie radiative. B_{21} représente le coefficient d'Einstein d'émission spontanée.

1.1.1.2 L'absorption

L'absorption est le phénomène inverse de celui de l'émission. La molécule absorbe un photon incident d'énergie hC/λ et passe de l'état excité 1 à l'état 2.

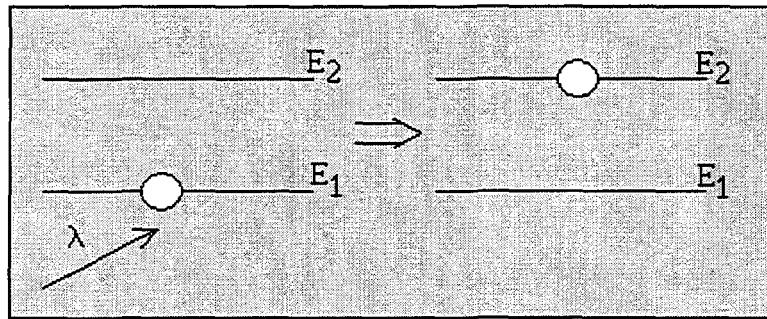


Figure 1.4: Schématisation de l'absorption spontanée

De manière analogue aux deux autres cas, on a:

$$-\frac{\partial N_1}{\partial t} \Big|_a = \frac{\partial N_2}{\partial t} \Big|_a = N_1 B_{12} u_\nu \quad (1.3)$$

où B_{12} représente le coefficient d'Einstein d'absorption.

1.1.1.3 La dispersion

Le phénomène de dispersion correspond à une variation de la trajectoire de la molécule sous l'action d'un photon. Cette variation peut s'accompagner ou non d'un échange d'énergie; la dispersion est dite inélastique si $E_2 \neq E_1$, sinon elle est dite élastique ($E_2 = E_1$).

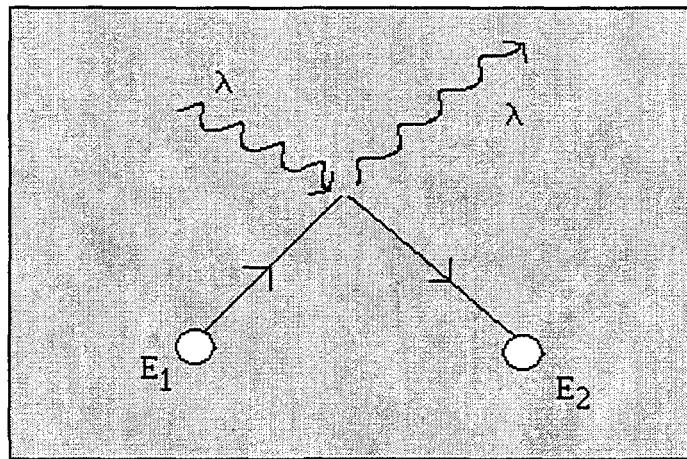


Figure 1.5: Schématisation de la dispersion

1.1.1.4 Conclusion

Le rayonnement est un mode de transfert de chaleur caractérisé par la propagation d'ondes électromagnétiques (il ne nécessite donc pas de support matériel). Au cours de sa propagation, des interactions peuvent intervenir entre les photons qui forment l'onde incidente et les molécules du gaz qu'il traverse. Ces interactions ont lieu pour des nombres d'ondes bien spécifiques, inhérents au gaz considéré, et permettent des transitions énergétiques au sein des molécules. Ces transitions entre deux niveaux énergétiques modifient, en outre, le nombre de photons formant l'onde incidente et conséquemment la valeur de la variable intensité associée à la quantité d'énergie transportée par rayonnement.

1.1.2. Les transitions énergétiques

1.1.2.1. Mécanismes

La nature des transitions énergétiques dépend de l'état d'ionisation (ionisée ou non) de la molécule. On observe ainsi trois transitions différentes:

- les transitions liée-liées (non ionisée)
- les transitions liée-libres (ionisée)
- les transitions libre-libres (ionisée)

Les deux dernières transitions ont lieu principalement à de très hautes températures (à partir de 10 000K) et sont étudiées lors d'analyses des transferts radiatifs dans les atmosphères planétaires [3, 4], ou dans les plasmas.

La transition liée-libre correspond à la photoionisation ou à la photodissociation d'une molécule lors de l'absorption d'un photon: les électrons et les ions, initialement dans un état lié, se désolidarisent en acquérant une énergie cinétique proportionnelle à l'énergie du photon.

La transition libre-libre correspond à des changements d'énergie cinétique qui s'opèrent lorsqu'un électron interagit avec un ion positif, ou lorsqu'une particule chargée interagit avec une particule neutre.

Ces deux transitions n'ont que peu d'importance pour les applications industrielles en combustion, où les températures usuelles varient entre 1 000 et 2 500K (les réfractaires utilisés en combustion acceptant des températures maximales aux parois de l'ordre de 1 500 K).

Les transitions majoritairement présentes sont les transitions liée-liées. Elles correspondent aux changements de niveaux quantiques d'énergie au niveau atomique de la molécule. Alors que pour des gaz constitués d'une seule substance moléculaire (par exemple N₂ et O₂), ces transitions sont exclusivement des changements d'énergies électroniques, notées E_e , elles correspondent aussi pour les gaz de plus d'une substance atomique (par exemple H₂O et CO₂) à des variations d'énergies vibrationnelles E_v et rotationnelles E_r . Les énergies nécessaires pour ces changements de niveaux quantiques dépendent du type de variation considérée.

Les ordres de grandeurs sont les suivants [5]:

- E_r : quelques J/mol
- E_v : quelques kJ/mol
- E_e : quelques dizaines de kJ/mol

Ce système discret d'énergies de transitions rotationnelles, vibrationnelles ou électroniques forme un spectre discontinu, et les raies monochromatiques, qui le constituent, apparaissent dans des domaines de fréquences différents.

Ainsi, les transitions rotationnelles pures, nécessitant peu d'énergie, apparaissent dans l'infra-rouge (IR) lointain, pour des longueurs d'ondes variant entre 20 et 1 000 μm. Les transitions de vibration se manifestent simultanément avec des transitions de rotation entre 1 et 20 μm ; elles sont nommées transitions vibrorotationnelles. Ces deux sortes de transitions n'apparaissent que pour un gaz comportant des molécules

hétéropolaires², comme par exemple H₂O, CO₂ et CO. Les transitions électroniques fournissent quant à elle des raies essentiellement dans l'ultra-violet (UV) (de 10⁻² à 0,4 μm) et dans le visible (de 0,4 à 0,7 μm).

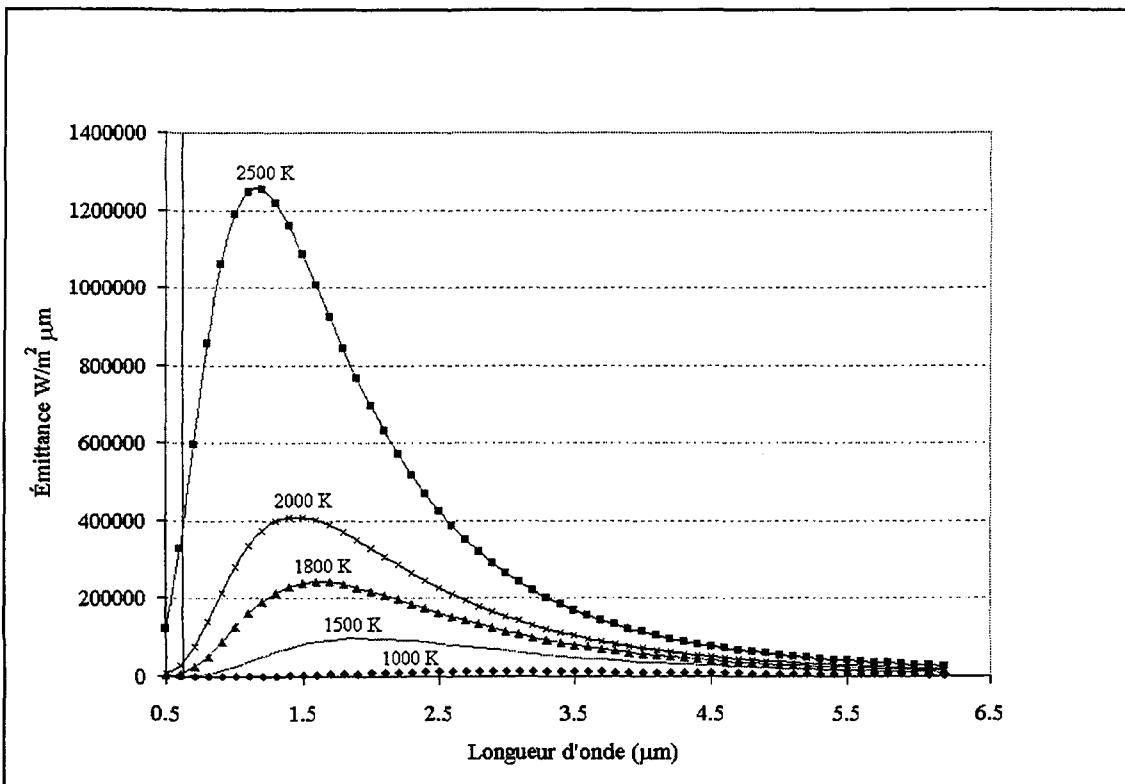


Figure 1.6: Évolution de la fonction de Planck en fonction de la longueur d'onde et de la température

On peut observer sur la figure 1.6, pour des températures allant jusqu'à 2 500 K, la faible contribution des phénomènes énergétiques existant pour des longueurs d'ondes inférieures à 0,7 μm ou supérieures à 6 μm; ceci illustre la faible influence des transitions électroniques et rotationnelles pures dans les cas d'applications industrielles de

² molécules non-linéaires présentant un moment dipolaire permettant divers états rotationnels et vibrationnels.

combustion. Pour cette raison, les gaz tels que O₂, N₂, qui ne possèdent pas de moment dipolaire, sont considérés comme non participants (transparents).

Lorsque les réactifs sont en proportion quasi-stoechiométrique, les produits de combustion sont l'azote diatomique, la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone, le monoxyde de carbone et des traces d'autres gaz, tels que les produits de réactions, le dioxyde d'azote... Pour le transfert par rayonnement couplé aux études de combustion, les gaz participants considérés sont ainsi la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone et le monoxyde de carbone. Cependant ces trois gaz ne revêtent pas la même importance. On peut hiérarchiser l'importance de leur présence sur les propriétés du mélange gazeux en analysant tout d'abord leur concentration dans le gaz de combustion mais aussi leur étalement spectral [1]. Ainsi, le poids de H₂O, dont le spectre évolue entre 100 et 9 000 cm⁻¹ (ou encore entre 1,11 et 100 μm) est plus important que celui du CO₂, dont le spectre n'évolue qu'entre 200 et 5 500 cm⁻¹ (ou encore entre 1,82 et 50 μm) et qui possède des bandes de transparence plus marquées entre ses quatre bandes d'émission primaires. Dans les études qui sont faites dans cette thèse l'influence du CO est négligée devant celle de H₂O et de CO₂; cette simplification se base sur des études antérieures qui ont montré que l'influence du CO représentait environ 2% du rayonnement des deux autres gaz [5b]. De ce fait, les mélanges gazeux, qui sont considérés dans les transferts radiatifs en combustion, sont des mélanges composés de x moles de H₂O, y moles de CO₂ et z moles d'un gaz radiativement neutre (généralement N₂).

1.1.2.2. Conclusion

L'étude du rayonnement dans des enceintes de combustion nécessite de connaître avec exactitude les caractéristiques des différentes raies spectrales correspondant surtout aux transitions vibrorotationnelles de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone. Cette démarche est cependant fort délicate du fait du très grand nombre de ces transitions (quelques 10^6 raies). Un exemple de ces transitions ayant lieu pour la vapeur d'eau à une température de 1 000 K, une pression de 1 bar et pour un nombre d'onde variant entre 660 et 670 cm^{-1} (ou entre 14,93 et 15,15 μm) est présenté sur la figure 1.7 [4]. La grandeur caractéristique des amplitudes de ces transitions est le coefficient d'absorption du gaz k_ν ; il correspond à la capacité du gaz à absorber ou à émettre pour une longueur d'onde, une température et une pression données. Il permet de quantifier les transformations qui ont lieu au sein de l'onde au cours de sa propagation.

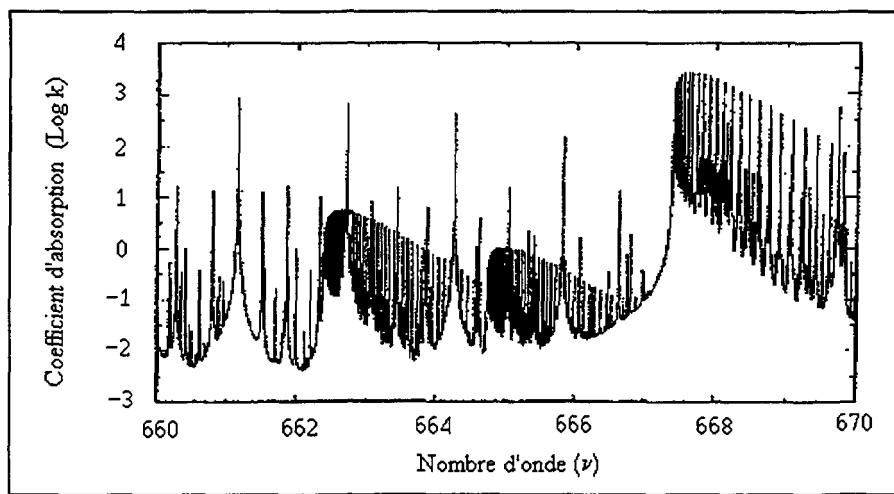


Figure 1.7 [4]: Variation du coefficient d'absorption de la vapeur d'eau à 1 000K, 1 bar pour l'intervalle de nombre d'onde [660;670 cm^{-1}]

1.2 L'équation de transfert radiatif

Au cours de sa propagation dans un milieu gazeux participant, l'onde émise par une surface s_1 va subir des transformations, qui peuvent avoir trois origines (Cf. §1.1.): absorption, émission ou dispersion. L'équation gouvernant la variation de l'intensité de cette onde est nommée l'Équation de Transfert Radiatif (ETR); sa formulation est la suivante:

$$\frac{dI_\nu}{ds}(s) = \underbrace{-(k_\nu + \sigma_\nu)I_\nu(s)}_A + k_\nu I_\nu^0(s) + \underbrace{\frac{\sigma_\nu}{4\pi} \int_{4\pi s t} \phi(\vec{s}', \vec{s}) I_\nu(s') ds'}_B \quad (1.4)$$

Le terme A correspond à l'atténuation du rayonnement par absorption dans le milieu (k_ν) et par dispersion (σ_ν), des photons se propageant dans la direction \vec{Q} sont déviés dans une autre direction. Le terme B représente le renforcement du rayonnement par émission (k_ν) et par dispersion (σ_ν), des photons se propageant dans une direction autre que \vec{Q} sont déviés dans cette direction. Par ailleurs, le terme d'émission du gaz, $k_\nu I_\nu^0(s)$, est relié à l'émissivité de corps noir propre au volume de gaz considéré, c'est à dire relié à la température du volume, tandis que le terme d'absorption, $k_\nu I_\nu(s)$, est relié au rayonnement incident, qui dépend des températures des volumes de gaz précédents. L'évolution de l'intensité du rayonnement est schématisée à la figure 1.8.

Pour les études comparatives effectuées dans les chapitres 3 et 4, les phénomènes de dispersion ont été omis afin de simplifier les calculs, cette simplification n'est cependant aucunement due à des limitations des modèles de gaz gris. Pour des applications industrielles, l'utilisation de modèles de Mie pour prendre en compte la présence de suies doit être envisagée [5c].

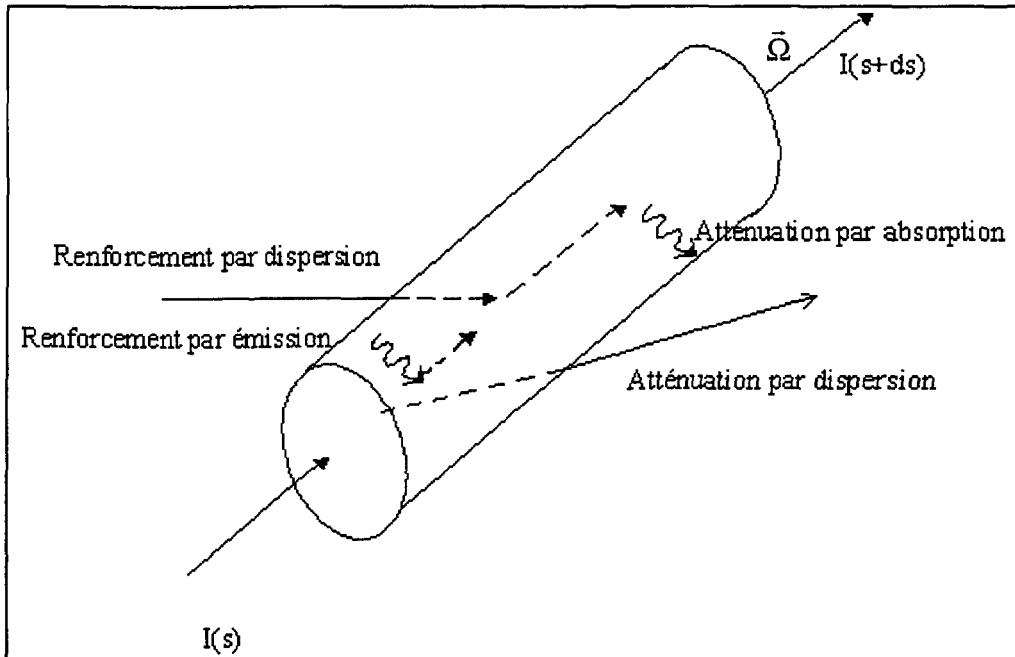


Figure 1.8: Schématisation des transformations apparaissant au cours de la propagation du rayonnement.

1.3 Résolution spatiale de l'équation de transfert radiatif

L'ETR est une équation délicate à résoudre. Elle doit être non seulement intégrée sur tout l'espace considéré mais aussi sur tout le domaine spectral. Certaines approximations analytiques peuvent être réalisées afin d'obtenir un résultat qualitatif pour des cas monodimensionnels simples, mais il est nécessaire d'utiliser des codes numériques pour des résolutions rigoureuses. Deux algorithmes doivent en fait être utilisés de concert: le premier sert à la résolution spatiale de l'ETR, le second permet de modéliser les variations du coefficients d'absorption avec la longueur d'onde (ou le nombre d'onde).

1.3.1 Hypothèse de gaz gris

Comme il peut être observé sur la Figure 1.7, le coefficient d'absorption de la vapeur d'eau (comportement similaire pour le dioxyde de carbone) a une dynamique très forte en fonction du nombre d'onde. Une simulation rigoureuse d'une telle évolution demande d'une part une parfaite connaissance des diverses transitions énergétiques du gaz et d'autre part des outils informatiques suffisamment puissants pour pouvoir calculer par la suite les transferts de chaleur qui leur sont associés. Les outils informatiques étant très peu développés dans les années 50, une simplification de l'équation de transfert radiatif a consisté à rechercher un gaz de coefficient d'absorption constant qui pourrait reproduire de façon acceptable le comportement du gaz réel; ce gaz équivalent est appelé un gaz gris. Des tables ont ainsi été développées par Hottel [6-8] afin de pouvoir prédire la valeur du coefficient d'absorption à utiliser, en fonction de la température moyenne du milieu, de sa nature (CO_2 , H_2O ou mélange des deux), de sa pression partielle et de la longueur caractéristique de l'enceinte.

Il convenait ensuite de développer des codes numériques afin de résoudre l'ETR pour un gaz gris. Dans la suite de ce chapitre, les équations seront explicitées pour des gaz gris.

1.3.2 Méthodes de référence

Diverses méthodes ont été développées afin de pouvoir résoudre l'ETR. Les plus connues sont incontestablement la méthode de Monte Carlo, la méthode de zones et les méthodes de flux dont font partie les méthodes aux ordonnées discrètes (MOD). Les deux premières méthodes faisant souvent office de références, une brève description de leurs

principes fondamentaux est fournie dans les paragraphes ci-dessous. Le lecteur peut se référer aux diverses publications qui y sont mentionnées afin d'obtenir de plus amples informations. Ces deux méthodes sont cependant contraignantes en temps de calcul si bien que d'autres méthodes telles que celles du lancer de rayons ou des ordonnées discrètes leur sont parfois préférées. Dans le cadre de cette thèse, la méthode retenue est celle des ordonnées discrètes; une description détaillée en est faite au §1.4. Une attention toute particulière est apportée aux algorithmes numériques utilisés lors des résolutions des cas mono et bidimensionnels.

1.3.2.1 La méthode de Monte Carlo [9-10]

La méthode de Monte Carlo est une méthode statistique, qui consiste à représenter le transfert radiatif par une succession d'événements aléatoires. Pour chaque cellule de l'enceinte un nombre N de photons est émis; pour chacun d'eux, des nombres aléatoires sont introduits afin de caractériser leur direction de propagation, leur distance parcourue avant absorption, leur absorption ou leur réflexion s'il atteint une paroi... Un historique de leur propagation permet ensuite de calculer les flux au niveau des parois et la divergence du flux dans le milieu. En utilisant un nombre N suffisamment grand (de l'ordre de 10 000), cette méthode fournit des résultats de très grande précision mais devient très coûteuse en temps de calcul. La méthode de Monte Carlo est ainsi couramment utilisée dans les domaines militaires, où la précision des résultats est primordiale, mais est actuellement plutôt considérée dans le domaine industriel comme une méthode de référence idéale pour valider des méthodes plus rapides.

1.3.2.2 La méthode de Zones [9]

Cette méthode consiste à subdiviser le domaine étudié en un nombre suffisant de zones volumiques (au sein du milieu) et surfaciques (au niveau des parois), afin que puissent être considérées uniformes leur température et leurs propriétés radiatives. Le calcul du transfert radiatif est obtenu en établissant un bilan énergétique sur chaque zone en tenant compte des échanges thermiques entre la zone considérée et toutes les zones du système. La complexité de cette méthode réside d'une part dans le calcul des "aires d'échange direct" et des "aires d'échange total" représentant la "visibilité" de deux zones entre elles, et d'autre part dans la résolution matricielle du système d'équations propre au bilan énergétique. Une formulation plus détaillée des aires d'échange et du bilan matriciel est présentée au §2.2.3.2 traitant du modèle de somme pondérée de gaz gris.

1.4 Les méthodes des ordonnées discrètes (MOD)

La méthode des ordonnées discrètes fut développée originellement en 1960 par Chandrasekhar [11] dans le cadre de travaux sur les étoiles et les radiations atmosphériques. Elle fut ensuite l'objet de nombreuses études en neutronique, dont les plus reconnues sont celles de Carlson et Lathrop [12]. Son essor dans le domaine des transferts radiatifs est plus tardif et doit attendre les années 80, avec par exemple les travaux de Fiveland [13], Jamaluddin [14] ou Truelove [15]. Ces diverses études ont permis de souligner, pour les cas usuels, deux qualités de cette méthode: la rapidité des calculs (par rapport aux méthodes de zones ou de Monte Carlo) et la bonne précision de résolution. Depuis les années 90, un engouement de plus en plus prononcé pour la MOD apparaît, et de nombreuses variantes de

la méthode initiale de Carlson et Lathrop sont développées, permettant entre autre son application pour les géométries complexes [3, 16-18].

1.4.1. Principe de la méthode [3, 10, 18]

La recherche de l'intensité en chaque point de l'espace nécessite de résoudre l'ETR en traitant sa dépendance vis-à-vis des directions angulaires du rayonnement, de la position du point considéré et des évolutions spectrales. Afin de simplifier cette résolution, Chandrasekhar a proposé de traiter la dépendance directionnelle en utilisant une discréétisation angulaire: le rayonnement ne "s'effectue" plus que selon un nombre M donné de directions $\vec{\Omega}_m(\mu_m, \eta_m, \xi_m)$. L'intensité totale en un point, $I(s)$, s'obtient en résolvant tout d'abord les équations de transfert radiatif propre aux M directions, qui permettent d'obtenir les intensités directionnelles $I_m(s)$, puis en sommant ces intensités directionnelles préalablement multipliées par un coefficient de pondération ω_m .

$$I(s) = \sum_{m=1}^M \omega_m I_m(s) \quad (1.5)$$

Ces directions et les poids qui leur sont affectés sont définis par des quadratures angulaires.

1.4.2. Choix des directions et de leur facteur de pondération

Diverses quadratures angulaires sont disponibles dans la littérature; la famille la plus utilisée est la quadrature S_N [12], cependant différentes études sont aussi réalisées à l'aide de la quadrature T_N due à Thurgood [19]. Ces deux familles vérifient toutes deux les mêmes

critères de symétrie afin de ne privilégier aucun sens de propagation, mais se différencient lors du choix des directions et des coefficients de pondération qui leur sont associés.

1.4.2.1 Les lois de symétries

Deux critères fondamentaux de symétrie ont initialement été introduits pour ces quadratures. D'une part, afin d'assurer une symétrie par rapport aux plans de coordonnées, si la quadrature contient la direction $\vec{\Omega}(\mu, \eta, \xi)$, alors elle contient aussi les directions $\vec{\Omega}(-\mu, \eta, \xi)$, $\vec{\Omega}(\mu, -\eta, \xi)$, $\vec{\Omega}(\mu, \eta, -\xi)$, $\vec{\Omega}(-\mu, -\eta, \xi)$, $\vec{\Omega}(-\mu, \eta, -\xi)$, $\vec{\Omega}(\mu, -\eta, -\xi)$ et $\vec{\Omega}(-\mu, -\eta, -\xi)$, et elles ont toutes le même facteur de pondération. D'autre part, afin d'assurer une invariance par rotation de 90° autour des axes de symétries, si la quadrature contient la direction $\vec{\Omega}(\mu, \eta, \xi)$, alors elle contient aussi les directions $\vec{\Omega}(\eta, \xi, \mu)$, $\vec{\Omega}(\xi, \mu, \eta)$, $\vec{\Omega}(\eta, \mu, \xi)$, $\vec{\Omega}(\mu, \xi, \eta)$, $\vec{\Omega}(\xi, \eta, \mu)$. Les facteurs de pondérations doivent là aussi être les mêmes. Ces deux invariances sont tout à fait légitimes dans le cas de géométries simples mais peuvent paraître moins nécessaires dans le cas de géométries complexes.

1.4.2.2 Le choix des directions et de leur poids

La quadrature S_N se base sur une série de relations analytiques afin de définir ses directions et les poids. Cette quadrature est tout d'abord caractérisée par son ordre N (pair), qui correspond à un nombre M total de directions de $N(N+2)$. Il n'est en fait nécessaire de caractériser ces directions que sur un seul octant, les autres directions pouvant être obtenues

en utilisant les relations de symétrie. Deux relations sont introduites pour le calcul des poids et des directions:

- L'équation de conservation de l'intensité de corps noir (moment d'ordre 0)

$$\sum_{m=1}^M \omega_m = \int_{4\pi_{st}} d\Omega = 4\pi \quad (1.6)$$

- L'équation de conservation du flux (moment d'ordre 1)

$$\sum_{m=1}^M \mu_m \omega_m = \int_{4\pi_{st}} \mu d\Omega = 0 \quad (1.7)$$

Pour des ordres supérieurs ou égaux à 6, des degrés de liberté apparaissent pour le choix des directions et des poids, et il convient d'introduire de nouvelles relations telles que celle de Truelove:

$$\sum_{\substack{m \text{ tq } \mu_m < 0}}^M |\mu_m| \omega_m = \int_{2\pi \text{ tq } \mu < 0} \mu d\Omega \quad (1.8)$$

Cette relation illustre le fait que le calcul du flux incident au niveau des parois est effectué sur une moitié du domaine spatial (définie par le sens de propagation). Les valeurs des directions et des poids des quadratures S_2 , S_4 , S_6 et S_8 sont explicitées aux références [9, 10, 19]. Toutefois, deux problèmes sont inhérents à cette famille de discrétisation. Le premier provient de l'apparition de poids négatifs pour un ordre N supérieur ou égal à 12 et le deuxième de la non uniformité de la distribution des directions dans le domaine angulaire, ce qui favorise les effets de rayons [3, 19].

La quadrature T_N fut développée par Thurgood afin d'essayer de pallier aux deux problèmes décrits ci-dessus. Au lieu de recourir à des équations de conservation pour définir les directions dans le premier octant, cette méthode s'appuie sur des concepts géométriques. Elle consiste tout d'abord à mailler le triangle équilatéral défini par les sommets $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ et $(0,0,1)$ en N^2 (pour une quadrature d'ordre N) triangles équilatéraux égaux (Figure 1.9), puis de tracer les N^2 droites passant par l'origine du repère et chacun des centres des triangles; ces droites définissent les N^2 directions du premier octant. Le poids de chacune des directions est représenté par l'aire correspondant à l'intersection de la sphère unité avec la pyramide ayant pour sommet l'origine et passant par le triangle associé à la direction considérée. Les directions définies sur les autres octants se déduisent en utilisant les relations de symétrie explicitées au §1.4.2.1. Le nombre total de directions correspondant à une quadrature T_N est $8N^2$. Les directions et les poids des T_i ($i=2, \dots, 10$) sont explicitées dans la thèse de Thurgood [19].

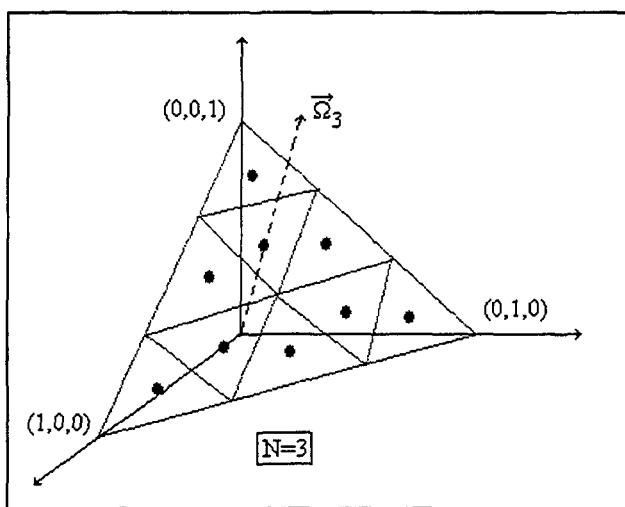


Figure 1.9: Discréétisation T_3 sur le premier octant

1.4.3 Résolution de l'ETR à l'aide des méthodes aux ordonnées discrètes

Afin de calculer les intensités totales en chaque point de l'enceinte, il est nécessaire de calculer les intensités directionnelles pour toutes les directions de la quadrature utilisée. Il convient ainsi de résoudre une famille d'équations de la forme:

$$\frac{1}{\beta(s)} \nabla \left[I(s, \vec{\Omega}) \vec{\Omega} \right] + I(s, \vec{\Omega}) = (1 - \omega(s)) I^0(s) + \frac{\omega(s)}{4\pi} \int_{4\pi} \phi(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) I(s, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (1.9)$$

$$\beta(s) = k(s) + \sigma(s) \text{ correspond au coefficient d'extinction, et } \omega(s) \text{ à l'albédo, } \omega(s) = \frac{\sigma(s)}{\beta(s)}.$$

Cette équation est écrite ici sous sa forme générale multidimensionnelle pour un gaz gris (les modèles de gaz réels ne seront introduits qu'au second chapitre); dans les paragraphes suivants, sa formulation est adaptée au nombre de dimensions considérées. Trois formulations sont présentées, la première concerne des géométries monodimensionnelles et les deux autres des géométries bidimensionnelles.

1.4.3.1 Géométrie monodimensionnelle

La méthode de résolution présentée ci-dessous est celle utilisée dans le chapitre 3 pour effectuer des études préliminaires des différentes modélisations des gaz réels. Afin de transformer l'équation (1.9), divers changements de variables sont effectués. D'une part, le terme source radiatif $S(s, \vec{\Omega})$ est défini:

$$S(s, \vec{\Omega}) = (1 - \omega) I^0(s, \vec{\Omega}) + \frac{\omega}{4\pi} \int_{4\pi} \phi(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') I(s, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (1.10)$$

D'autre part, des variables mieux adaptées aux milieux monodimensionnels sont introduites telles que l'épaisseur optique $\tau = \beta(z)z$ et l'angle θ formé par la normale \vec{n} et la direction de propagation.

En utilisant la fonction de phase monodimensionnelle $\phi(\theta, \theta') = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi(\bar{\Omega}, \bar{\Omega}') d\varphi$, la

fonction $S(s, \bar{\Omega})'$ peut alors se reformuler comme suit:

$$S(\tau, \theta) = (1 - \omega) I^o(\tau) + \frac{\omega}{2} \int_0^\pi \phi(\theta, \theta') I(\tau, \theta') \sin \theta' d\theta'$$

La formulation de l'ETR pour un milieu gris s'exprime alors de la manière suivante :

$$\cos \theta \frac{dI_\theta}{d\tau}(\tau) = (S(\tau, \theta) - I_\theta(\tau)) \quad (1.11)$$

ou encore, en posant $\cos \theta = \mu$,

$$\mu \frac{dI_\mu}{d\tau}(\tau) = (S(\tau, \mu) - I_\mu(\tau)) \quad (1.12)$$

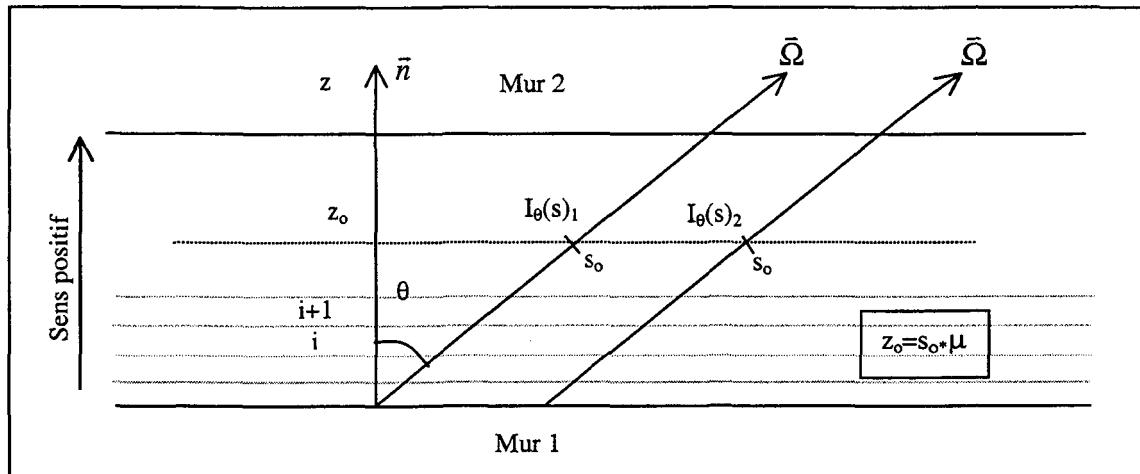


Figure 1.10: Schématisation du milieu monodimensionnel

Le milieu étant monodimensionnel, tous les points situés à la même hauteur z ont les mêmes caractéristiques; les deux intensités directionnelles $I_\theta(s)_1$ et $I_\theta(s)_2$ sont ainsi identiques. La discréétisation consiste alors à découper l'espace compris entre les deux plaques en une succession de N strates, puis à quantifier sur chacune de ces strates les intensités totales $I(i)$. Il convient cependant de connaître dans un premier temps toutes les intensités directionnelles $I_\mu(i)$. Pour cela, deux catégories d'intensités directionnelles sont définies :

- les intensités $I_\mu^+(i)$ dont le sens de propagation est positif ($\mu>0$)
- les intensités $I_\mu^-(i)$ dont le sens de propagation est négatif ($\mu<0$)

Les deux jeux de directions correspondant aux sens de propagation positif et négatif sont les mêmes au signe près: si μ_j est la $j^{\text{ième}}$ direction de la propagation positive alors $-\mu_j$ est la $j^{\text{ième}}$ direction de la propagation négative. Par ailleurs les poids associés à ces deux directions sont identiques (ω_j).

En intégrant directement l'ETR selon τ , le long d'une direction donnée μ , les expressions de ces intensités sont :

$$\begin{aligned} I_\mu^+(i) &= I_1 e^{-\frac{\tau_i}{\mu}} + \int_0^{\tau_i} \frac{1}{\mu} S(\tau', \mu) e^{-\frac{(\tau_i - \tau')}{\mu}} d\tau \\ I_\mu^-(i) &= I_2 e^{\frac{(\tau_L - \tau_i)}{\mu}} + \int_{\tau_L}^{\tau_i} \frac{1}{\mu} S(\tau', \mu) e^{-\frac{(\tau_i - \tau')}{\mu}} d\tau \end{aligned} \quad (1.13)$$

où I_1 et I_2 sont les conditions limites au niveau des parois diffuses 1 et 2.

$$\begin{aligned}
I_1 &= \varepsilon_1 \frac{\sigma T_1^4}{\pi} + \frac{(1-\varepsilon_1)}{\pi} \int_{-1}^0 I^-(\tau_1, \mu) \mu d\mu \\
I_2 &= \varepsilon_2 \frac{\sigma T_2^4}{\pi} + \frac{(1-\varepsilon_2)}{\pi} \int_0^1 I^+(\tau_N, \mu) \mu d\mu
\end{aligned} \tag{1.14}$$

A l'aide de ces relations, les intensités directionnelles peuvent être calculées numériquement, en utilisant d'une part une procédure itérative de convergence et d'autre part la relation de récurrence entre deux nœuds successifs i et $i+1$ (Figure 1.11). Cette relation est explicitée ci-dessous pour les intensités $I_\mu^+(i)$:

$$\begin{aligned}
I_\mu^+(i+1) &= I_1 e^{-\frac{\tau_{i+1}}{\mu}} + \int_0^{\tau_{i+1}} \frac{1}{\mu} S(\tau', \mu) e^{-\frac{(\tau_{i+1}-\tau')}{\mu}} d\tau' \\
&= I_1 e^{-\frac{\tau_i}{\mu}} \times e^{-\frac{(\tau_{i+1}-\tau_i)}{\mu}} + \left(\int_0^{\tau_i} \frac{1}{\mu} S(\tau', \mu) e^{-\frac{(\tau_i-\tau')}{\mu}} d\tau' \right) \times e^{-\frac{(\tau_{i+1}-\tau_i)}{\mu}} + \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} \frac{1}{\mu} S(\tau', \mu) e^{-\frac{(\tau_{i+1}-\tau')}{\mu}} d\tau'
\end{aligned} \tag{1.15}$$

ou bien:

$$I_\mu^+(i+1) = I_\mu^+(i) e^{-\frac{\Delta\tau}{\mu}} + \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} \frac{1}{\mu} S(\tau', \mu) e^{-\frac{(\tau_{i+1}-\tau')}{\mu}} d\tau' \tag{1.16}$$

avec $\Delta\tau = \tau_{i+1} - \tau_i$

Cette expression est tout à fait similaire pour $I_\mu^-(i)$. L'intensité totale se déduit ensuite des

intensités directionnelles comme suit: $I(i) = \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j (I_{\mu_j}^+(i) + I_{\mu_j}^-(i))$.

Les flux pariétaux sont définis quant à eux par:

$$\begin{aligned} q_1 &= \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j (\mu_j I_{\mu_j}^+(1) + (-\mu_j) I_{-\mu_j}^-(1)) \\ q_2 &= \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j (\mu_j I_{\mu_j}^+(N) + (-\mu_j) I_{-\mu_j}^-(N)) \end{aligned} \quad (1.17)$$

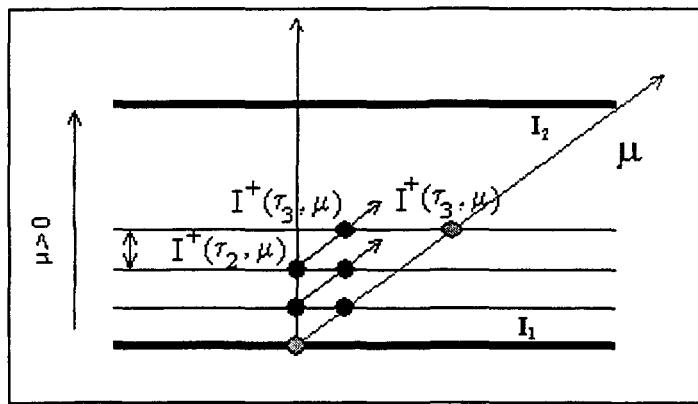


Figure 1.11: Relation entre deux intensités directionnelles consécutives

1.4.3.2 Géométrie bidimensionnelle

La seconde partie de l'étude des différentes modélisations étant bidimensionnelle, une présentation de l'implantation numérique adaptée à cette dimension est réalisée ci-après. Après une présentation de la version classique pour des géométries simples, une version permettant d'étudier les géométries complexes est explicitée. Cette méthode est celle utilisée lors de l'étude bidimensionnelle des gaz réels. Les milieux considérés dans cette étude étant non dispersifs, les termes $\sigma(s)$ ne seront pas considérés.

1.4.3.2.1 Géométrie bidimensionnelle simple

Les premiers calculs de transferts radiatifs avec la méthode des ordonnées discrètes ont été effectués pour des géométries cartésiennes (ce qui ne sera pas le cas dans cette étude).

La formulation de l'équation (1.9) pour une telle géométrie est la suivante [19]:

$$\mu_m \frac{dI_{i,j,m}}{dx} + \eta_m \frac{dI_{i,j,m}}{dy} = -k_{i,j}(I_{i,j,m} - I^0(T_{i,j})) \quad (1.18)$$

Afin d'exprimer numériquement les dérivées des intensités $I_{i,j,m}$, les intensités latérales des cellules ont été introduites (Figure. 1.12):

$$\begin{cases} \frac{dI_{i,j,m}}{dx} = \frac{I_{i,j,m,E} - I_{i,j,m,W}}{\Delta x} \\ \frac{dI_{i,j,m}}{dy} = \frac{I_{i,j,m,N} - I_{i,j,m,S}}{\Delta y} \end{cases} \quad (1.19)$$

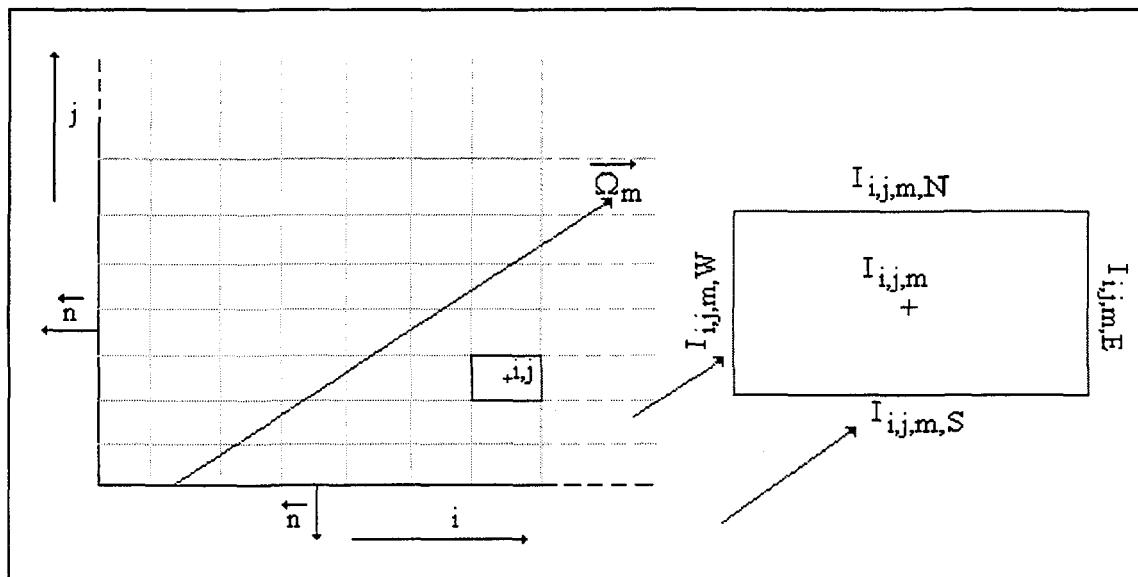


Figure 1.12: Discréétisation pour une géométrie simple bidimensionnelle

L'équation (1.18) peut alors être formulée comme suit:

$$\mu_m \Delta y_{i,j} (I_{i,j,m,E} - I_{i,j,m,W}) + \eta_m \Delta x_{i,j} (I_{i,j,m,N} - I_{i,j,m,S}) + k_{i,j} \Delta x_{i,j} \Delta y_{i,j} I_{i,j,m} = k_{i,j} \Delta x_{i,j} \Delta y_{i,j} I^0(T_{i,j}) \quad (1.20)$$

où $\Delta x_{i,j}$ et $\Delta y_{i,j}$ correspondent respectivement à la largeur et à la hauteur de la cellule (i,j) ; ces deux grandeurs peuvent varier en fonction de la maille considérée.

Le problème inhérent à cette formulation réside dans son nombre d'inconnues. En effet, supposons une direction \vec{Q}_m définie par deux vecteurs directeurs μ_m et η_m positifs, les intensités latérales Ouest (W) et Sud (S) seront connues à partir des autres cellules traversées et des conditions aux parois, mais il reste trois inconnues à quantifier: les intensités latérales Est (E) et Nord (N) et bien sûr l'intensité centrale (Figure 1.12). Afin de pallier à ce problème, une interpolation est introduite; elle permet d'exprimer les intensités latérales inconnues en fonction des intensités latérales connues et de l'intensité centrale. Différentes interpolations sont possibles, définissant ainsi une famille de méthodes aux ordonnées discrètes. L'interpolation la plus classique est celle exprimée ci-dessous:

$$I_{i,j,m} = \rho I_{i,j,m,inconnue} + (1-\rho) I_{i,j,m,connue} \quad \text{avec } 0.5 \leq \rho \leq 1 \quad (1.21)$$

Pour la direction choisie dans notre exemple, cette interpolation permet d'écrire les deux équations suivantes:

$$\begin{cases} I_{i,j,m,E} = \rho I_{i,j,m} - (1-\rho) I_{i,j,m,W} \\ I_{i,j,m,N} = \rho I_{i,j,m} - (1-\rho) I_{i,j,m,S} \end{cases} \quad (1.22)$$

Ces relations permettent de faire disparaître les intensités latérales inconnues dans (1.20), et de calculer l'intensité centrale. Les intensités latérales $I_{i,j,m,E}$ et $I_{i,j,m,N}$ peuvent ensuite être déduites de (1.22) et deviennent les deux intensités latérales connues de la cellule $(i+1,j+1)$.

Deux valeurs de ρ ont été le plus souvent utilisées. La première est $\rho=0.5$, qui correspond au schéma Diamant [3, 10]. Ce schéma peut donner naissance localement à des luminances négatives, ou à des surévaluations lorsque les luminances négatives sont bloquées artificiellement à zéro; ceci se traduit par des oscillations au niveau du calcul du flux pariétal et peut entraîner la divergence de l'algorithme ou la convergence vers une solution erronée. La seconde est $\rho=1$, et correspond au schéma Step [3, 10]. Ce schéma ne produit pas de luminances négatives, mais ses résultats dépendent plus de la finesse du maillage [3, 10]. Malgré les inconvénients cités ci-dessus, cette famille d'interpolation est largement utilisée, à titre d'exemple on peut se reporter aux ouvrages [14, 20-21].

D'autres interpolations ou schémas sont disponibles dans la littérature, tels que les schémas exponentiel, d'El Wakil ou Heart [3, 22]; d'autres techniques utilisent aussi la méthode des éléments finis [22b].

Algorithme de calcul des flux pariétaux pour un champ de température donné

Soit une enceinte bidimensionnelle dont le champ de température est spécifié, l'algorithme de calcul permettant de quantifier les valeurs des flux pariétaux en utilisant la méthode aux ordonnées discrètes classique est le suivant:

- 1) Choix du maillage et de la quadrature
- 2) Entrée du champ de températures

Initialisation des conditions limites (aux parois)

3) Jusqu'à convergence des intensités centrales ou latérales:

- Pour chaque direction m , les intensités centrales directionnelles sont calculées en suivant le sens de propagation de la direction considérée: chaque intensité inconnue est quantifiée à partir d'intensités latérales qui viennent d'être recalculées (maillage structuré) (Eq. 1.21). Ensuite, les intensités latérales inconnues sont déduites (Eq. 1.22).

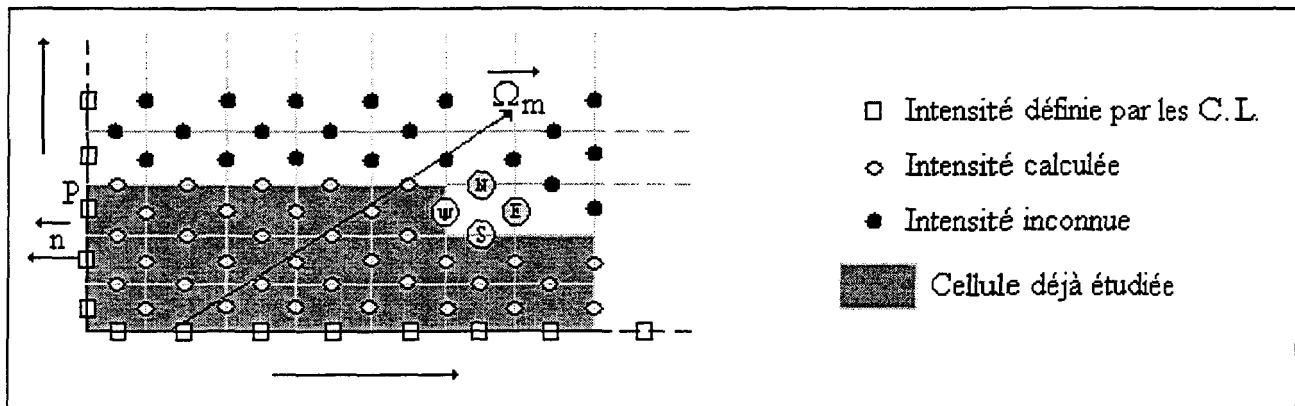


Figure 1.13: Propagation des informations dans le cas d'une géométrie simple

- Mise à jour des conditions limites au niveau des parois

$$I_{m,sortant}(P) = \epsilon I^0(P) + \frac{1-\epsilon}{\pi} \sum_{n \bullet \Omega_{m'} > 0} \omega_{m'} (\vec{n} \bullet \vec{\Omega}) I_{m',entrant}(P) \quad (1.23)$$

où $\omega_{m'}$ correspond au coefficient de pondération relatif à la m' ième direction.

Pour le point P présenté sur la figure 1.13, cette relation s'exprime comme suit:

$$I_{m,W(itération\ i+1)}(P) = \epsilon I^0(P) + \frac{1-\epsilon}{\pi} \sum_{n \bullet \Omega_{m'} > 0} \omega_{m'} (\vec{n} \bullet \vec{\Omega}) I_{m',W(itération\ i)}(P) \quad (1.24)$$

4) Calcul des intensités centrales totales

$$I_{i,j} = \sum_{m=1}^M \omega_m I_{i,j,m} \quad (1.25)$$

5) Calcul des flux pariétaux

Exemple au point P

$$q(P) = \sum_{m=1}^M \omega_m (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}_m) I_{m,w}(P) \quad (1.26)$$

6) Calcul de la divergence du flux

$$-\nabla q_{i,j} = k [I_{i,j} - 4\pi I_{i,j}^o] \quad (1.27)$$

1.4.3.2.2 Géométrie bidimensionnelle complexe

La méthode aux ordonnées discrètes utilisée dans le cadre de cette thèse est la méthode développée par Sakami et al [16-17], qui permet d'étudier toute forme bidimensionnelle (la version tridimensionnelle est aussi développée [18]) simple ou complexe. Cette méthode introduit, comme les versions classiques, les intensités latérales des cellules, mais elle se particularise de par la nature de son maillage. En effet, afin de pouvoir étudier des géométries complexes, le maillage utilisé est non structuré et se compose d'un agencement de cellules triangulaires. Un exemple d'un tel agencement est illustré à la Figure 1.14.

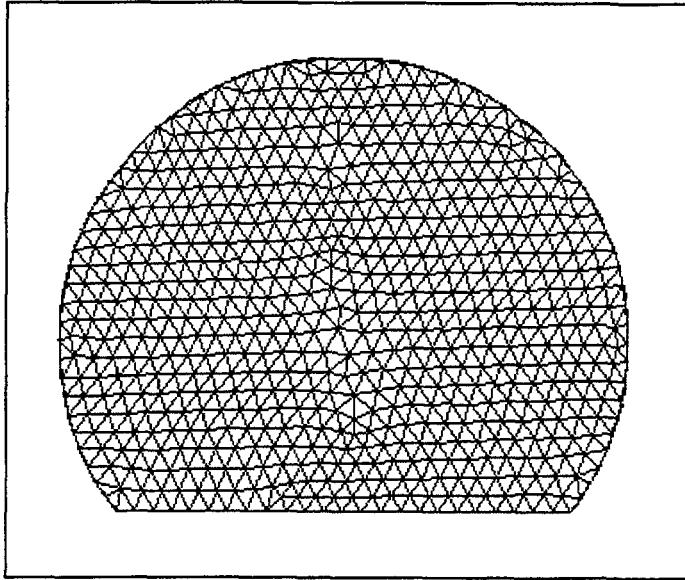


Figure 1.14: Exemple de maillage triangulaire non structuré

L'équation (1.18), exprimant le problème bidimensionnel classique correspondant à un maillage quadrilatéral, doit être modifiée pour le maillage triangulaire. Cette formulation s'obtient en transformant l'équation (1.9) pour un gaz non dispersant, rappelée ci-dessous:

$$\frac{1}{k(s)} \nabla [I(s, \vec{\Omega}) \vec{\Omega}] + I(s, \vec{\Omega}) = I^0(s)$$

En intégrant cette équation sur toute la surface S_i d'une cellule i du maillage, elle devient:

$$\iint_{S_i} \frac{1}{k(s)} \nabla [I(s, \vec{\Omega}) \vec{\Omega}] d\Sigma + \iint_{S_i} I(s, \vec{\Omega}) d\Sigma = \iint_{S_i} I^0(s) d\Sigma \quad (1.28)$$

Cette intégrale de surface se transforme ensuite comme suit en appliquant le théorème de Gauss:

$$\frac{1}{k_i S_i} \sum_{k=1}^3 (\vec{\Omega} \bullet \vec{n}_{i,k}) l_{i,k} I_{i,k}(\vec{\Omega}) + I_i(\vec{\Omega}) = I_i^0 \quad (1.29)$$

Les termes $k_i, I_i(\vec{\Omega}), \vec{n}_{i,k}, l_{i,k}, I_{i,k}(\vec{\Omega})$ introduits dans cette équation sont définis ci-dessous:

- k_i : le coefficient d'absorption moyen de la $i^{\text{ème}}$ cellule

- $I_i(\vec{\Omega})$: la luminance centrale de la $i^{\text{ème}}$ cellule

$$I_i(\vec{\Omega}) = \frac{1}{S_i} \iint_{S_i} I(s, \vec{\Omega}) d\Sigma \quad (1.30)$$

- $\vec{n}_{i,k}$: la normale extérieure du $k^{\text{ème}}$ côté de la $i^{\text{ème}}$ cellule

- $l_{i,k}$: la longueur du $k^{\text{ème}}$ côté de la $i^{\text{ème}}$ cellule

- $I_{i,k}(\vec{\Omega})$: la luminance latérale du $k^{\text{ème}}$ côté de la $i^{\text{ème}}$ cellule

$$I_{i,k}(\vec{\Omega}) = \frac{1}{l_{i,k}} \iint_{l_{i,k}} I(s, \vec{\Omega}) d\Sigma \quad (1.31)$$

L'expression de l'équation (1.29) pour une direction $\vec{\Omega}_m$ de la quadrature angulaire peut s'écrire comme suit:

$$I_{i,m} = I_i^0 - \frac{1}{k_i S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i,k,m} l_{i,k} I_{i,k,m} \quad (1.32),$$

les termes $\varphi_{i,k,m}$ correspondent aux produits scalaires $\vec{\Omega}_m \bullet \vec{n}_{i,k,m}$.

Elle met en évidence que, comme pour le maillage quadrilatéral, il est nécessaire de caractériser toutes les luminances latérales afin de pouvoir quantifier les luminances centrales. La technique utilisée pour calculer les intensités latérales directionnelles inconnues consiste ici à considérer que l'intensité de chacun des éléments de cette surface

provient d'un élément de surface d'un côté où l'intensité est connue. Son intensité peut alors être déduite en intégrant directement l'ETR le long du cheminement du rayonnement³:

$$I(s_f, \vec{\Omega}) = I(s_d, \vec{\Omega}) e^{-k_i(s_f - s_d)} + k_i \int_{s_d}^{s_f} I_i^0 e^{-k_i(s_f - s)} ds \quad (1.33),$$

ce qui s'écrit encore le long d'une des directions de la quadrature:

$$I_m(s_f) = I_m(s_d) e^{-k_i(s_f - s_d)} + I_i^0 (1 - e^{-k_i(s_f - s_d)}) \quad (1.34)$$

L'intensité latérale totale s'obtient ensuite en réalisant une moyenne des intensités de chacun des éléments de surface du côté considéré.

Exemple de calcul d'une intensité latérale

Soit une cellule i du maillage et une direction m données telles que la cellule possède une seule intensité latérale inconnue (face 1, Cf. Figure 1.15). Deux sections de cette face vont devoir être étudiées: la première (2) voit le rayonnement provenir de la face 2, la seconde (3) de la face 3. L'intensité latérale du côté 1 s'obtient en calculant la moyenne des intensités latérales ponctuelles $I_{i,1,m}(p_1)$ de ce côté.

L'expression analytique de l'intensité moyenne latérale $I_{i,1,m}$ est:

$$I_{i,1,m} = \frac{1}{l_{i,1}} \int_0^{l_{i,1}} I_{i,1,m}(p_1) dp_1 \quad (1.35)$$

Soit encore en considérant séparément les rayonnements provenant des côtés 2 et 3:

$$I_{i,1,m} = \frac{1}{l_{i,1}} \left[\int_0^{l_{i,1}-d} I_{i,1,m}(p_1) dp_1 + \int_{l_{i,1}-d}^{l_{i,1}} I_{i,1,m}(p_1) dp_1 \right] \quad (1.36)$$

³ les indices d et f correspondent respectivement à départ et final

En utilisant la relation (1.34), (1.36) peut se reformuler de la manière suivante [17]:

$$\begin{aligned} I_{i,1,m} &= \frac{l_{i,1}-d}{l_{i,1}l_{i,3}} \int_0^{l_{i,3}} [I_{i,3,m} e^{-k_i p_3} + I_i^0 (1 - e^{-k_i p_3})] dp_3 \\ &+ \frac{d}{l_{i,1}l_{i,2}} \int_0^{l_{i,2}} [I_{i,2,m} e^{-k_i p_2} + I_i^0 (1 - e^{-k_i p_2})] dp_2 \end{aligned} \quad (1.37)$$

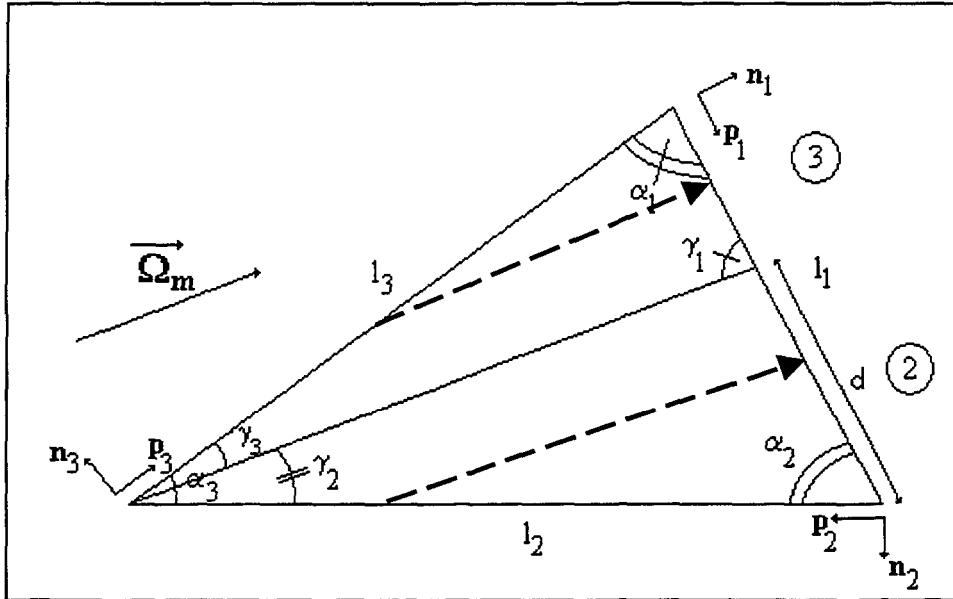


Figure 1.15: Obtention de l'intensité latérale inconnue du côté 1 à partir de celles des deux autres côtés

Ou encore, en utilisant les angles définis sur la figure 1.15:

$$I_{i,1,m} = I_{i,2,m} \frac{\sin \alpha_1 \sin \gamma_2}{\sin \alpha_3 \sin \gamma_1} e^{-T} + I_{i,3,m} \frac{\sin \alpha_2 \sin \gamma_3}{\sin \alpha_3 \sin \gamma_1} e^{-T} + I_i^0 (1 - e^{-T}) \quad (1.38)$$

$$\text{avec } e^{-T} = \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} \text{ et } \tau = \frac{k_i l_{i,2}}{\sqrt{\mu^2 + \xi^2}} \frac{\sin \alpha_2}{\sin \gamma_1} = \frac{k_i l_{i,3}}{\sqrt{\mu^2 + \xi^2}} \frac{\sin \alpha_1}{\sin \gamma_1}$$

Des expressions similaires à l'équation (1.37) sont obtenues pour les autres secteurs angulaires (Ω_m) pour lesquels les intensités latérales inconnues pourront être $I_{i,1,m}$ et/ou $I_{i,2,m}$ et/ou $I_{i,3,m}$. Six différents cas sont à considérer; ils sont illustrés sur les figures 1.16 (a), (b),

(c), (d), (e) et (f). Les trois premières figures correspondent aux configurations pour lesquelles une seule intensité latérale est inconnue, les trois suivantes aux configurations pour lesquelles deux intensités latérales sont inconnues.

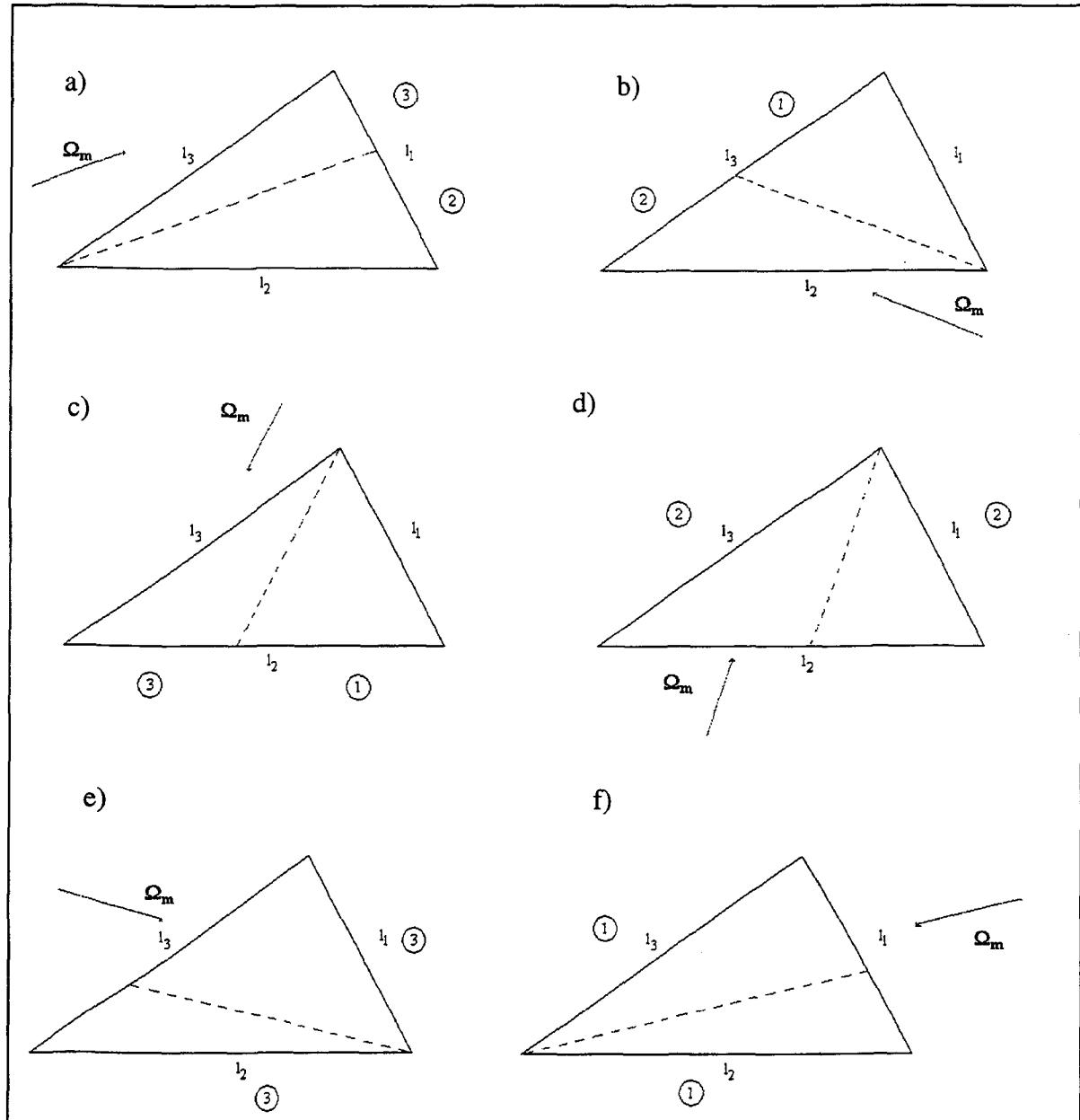


Figure 1.16: Illustration des six cas possibles pour le calcul des intensités latérales inconnues

Comme pour le cas du maillage quadrilatéral, les calculs des intensités latérales inconnues et des intensités centrales sont couplés, et il est nécessaire d'utiliser une méthode itérative afin de pouvoir calculer ces grandeurs. Cependant, du fait de la nature non structurée du maillage, les cellules ne sont plus ordonnées de façon consécutive. En conséquence, une cellule peut voir ses intensités latérales et centrale recalculées à partir d'intensités latérales d'une cellule voisine dont les intensités n'ont pas été encore recalculées. Ce phénomène peut cependant être évité en recherchant, pour chaque direction \bar{Q}_m , un cheminement optimal ne tenant pas compte de la numérotation initiale des cellules, et qui soit tel que les intensités latérales inconnues de la $(i+1)^{\text{ème}}$ cellule de ce chemin puissent être totalement calculées à partir des i premières cellules déjà étudiées. Considérons le maillage de la figure 1.17 a, qui est composé de 7 cellules. Pour une direction \bar{Q}_m quelconque, les seules intensités latérales connues initialement sont celles des côtés correspondant aux conditions limites. Si l'ordre de numérotation du maillage est suivi, le premier pas de calcul consiste à calculer pour la cellule 1 l'intensité $I_{1,3,m}$ à partir de $I_{1,1,m}$ et $I_{1,2,m}$. Cependant l'intensité latérale du second côté doit être supposée puisqu'elle est alors encore inconnue. Ainsi, la valeur calculée pour $I_{1,3,m}$ ne correspond donc pas à sa véritable valeur. Par la suite, cette erreur se répercute sur le calcul de $I_{3,3,m}$... De nombreuses itérations sont alors nécessaires afin de corriger les erreurs introduites par les données manquantes initialement pour cet ordre de cheminement. Supposons maintenant que pour cette direction un ordre différent de numérotations, $\text{renum}(i,m)$ (renumérotation de la $i^{\text{ème}}$ cellule pour la direction \bar{Q}_m), soit aussi affecté aux 7 cellules du maillage; cet ordre est explicité sur la figure 1.17 (b). Si cet

ordre est suivi, à chaque pas de calcul, toutes les intensités latérales sont maintenant parfaitement quantifiées; il n'est plus alors nécessaire d'effectuer un calcul itératif.

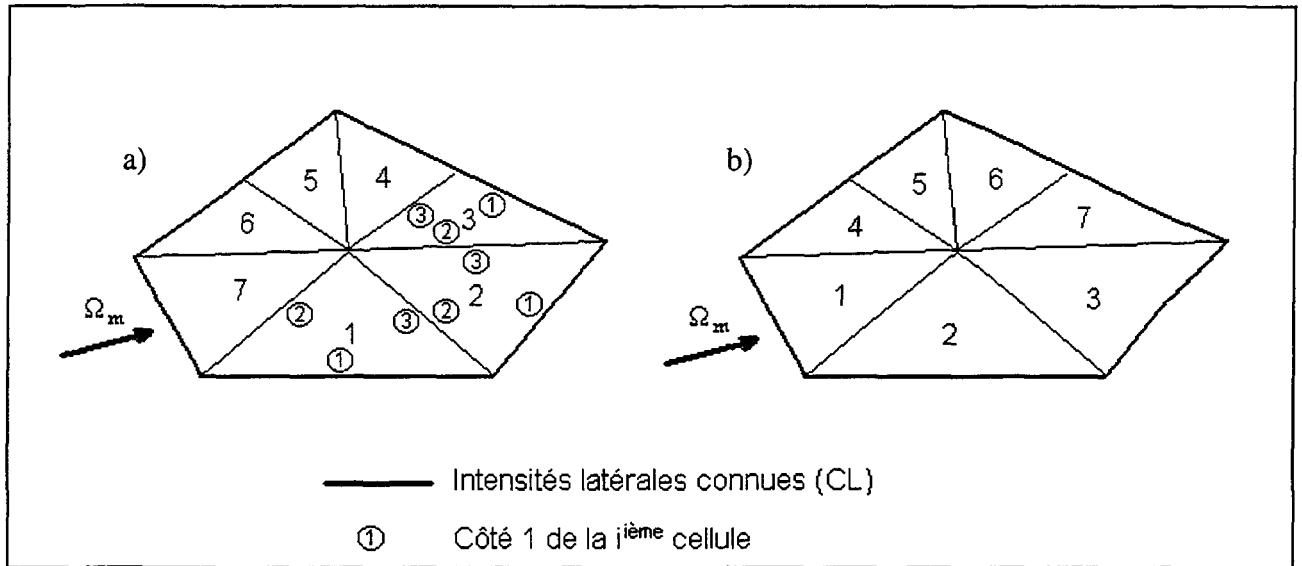


Figure 1.17: Renumérotation des cellules relative à la $m^{\text{ième}}$ direction

Algorithme de calcul

L'algorithme de calcul lié à cette version de la méthode aux ordonnées discrètes diffère sensiblement de celui présenté pour la version classique; il peut s'expliciter de la façon suivante:

- 1) Choix du maillage et de la quadrature
- 2) Renumérotation des cellules pour chaque direction
- 3) Entrée du champ de températures et des conditions limites
- 4) Jusqu'à convergence des intensités latérales:

- Pour chaque direction m , calcul des intensités latérales (Eq. 1.37), puis des intensités centrales (Eq. 1.32).

- Mise à jour des conditions limites (pour les directions m telles que $\vec{n} \cdot \vec{\Omega}_m < 0$)

$$I_{m,sortant}(P) = \varepsilon I^0(P) + \frac{1-\varepsilon}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega}_m > 0} \omega_{m'}(\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) I_{m',entrant}(P)$$

Le critère de convergence est appliqué sur les intensités latérales:

$$\text{Max}_{i,k,m} \frac{|(I_{i,k,m})^n - (I_{i,k,m})^{n-1}|}{(I_{i,k,m})^n} \leq \varepsilon$$

5) Calcul des intensités centrales totales

$$I_i = \sum_{m=1}^M \omega_m I_{i,m} \quad (1.39)$$

6) Calcul du flux aux parois de l'enceinte

$$q = \sum_{m=1}^M \omega_m \varphi_{i,k,m} I_{i,k,m} \quad (1.40)$$

7) Calcul de la divergence du flux

$$-\nabla q_i = k [I_i - 4\pi I_i^o] \quad (1.41)$$

1.4.4 Conclusion

La méthode aux ordonnées discrètes est une méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif qui allie rapidité et précision de résultats; pour ces raisons, elle est choisie pour les études mono et bidimensionnelles de cette thèse. Différentes variantes de cette méthode sont disponibles, cependant afin de pouvoir étudier des géométries complexes (Cf. Partie IV), la variante retenue est celle développée par Sakami et al, bien qu'elle nécessite un temps de convergence plus important pour des géométries simples. Deux familles de quadratures seront par ailleurs utilisées: les quadratures S_N et T_N .

CHAPITRE 2

LA MODELISATION DES GAZ REELS

2.1 Introduction

La modélisation de gaz réels contenant de la vapeur d'eau ou du dioxyde de carbone par un gaz gris fut la première modélisation usuellement utilisée en combustion dans les années 70-80. Depuis, diverses autres méthodes ont été développées afin de reproduire le comportement de ces gaz. Certaines cherchent à modéliser ce comportement sur des intervalles du nombre d'onde, elles sont nommées les méthodes de bandes, d'autres sur tout le domaine spectral, ce sont les méthodes globales. Afin de vérifier la validité de chacun de ces modèles, des comparaisons doivent être effectuées avec des résultats de référence qui peuvent être trouvés soit par expérimentation, soit avec une méthode éprouvée, soit dans la littérature (leur validité ayant alors été vérifiée).

2.2 Une méthode de référence: le modèle raie par raie

La modélisation raie par raie est la méthode de référence pour les calculs de transferts radiatifs dans les gaz non gris. Elle consiste tout d'abord à analyser chaque raie spectrale et à en dégager les caractéristiques intrinsèques:

- sa position ν_r
- son profil $F(\nu - \nu_r)$ (Figure. 2.1)

- sa demi-largeur spectral γ_r à mi-hauteur (Figure 2.1)
- son intensité S_r

Ces données permettent par la suite de connaître les coefficients d'absorption pour des intervalles élémentaires d'environ 10^{-2} cm^{-1} de largeur, puis de calculer les transferts de chaleur qui ont lieu sur ceux-ci.

2.2.1 Les profils de raie et leur demi-largeur

Une raie est la visualisation d'une transition énergétique au sein des molécules gazeuses ayant lieu pour un nombre d'onde ν_r , caractéristique du photon interagissant (Cf. Chapitre 1). Cependant, aucune raie n'est purement monochromatique et possède un étalement spectral. Celui-ci peut avoir plusieurs origines, qui sont explicitées ci-dessous. La connaissance de cet étalement permet de caractériser la raie (profil, demi-largeur) puis de calculer l'intensité qui lui est associée.

2.2.1.1 Elargissement naturel

Chaque niveau d'énergie possède un temps de vie fini, régi par les phénomènes d'émission spontanée. La largeur naturelle spectrale de la raie est définie par $\Delta\nu = \frac{\Delta E}{hC}$ où ΔE correspond à la différence des deux niveaux énergétiques, h à la constante de Planck et C à la célérité dans le milieu gazeux. Pour les élargissements naturels, les écarts énergétiques sont très faibles si bien que $\Delta\nu$ est de l'ordre de 10^{-8} cm^{-1} [1-2]. Ils peuvent être négligés devant les autres types d'élargissement.

2.2.1.2 Elargissement collisionnel

Cet élargissement est dû à la perturbation de la molécule active par son environnement.

Une molécule dans un état 1 passe dans un état 2 sous l'effet des interactions de type atome-atome à courte distance ou électronique à grande distance.

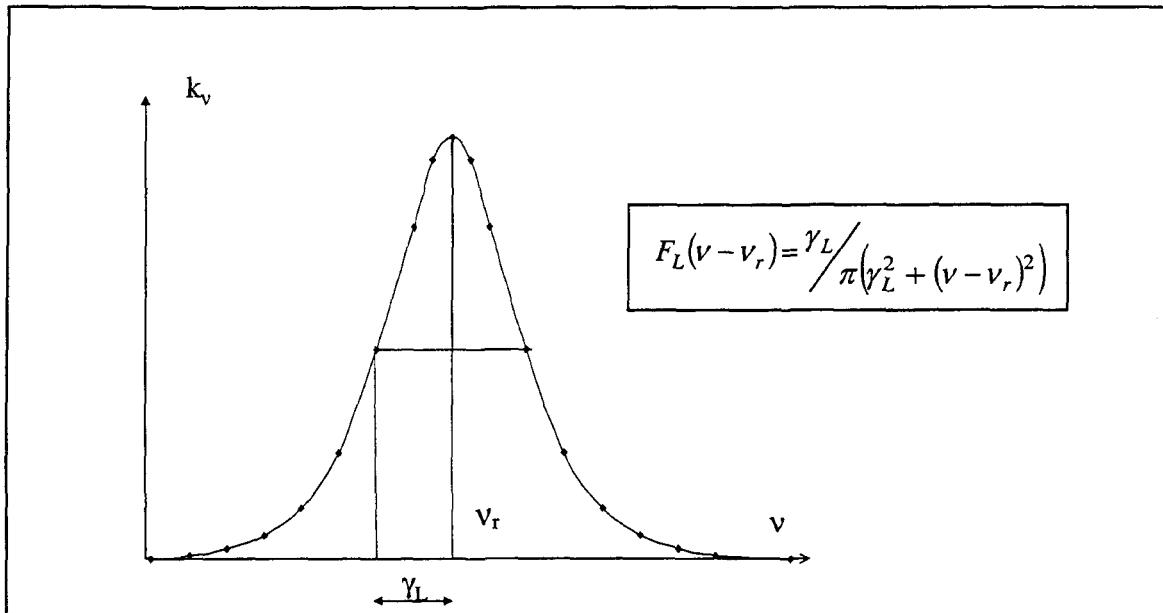


Figure 2.1: Profil de Lorentz d'une raie

On associe à ces interactions un profil Lorentzien [2, 23]. L'ordre de grandeur des largeurs des raies de Lorentz est 10^{-2} cm^{-1} . L'expression de la demi-largeur est assez complexe et dépend des propriétés intrinsèques des molécules perturbatrices [24].

2.2.1.3 Elargissement Doppler

Cet élargissement provient du fait que l'émission ou l'absorption d'un photon a lieu dans le référentiel de la molécule active, alors que le phénomène est observé dans le référentiel du laboratoire, par rapport auquel les molécules sont généralement animées

d'une distribution de type Maxwell-Boltzmann.

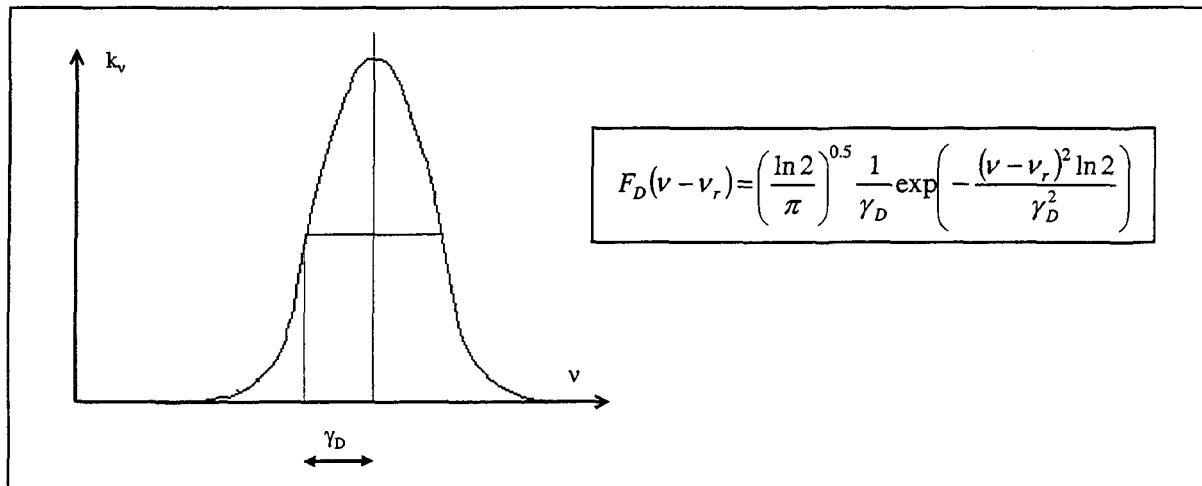


Figure 2.2: Profil Doppler d'une raie isolée

$$\text{La demi-largeur est définie par } \gamma_D = \frac{v_r}{c} \left(\frac{2kT}{m} \ln 2 \right)^{0.5}, \quad (2.1)$$

m étant la masse molaire de la molécule active.

On peut cependant négliger l'influence de l'élargissement Doppler devant celui de Lorentz tant que la demi-largeur γ_L est supérieure à γ_D [1]. Cette hypothèse de modélisation peut typiquement être utilisée pour des calculs de transferts radiatifs dans des cas industriels de combustion. A titre d'exemple, pour du CO₂ pur à 300 K et pour une pression de 1 atm, γ_L est de l'ordre de $7 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ tandis que γ_D vaut $2 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Cependant cette hypothèse n'est plus valable pour des études en métrologie. Il est alors nécessaire d'utiliser d'autres profils, tels que ceux de Voigt, ou de Stark [1-3].

2.2.2 Intensité d'une raie isolée

L'intensité d'une raie s'exprime en fonction du coefficient d'absorption au nombre d'onde central de la raie k_{ν_r} (en cm^{-1}) par:

$$S_r = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} k_{\nu_r} d\nu \quad (2.2)$$

où n est le nombre de molécules par unité de volume de gaz participant.

En introduisant la fonction F_L qui caractérise l'évolution du coefficient d'absorption en

fonction du nombre d'onde et qui est normalisée: $\int_{-\infty}^{+\infty} F_L(\nu - \nu_r) d\nu = 1$, on peut exprimer S_r

comme suit:

$$S_r = \frac{k_{\nu_r}}{nF(\nu - \nu_r)} \quad (2.3)$$

Le profil de la raie étant connu, ainsi que n , la seule inconnue est le coefficient k_{ν_r} . Ce coefficient peut être en fait calculé à partir des coefficients d'Einstein. On peut en effet prouver (Annexe A) que l'ETR pour un gaz participant non dispersif s'exprime pour une raie isolée comme suit:

$$\frac{dI_{\nu}}{ds} = h\nu F(\nu - \nu_r) \left[\underbrace{\frac{A_{21}}{4\pi} N_2}_{\text{émission spontanée}} + \underbrace{B_{21} \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) \frac{1}{c} I_{\nu}}_{\text{émission apparente}} \right] \quad (2.4)$$

où g_1 , g_2 , N_1 et N_2 sont respectivement les fonctions de dégénérescence et les populations des états 1 et 2.

L'expression de l'émission apparente étant $\kappa_{\nu} I_{\nu}$, l'expression de S_r devient en utilisant les

équations (2.3) et (2.4):

$$S_r = \frac{h\nu_r}{c} B_{21} \left(\frac{N_2}{n} - \frac{g_2}{g_1} \frac{N_1}{n} \right) \quad (2.5)$$

2.2.3 Calcul du coefficient d'absorption

Pour un gaz réel, les raies ne sont pas isolées et un chevauchement des élargissements spectraux est observé. La méthode raie par raie consiste à subdiviser le spectre en sous-intervalles de 10^{-2} cm $^{-1}$ de largeur et de calculer le coefficient d'absorption qui lui est associé en additionnant les contributions de toutes les raies r de tous les constituants i coexistant dans cette bande $\Delta\nu$.

$$\kappa_\nu = \sum_i \sum_r F(\nu - \nu_r) S'_r x_i p \quad (2.6)$$

où p est la pression totale

x_i est fraction molaire du constituant i

$$S'_r \text{ correspond à } \frac{S_r}{kT}$$

Des limitations existent néanmoins lors de l'application du principe d'additivité; sa validité a été mise en défaut au niveau des têtes de bandes ou des ailes lointaines du profil, ou pour de hautes pressions, ou de hautes températures (2 000K - 3 000K) ou pour des trajets atmosphériques (chemin optique trop important). Des ajustements ont alors été apportés [23], en introduisant une fonction correctrice χ_ν .

Connaissant les valeurs du coefficient d'absorption pour chacune des bandes élémentaires, il est possible ensuite de déterminer les transferts de chaleur par

rayonnement. Cependant, l'étude d'un gaz contenant de la vapeur d'eau, dont le spectre évolue sur $9\,000\text{ cm}^{-1}$, à l'aide d'un calcul raie par raie nécessite environ 10^6 subdivisions spectrales de largeur de 10^{-2} cm^{-1} . Des calculs de transferts radiatifs avec cette modélisation ne peuvent donc pas être utilisés de façon pratique dans le domaine industriel. Ces calculs servent généralement de référence pour des méthodes approchées.

2.3 Les méthodes approchées

Lors des transferts radiatifs, on cherche à caractériser des grandeurs (le flux pariétal, la divergence du flux ...) qui doivent être intégrées sur tout le domaine spectral. On peut distinguer deux grandes classes de modèles approchés qui permettent de les calculer, d'une part, les modèles de bandes et d'autre part, les modèles globaux. Le concept des modèles de bandes est de subdiviser le domaine spectral en intervalles tels que, sur ceux-ci, les propriétés du gaz, des particules et des parois puissent être considérées constantes. Selon la largeur des intervalles, le modèle utilisé sera soit à bandes étroites pour lequel la largeur $\Delta\nu$ est généralement de l'ordre de 25 cm^{-1} , soit à bandes larges pour lequel $\Delta\nu$ peut atteindre quelques centaines de cm^{-1} . Les modèles globaux considèrent, quant à eux, les propriétés radiatives constantes sur tout le spectre ; ils ne fournissent que des flux et des puissances volumiques totaux.

2.3.1 Les modèles à bandes étroites

Les modèles à bandes étroites peuvent être classés selon leur formulation, soit en transmissivité moyenne sur chaque bande, soit en coefficient d'absorption. La relation entre

ces deux paramètres est rappelée ci-dessous:

$$\tau_\nu(s' \rightarrow s) = \exp\left(-\int_{s'}^s k_\nu(s'') ds''\right) \quad (2.7)$$

L'équation de transfert radiatif explicitée au chapitre précédent est formulée en coefficient d'absorption; elle peut cependant être modifiée pour être formulée en transmissivité. Cette transformation pour un milieu émettant-absorbant est présentée ci après.

En intégrant l'ETR le long du chemin optique, on obtient, en supposant l'enceinte noire:

$$I_\nu(s) = I_\nu(0) \exp\left(-\int_0^s k_\nu(s') ds'\right) + \int_0^s I_\nu^o(s') \exp\left(-\int_{s'}^s k_\nu(s'') ds''\right) k_\nu(s') ds' \quad (2.8)$$

En introduisant la transmissivité monochromatique

$$\tau_\nu(s' \rightarrow s) = \exp\left(-\int_{s'}^s k_\nu(s'') ds''\right) \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \tau_\nu(s' \rightarrow s)}{\partial s'} = \frac{e^{-\int_{s'}^s k_\nu(s'') ds''}}{\partial s'} = \frac{e^{s'}}{\partial s'} = k_\nu(s') e^{s'} = k_\nu(s') \tau_\nu(s' \rightarrow s) \quad (2.10)$$

il devient possible de déduire la formulation de l'ETR en transmissivité moyenne:

$$I_\nu(s) = I_\nu(0) \tau_\nu(0 \rightarrow s) + \int_0^s I_\nu^o(s') \frac{\partial \tau_\nu(s' \rightarrow s)}{\partial s'} ds' \quad (2.11)$$

Selon la modélisation des gaz réels utilisée, l'une ou l'autre de ces formulations peut être considérée. Les modèles à bandes étroites présentés dans cette partie sont, d'une part, les modèles statiques à bandes étroites (SNB) exprimés en transmissivité moyenne, et d'autre part, la méthode de fonction cumulée du coefficient d'absorption (CK) et une méthode hybride SNB-CK utilisant les données de la méthode SNB et les concepts de la méthode

CK, toutes deux exprimées en coefficient d'absorption.

Les codes de calcul développés au cours de cette thèse, utilisant la formulation en coefficients d'absorption, ne sont pas adaptés pour un couplage avec la méthode SNB. Ce modèle n'est donc que brièvement décrit dans cette thèse.

2.3.1.1 Les modèles statistiques à bandes étroites (SNB)

Ce modèle fut développé initialement par Elsasser au cours de ses observations des spectres de gaz diatomiques tels que le CO et le NO [2]: il a cherché à modéliser ces spectres, sur des petits intervalles de nombre d'onde, par des raies spectrales lorentziennes, régulièrement espacées, de même intensité et de même demi-largeur γ_L (Figure. 2.3).

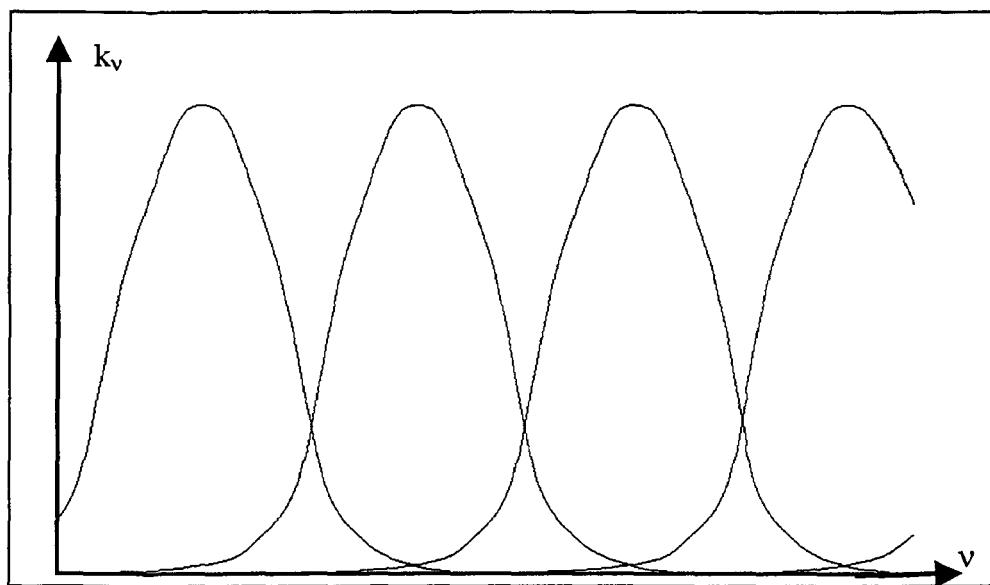


Figure 2.3 Modèle d'Elsasser

Ce modèle s'est avéré valide pour de faibles épaisseurs optiques et de faibles températures mais est mal adapté pour la modélisation de spectres complexes comme celui

du CO₂ et de H₂O [1]. En effet pour ces deux gaz, des superpositions de raies sont observées, et leurs intensités ne sont pas constantes en fonction du nombre d'onde. Il a alors fallu avoir recours à des hypothèses statistiques afin de modéliser correctement ces gaz; ces hypothèses sont les suivantes:

- chaque intervalle $\Delta\nu$ contient un grand nombre de raies
- les positions des centres des N raies sont aléatoires dans $\Delta\nu$
- les intensités des raies suivent une loi de distribution probabiliste $P(S_r)$
- l'absorption dans $\Delta\nu$ est exclusivement due aux N raies centrées à l'intérieur de $\Delta\nu$
- les N raies ont la même sorte de profil spectral

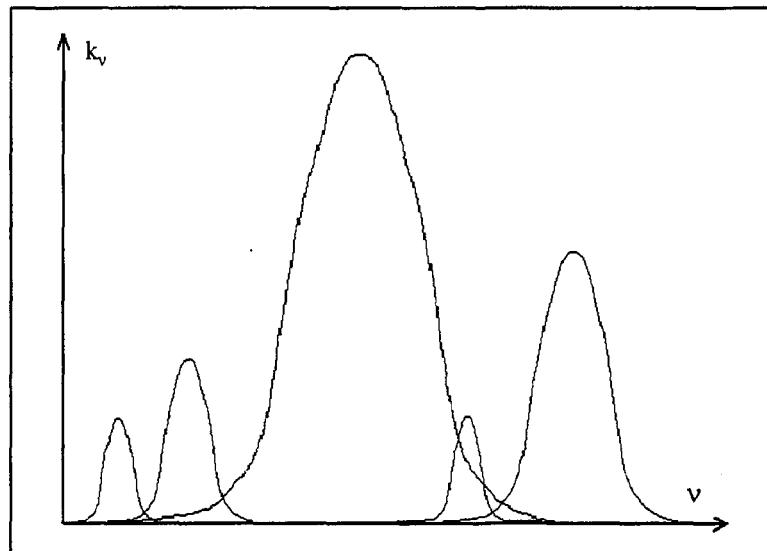


Figure 2.4: Modèle statistique

Diverses lois de distribution des intensités ont été proposées selon les cas d'études envisagés.

En voici deux exemples:

- la loi exponentielle de Goody (1952): $P(S_r) = \frac{1}{\sigma} e^{-\frac{S_r}{\sigma}}$ ⁽⁴⁾
- la loi inverse exponentielle de Malkmus (1967): $P(S_r) = \frac{1}{S_r} e^{-\frac{S_r}{\sigma}}$ (2.12)

Une liste plus détaillée de ces distributions est disponible dans les références [23-26].

Pour les études en milieu anisotherme hétérogène, le modèle le plus performant utilise d'une part la loi exponentielle tronquée due à Malkmus et d'autre part l'approximation de Curtis-Godson [24]. À l'aide de ces lois, une base de données fournissant les transmissivités moyennes sur 367 bandes de longueur d'onde de 25 cm^{-1} de largeur a été développée [27], et des calculs comparatifs monodimensionnels avec des modèles globaux et d'autres modèles de bandes sont disponibles dans les références [28-29]. L'expression des transmissivités moyennes sur les bandes étroites pour un gaz unique participant est:

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(L) = \exp\left[-2 \frac{\gamma_{\Delta\nu}}{\delta_{\Delta\nu}} \left(\sqrt{1 + xpLk_{\Delta\nu} \frac{\gamma_{\Delta\nu}}{\delta_{\Delta\nu}}} - 1 \right)\right] \quad (2.13)$$

pour lesquelles sont définis tous les coefficients $\gamma_{\Delta\nu}, \delta_{\Delta\nu}$ et $k_{\Delta\nu}$, qui correspondent respectivement à la largeur moyenne des raies, à l'espacement moyen entre deux raies et au coefficient moyen d'absorption. Les travaux les plus récents [22, 28-30] utilisant la méthode SNB se servent des valeurs de ces paramètres.

L'expression (2.13) peut par ailleurs s'écrire de façon simplifiée comme suit:

⁴ S_r représente l'intensité d'une raie ; σ représente quant à lui l'intensité moyenne, $\sigma = \int_0^{\infty} P(S_r) S_r dS$

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(L) = \exp\left[-\frac{\pi B}{2}\left(\sqrt{1+\frac{4SL}{\pi B}} - 1\right)\right] \quad (2.14)$$

où les grandeurs B et S sont définies par:

$$\begin{cases} B = \frac{4}{\pi} \frac{\gamma_{\Delta\nu}}{\delta_{\Delta\nu}} \\ S = xp k_{\Delta\nu} \end{cases} \quad (2.15)$$

2.3.1.2 Le modèle de distribution cumulée du coefficient d'absorption (CK)

Une autre modélisation à bandes étroites, formulée en coefficients d'absorption, peut être utilisée afin de caractériser les échanges radiatifs dans une enceinte; c'est le modèle de distribution cumulée du coefficient d'absorption. Cette méthode se base sur deux concepts fondamentaux. Le premier est lié au fait que la connaissance de la position spectrale des raies dans un intervalle $\Delta\nu$ n'est pas nécessaire pour calculer les grandeurs radiatives moyennées sur cet intervalle. Le second est qu'en redistribuant les coefficients d'absorption, on va parvenir à transformer le spectre initial qui a une dynamique très forte et qui est non monotone (Figures 1.7 et 2.5), en un pseudo spectre monotone de dynamique beaucoup plus faible. Ceci permettra une intégration plus aisée en fonction du nombre d'onde.

2.3.1.2.1 Description de la méthode

La redistribution du coefficient d'absorption consiste à utiliser deux changements de variables d'intégration afin de calculer l'équation de transfert radiatif, tout d'abord la

fonction de distribution du coefficient d'absorption, puis la fonction cumulée de distribution du coefficient d'absorption.

a. La fonction de distribution du coefficient d'absorption $f_{\Delta\nu}(k)$

Le premier changement de variable consiste à introduire la fonction de distribution $f_{\Delta\nu}(k)$ propre à chaque bande étroite . Ce changement est [3, 4, 24]:

$$d\nu \rightarrow \Delta\nu f_{\Delta\nu}(k) dk, \quad (2.16)$$

où :

- $\Delta\nu$ varie typiquement entre 20 et 50 cm^{-1} , afin que puissent être considérées constantes les propriétés diffusantes et la fonction de Planck
- $f_{\Delta\nu}(k)dk$ est la fraction de $\Delta\nu$ pour laquelle le coefficient d'absorption sera compris entre k et $k+dk$.

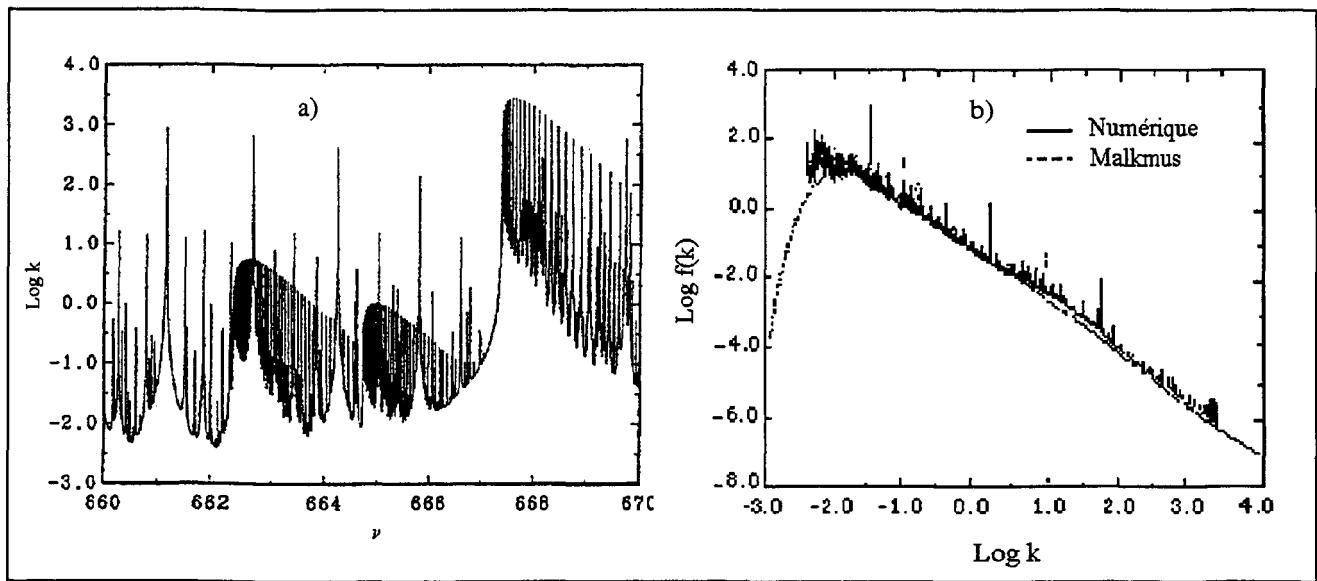


Figure 2.5 [4]: Transformation du spectre de la vapeur d'eau en utilisant la fonction de distribution du coefficient d'absorption $f_{\Delta\nu}(k)$.

Lacis et Oinas [4] ont présenté des évolutions de la fonction de redistribution pour le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. La figure 2.5 illustre, pour une bande spectrale de dioxyde de carbone comprise entre 660 et 670 cm⁻¹, la transformation du spectre d'absorption (Figure 2.5a) en un pseudo spectre correspondant à la fonction de redistribution du coefficient d'absorption (Figure 2.5b). Cette fonction est définie plus loin par l'équation 2.21. Les deux courbes de la figure 2.5b représentent les résultats trouvés d'une part à partir des données raies par raies (ligne continue) et d'autre part à partir du modèle statistique de Malkmus (ligne pointillée).

Par le biais de ce changement de variable, une fonction \bar{G} moyennée sur une bande

spectrale $\Delta\nu$, $\bar{G} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} G(k_\nu) d\nu$, s'exprime en fonction de f comme suit:

$$\bar{G} = \int_0^\infty f_{\Delta\nu}(k) G(k) dk \quad (2.17)$$

Cette relation permet de remplacer l'intégration sur ν , qui possède généralement une dynamique très forte, par une intégration sur les valeurs de k_ν , dont les variations sont beaucoup plus lentes.

b. La fonction de distribution cumulée du coefficient d'absorption $g_{\Delta\nu}(k)$

Cependant, ce premier changement de variable ne permet pas l'obtention d'une fonction monotone, et on ne peut pas trouver de bijection entre k et $f_{\Delta\nu}(k)$, qui permettrait par la suite une intégration simple en utilisant une quadrature numérique. Un second changement de variable se doit alors d'être introduit :

$$g_{\Delta\nu}(k) = \int_0^k f_{\Delta\nu}(k') dk' \quad \text{ou} \quad dg_{\Delta\nu}(k) = f_{\Delta\nu}(k) dk \quad (2.18)$$

où $g_{\Delta\nu}(k)$ est la fonction de distribution cumulée du coefficient d'absorption propre à l'intervalle spectral considéré. Il représente la probabilité que le coefficient d'absorption prenne une valeur inférieure à k dans $\Delta\nu$. La figure 2.6 illustre une construction schématique de la fonction $g_{\Delta\nu}(k)$.

$$\text{L'équation (2.17), en utilisant (2.18) devient: } \bar{G} = \int_0^{\infty} G(k) dg_{\Delta\nu}(k) \quad (2.19)$$

De par sa définition, $g_{\Delta\nu}(k)$ est une fonction monotone croissante variant de 0 à 1. Sa monotonie permet de calculer une fonction réciproque notée $k_{\Delta\nu}(g)$, qui représente l'évolution du coefficient d'absorption réordonné par valeurs croissantes en fonction du nombre adimensionné $g_{\Delta\nu}(k)$. L'équation (2.19) peut être résolue avec une précision accrue en utilisant une quadrature numérique et la fonction réciproque $k_{\Delta\nu}(g)$. La quadrature généralement conseillée est une quadrature de Gauss. Différents auteurs [3, 4, 23, 24] s'accordent sur le fait que le nombre de points minimal doit être compris entre 7 et 10.

\bar{G} sera donc calculée comme suit:

$$\bar{G} = \Delta\nu \sum_j \sum_{i=1}^N \tilde{\omega}_i G(k_{\Delta\nu_j}(g_i)) \quad (2.20)$$

où : - $k_{\Delta\nu_j}(g_i)$ est la valeur de k à l'abscisse g_i sur l'intervalle $\Delta\nu_j$
- N est le nombre de points de la quadrature
- $\tilde{\omega}_i$ est le poids de la quadrature à l'abscisse g_i

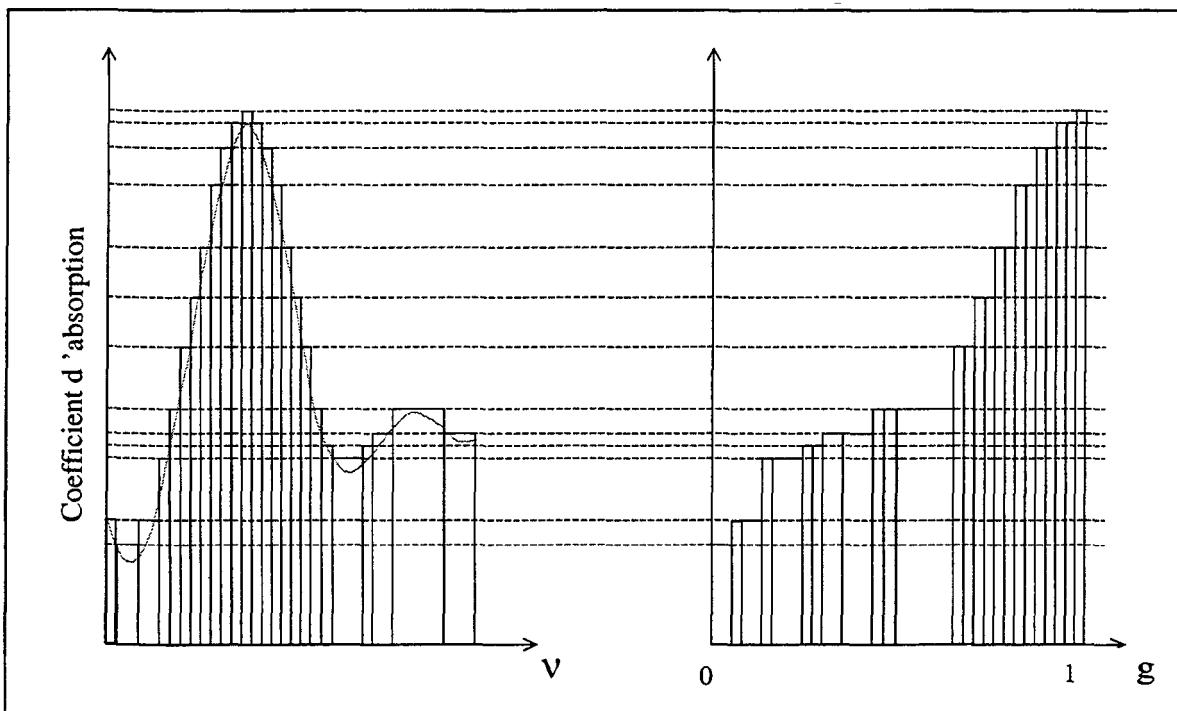


Figure 2.6 Construction schématique de la fonction de distribution cumulée

Voici un exemple (Figure 2.7) de transformation en fonction de la distribution cumulée réalisée par Rivière [23] pour la vapeur d'eau dans une bande étroite de 25 cm^{-1} .

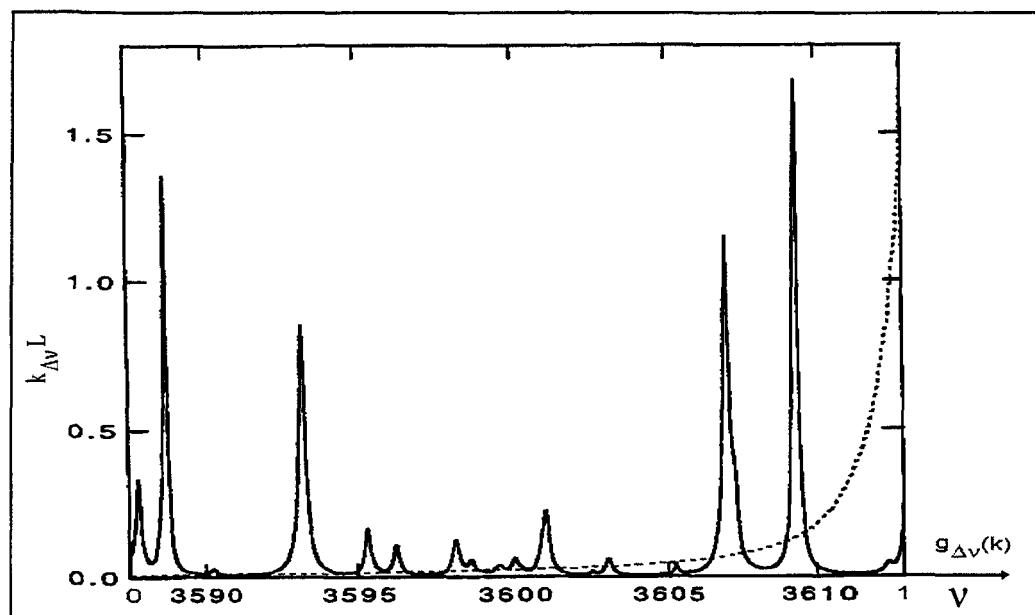


Figure 2.7 [23]: Fonction de distribution cumulée de k pour la vapeur d'eau à 300K (tracée en pointillée)

2.3.1.2.2 Calcul de la fonction de distribution cumulée de k

Le calcul de la fonction de distribution de k sur un intervalle $\Delta\nu$ nécessite une parfaite connaissance des différentes raies spectrales qui interagissent dans ce domaine. Deux voies peuvent être suivies afin de quantifier $f_{\Delta\nu}(k)$. La première est une méthode directe qui consiste à réordonner le spectre; la seconde utilise quant à elle les tables de paramètres développées pour la méthode SNB. L'expression de $g_{\Delta\nu}(k)$ s'obtient ensuite par intégration.

a. La méthode directe

La fonction $f_{\Delta\nu}$ peut s'obtenir en analysant directement des banques de données spectrales telles que Hitran [32] ou AFGL [33]. Le spectre de haute résolution doit tout d'abord être subdivisé en N domaines $\Delta\nu'$. La fonction de distribution $f_{\Delta\nu}(k_i)$ se calcule ensuite en recherchant tous les intervalles $\Delta\nu_j$ contenus dans $\Delta\nu$ pour lesquels le coefficient d'absorption k est compris entre k_i et $k_i + \Delta k_i$. Sa formulation mathématique est la suivante:

$$f_{\Delta\nu}(k_i) = \frac{1}{\Delta\nu} \sum_j^N \left| \frac{\Delta\nu_j}{\Delta k_i} \right| W(k_i, k_i + \Delta k_i) \quad (2.21)$$

où $W(k_i, k_i + \Delta k_i)$ est la fonction fenêtre, qui est nulle pour tout intervalle $\Delta\nu_j$ où k est extérieur à $[k_i, k_i + \Delta k_i]$ et qui vaut 1 sinon. La fonction de distribution cumulée $g_{\Delta\nu}(k_i)$

s'obtient ensuite en intégrant la fonction de distribution jusqu'à k_i : $g_{\Delta\nu}(k_i) = \int_0^{k_i} f_{\Delta\nu}(k_i) dk$

L'augmentation $\Delta g_{\Delta\nu}(k_i)$ correspondant à l'intervalle $[k_i, k_i + \Delta k_i]$ vaut ainsi

$$\Delta g_{\Delta\nu}(k_i) = f_{\Delta\nu}(k_i) * \Delta k_i.$$

b. La méthode hybride SNB-CK

Le concept de cette méthode s'appuie sur les travaux déjà effectués pour la méthode SNB. Comme spécifié dans la partie 2.3.1.1, des paramètres ont été tabulés par Soufiani et al [27] en utilisant le modèle exponentiel de Malkmus couplé avec l'approximation de Curtis-Godson afin de calculer initialement des transmissivités moyennes. Cependant, en utilisant une relation mathématique appropriée, ces paramètres deviennent adéquats au calcul des fonctions de distribution $f_{\Delta\nu}(k)$.

Cette relation est explicitée ci-dessous en se basant d'une part sur l'expression de la transmissivité moyenne:

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(L) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu}^{\infty} \exp(-k\nu L) d\nu \quad (2.22)$$

et d'autre part sur la relation entre $d\nu$ et la fonction de distribution :

$$d\nu = f_{\Delta\nu}(k) dk \Delta\nu. \quad (2.23)$$

En couplant (2.22) et (2.23), la relation suivante est obtenue:

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(L) = \int_0^{\infty} \exp(-kL) f_{\Delta\nu}(k) dk \quad (2.24)$$

Cette relation exprime le fait que la fonction de distribution $f_{\Delta\nu}(k)$ correspond à la transformée inverse de Laplace de la transmissivité moyenne $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(L)$. L'expression

analytique de $f_{\Delta\nu}(k)$ pour un gaz participant unique se calcule alors en inversant

$\bar{\tau}_{\Delta\nu}(L) = \exp\left[-\frac{\pi B}{2}\left(\sqrt{1+\frac{4SL}{\pi B}} - 1\right)\right]$ (Cf. Eq. 2.14). Le résultat obtenu est le suivant [4, 33-38]:

$$f_{\Delta\nu}(k) = \frac{1}{2} k^{-\frac{3}{2}} (BS)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{\pi B}{4}\left(2 - \frac{S}{k} - \frac{k}{S}\right)\right] \quad (2.25)$$

L'expression de la fonction cumulée $g_{\Delta\nu}(k)$ s'obtient ensuite en intégrant (2.25):

$$g_{\Delta\nu}(k) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{a}{\sqrt{k}} - b\sqrt{k}\right) \right] + \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{a}{\sqrt{k}} + b\sqrt{k}\right) \right] e^{\pi B} \quad (2.26)$$

avec

$$\begin{cases} a = \frac{1}{2} \sqrt{\pi BS} \\ b = \frac{1}{2} \sqrt{\pi \frac{B}{S}} \end{cases} \quad (2.27)$$

2.3.1.2.3 Versions de la méthode CK étudiées

Deux séries de coefficients sont étudiées dans cette thèse. La première série correspond à une version CK optimisée et la seconde à des versions hybrides SNB-CK utilisant les tabulations de la méthode SNB.

a. Version CK optimisée

Cette version est une variante, due à Taine et al [24], de la méthode CK initiale. Son objectif est de regrouper les bandes étroites de 25 cm^{-1} afin de former des bandes spectrales plus larges, et ainsi de diminuer le nombre de résolutions de l'ETR à effectuer. A l'aide de fonctions évaluant les variations de la fonction de Planck sur des regroupements de bandes

étroites, ces chercheurs ont défini une subdivision du spectre en bandes dont les largeurs varient entre 100 et 400 cm⁻¹. Le nombre de bandes pour le CO₂ (respectivement H₂O), initialement à 367 (respectivement 367), a ainsi pu être réduit à 21 (respectivement 43).

Sur chacune de ces bandes, ces chercheurs ont ensuite fourni des valeurs de référence du coefficient d'absorption, noté $k_{\Delta\nu_j}^*$. Ces coefficients de référence dépendent de trois paramètres: la température du milieu $T(s)$, le point de la quadrature considéré, et la fraction molaire du gaz participant $x(s)$; ils peuvent donc être écrits comme suit: $k_{\Delta\nu_j}^*(T, g, x)$. La tabulation de ces coefficients a été réalisée pour une quadrature de Gauss-Lobatto à 7 points (Tableau 2.1), une pression totale de 1 bar, 16 températures variant entre 300 et 2 500 K⁵ et 5 fractions molaires⁶. Une simplification est cependant apportée dans le cas du CO₂; en effet, pour ce gaz participant, la fraction molaire n'intervient pas pour le calcul des coefficients de référence et n'apparaîtra que pour le calcul du coefficient d'absorption réel (Eq. 2.29). Cette simplification est similaire à celle faite pour calculer les émissivités et les absorptivités totales dans les modèles à larges bandes. Les valeurs tabulées s'expriment sous la forme suivante:

- $k_{\Delta\nu_j}^*(T_i, g_k, x_l)$ avec $i=1\dots16$, $k=1\dots7$ et $l=1\dots5$ pour H₂O.
- $k_{\Delta\nu_j}^*(T_i, g_k)$ avec $i=1\dots16$, $k=1\dots7$ pour CO₂.

Si la température ou la fraction molaire (dans le cas de H₂O) du milieu ne correspond pas aux valeurs des tabulations, des interpolations doivent être effectuées. Ainsi pour une

⁵ Les températures T_i spécifiées dans les tables sont: 300, 375, 425, 500, 600, 700, 800, 900, 1 100, 1 300, 1 500, 1 700, 1 900, 2 100, 2 300, 2 500.

température T comprise entre les valeurs de référence T_i et T_{i+1} , la valeur de $k_{\Delta\nu_j}^*(T, g_k, x_l)$

est:

$$k_{\Delta\nu_j}^*(T, g_k, x_l) = k_{\Delta\nu_j}^*(T_i, g_k, x_l) \frac{T_{i+1} - T}{T_{i+1} - T_i} + k_{\Delta\nu_j}^*(T_{i+1}, g_k, x_l) \frac{T - T_i}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.28)$$

La valeur réelle du coefficient d'absorption $k_{\Delta\nu_j}$ est ensuite déduite en multipliant ces valeurs de référence par la fraction molaire x , une fonction de la température T , et la pression totale du milieu p:

$$k_{\Delta\nu_j}(g_i, T, x) = x p [T Q(T)]^{-1} k_{\Delta\nu_j}^*(g_i, T, x) \quad (2.29)$$

Les valeurs de référence $k_{\Delta\nu_j}^*(T_i, g_k, x_l)$ ainsi que la fonction $Q(T)$ sont disponibles aux références [23] et [27].

Tableau 2.1: Quadrature de Gauss-Lobatto à sept points

i	abscisse g_i	poids \tilde{w}_i
1	0	0.045
2	0.155405848	0.245
3	0.45	0.32
4	0.744594152	0.245
5	0.9	0.056111111
6	0.935505103	0.051248583
7	0.984494897	0.37640306

⁶ Les cinq fractions molaires sont: 0.01, 0.1, 0.4, 0.66, 1.

b. Version hybride SNB-CK

En utilisant l'équation (2.26) et les tables fournies par Taine et al [27] permettant de calculer les variables B et S sur chaque bande étroite non transparente de largeur 25 cm^{-1} , il est possible de définir sur chaque bande l'expression de $g_{\Delta\nu}(k)$, qui va permettre par la suite de calculer les coefficients d'absorption $k_{\Delta\nu}(g_i)$ nécessaires pour la résolution de l'ETR. Il convient tout d'abord de choisir une quadrature numérique; pour cette méthode une parfaite liberté est laissée à l'utilisateur sur le choix de la quadrature. Les plus classiques sont celles de Gauss-Lobatto ou de Gauss-Legendre (Annexe B).

Un second choix laissé à la discréption de l'utilisateur est celui de résoudre l'ETR sur chaque bande étroite de 25 cm^{-1} de largeur (SNB-CK 1) ou sur des bandes larges regroupant des bandes étroites successives - toutes les bandes étroites ayant la même largeur - (Figure 2.8). Si un regroupement des bandes est désiré, un calcul préliminaire de la fonction cumulée $g_{\Delta\nu}^M(k)$ propre à la large bande doit être effectué, M correspondant au nombre de bandes dans le regroupement; ce calcul est présenté ci après.

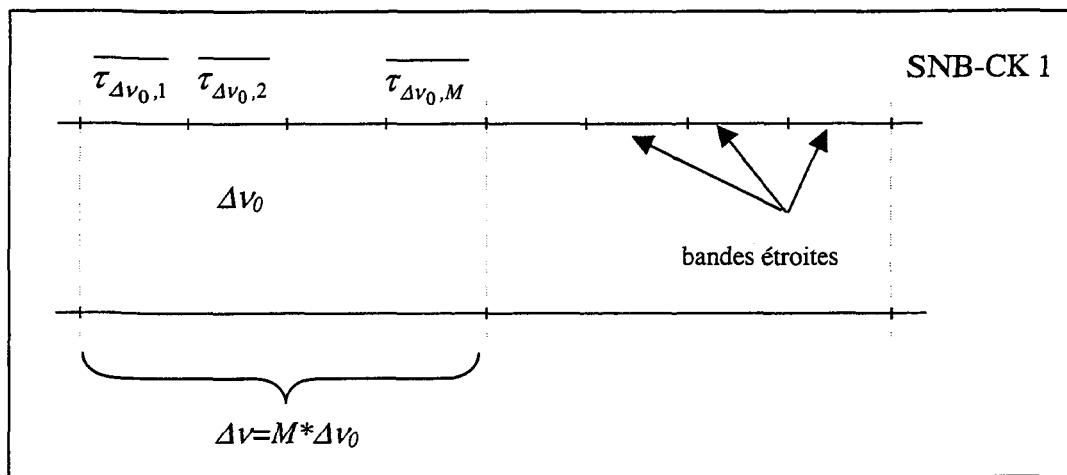


Figure 2.8: Regroupement de M bandes étroites identiques en une large bande

Soit M bandes de même largeur $\Delta\nu_0$, la transmissivité moyenne sur l'intervalle spectral $\Delta\nu$ regroupant ces M bandes est définie par:

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}^M}(L) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp(-k_\nu L) d\nu \quad (2.30)$$

En utilisant la propriété de linéarité de l'intégrale et le fait que toutes les bandes sont de même largeur, cette expression devient:

$$\overline{\tau_{\Delta\nu}^M}(L) = \frac{1}{M \times \Delta\nu_0} \sum_{i=1}^M \int_{\Delta\nu_0,i} \exp(-k_\nu L) d\nu = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \overline{\tau_{\Delta\nu_0,i}}(L) \quad (2.31)$$

L'utilisation de la linéarité de la transformation inverse de Laplace permet ensuite d'exprimer la fonction de distribution de k sur $\Delta\nu$ en fonction des fonctions de distribution de chaque bande étroite:

$$\begin{aligned} f_{\Delta\nu}^M(k) &= L^{-1}\left(\overline{\tau_{\Delta\nu}^M}(L)\right) \\ &= L^{-1}\left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \overline{\tau_{\Delta\nu_0,i}}(L)\right) \\ &= \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M L^{-1}\left[\overline{\tau_{\Delta\nu_0,i}}(L)\right] \\ &= \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f_{\Delta\nu_0,i}(k) \end{aligned} \quad (2.32)$$

On peut ensuite déduire l'expression de la fonction de cumulation $g_{\Delta\nu}^M(k)$ sur $\Delta\nu$:

$$\begin{aligned} g_{\Delta\nu}^M(k) &= \int_0^k f_{\Delta\nu}^M(x) dx \\ &= \int_0^k \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^M f_{\Delta\nu_0,i}(x) \right] dx \\ &= \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \int_0^k f_{\Delta\nu_0,i}(x) dx \end{aligned} \quad (2.33)$$

Ainsi,

$$g_{\Delta\nu}^M(k) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M g_{\Delta\nu_0,i}(k) \quad (2.34)$$

Différents regroupements de bandes sont explicités et analysés au chapitre 3: d'une part, des regroupements uniformes possédant toujours le même nombre M de bandes étroites dans chaque bande où s'effectue la résolution, et d'autre part des regroupements tenant compte des bandes d'émission primaires du CO₂.

Lorsque le choix des N couples de points (g_i, ω_i) et celui du regroupement ou non de bandes sont effectués, les coefficients $k_{\Delta\nu, g_i}$ sont calculés en utilisant une méthode de dichotomie (ex: méthode de Newton-Raphson) (Figure 2.9); en effet, du fait de la complexité de la fonction $g_{\Delta\nu}(k)$, aucune formulation analytique de $k_{\Delta\nu}(g)$ n'est connue.

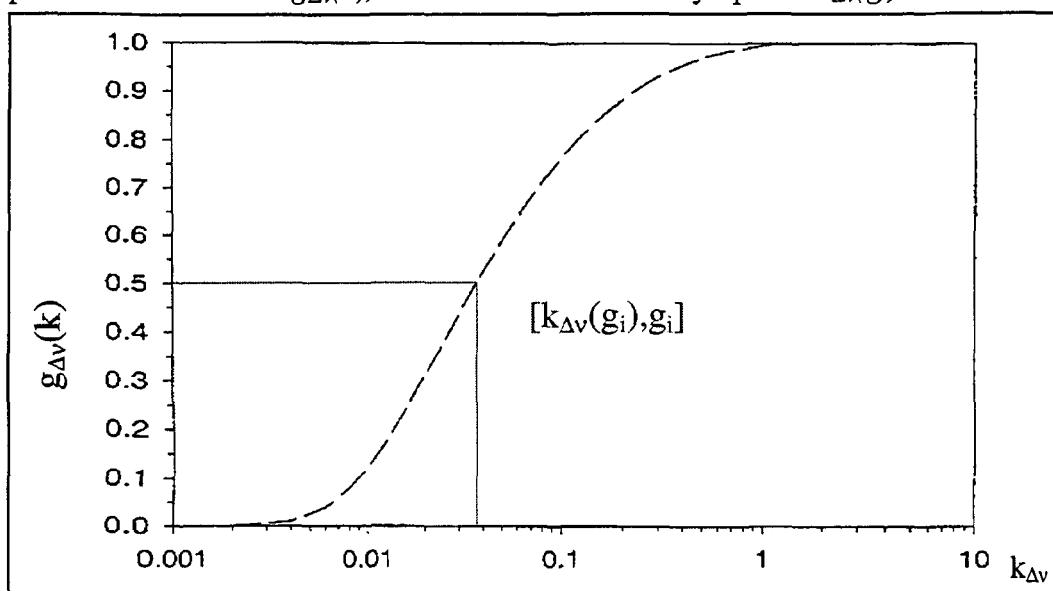


Figure 2.9: Évolution du pseudo nombre d'onde en fonction du coefficient d'absorption

2.3.1.2.4 Résolution de l'ETR à l'aide de la méthode CK

a. Cas d'un seul gaz participant non dispersif

L'ETR s'écrit, en utilisant la formule propre à la méthode des ordonnées discrètes :

$$\forall m \in \{1, \dots, M\}, \quad \frac{\partial I_{m,\nu}(s)}{\partial s} = -k_\nu(s)I_{m,\nu}(s) + k_\nu(s)I_\nu^0(s) \quad (2.35)$$

Soit encore, en utilisant la formulation de la méthode des ordonnées discrète proposée au chapitre 1, pour une géométrie quelconque (Cf. Eq. 1.31), mais pour un gaz réel, l'équation 2.35 peut s'approximer comme suit:

$$\forall m \in \{1, \dots, M\}, \quad k_{i,\nu}I_{i,m,\nu} = k_{i,\nu}I_\nu^0 - \frac{1}{S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i,k,m} l_{i,k} I_{i,k,m,\nu} \quad (2.36)$$

Il convient maintenant d'introduire deux autres données spécifiques: les intervalles spectraux $\Delta\nu_j$ et la quadrature numérique. Pour la version CK proposée par Soufiani et al [27], ces paramètres sont imposés; pour la version hybride SNB-CK, ils sont laissés à la discrédition de l'utilisateur. Par la suite, les coefficients d'absorption $k_{i,\Delta\nu_j,g_q}$ doivent être calculés pour toutes les cellules de contrôle, toutes les bandes spectrales et tous les points de la quadrature. Sur chaque bande $\Delta\nu_j$, l'équation de transfert radiatif peut ensuite être résolue N fois, pour des gaz de coefficient d'absorption $k_{i,\Delta\nu_j,g_q}$, q variant de 1 à N .

$$\forall m \in \{1, \dots, M\}, \forall q \in \{1, \dots, N\},$$

$$k_{i,\Delta\nu_j,g_q} I_{i,m,\Delta\nu_j,g_q} = k_{i,\Delta\nu_j,g_q} I_\nu^0 - \frac{1}{S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i,k,m} l_{i,k} I_{i,k,m,\Delta\nu_j,g_q} \quad (2.37)$$

Deux méthodes sont ensuite possibles afin de calculer le transfert de chaleur. La première consiste à négliger les variations de la fonction de Planck à l'intérieur de la bande

$\Delta\nu_j$ et à introduire la valeur moyenne de la fonction de corps noir $I_{\nu_p}^0$ relatif au centre de la bande considérée:

$$\forall m \in \{1, \dots, M\}, \forall q \in \{1, \dots, N\},$$

$$k_{i,\Delta\nu_j,g_q} I_{i,m,\Delta\nu_j,g_q} = k_{i,\Delta\nu_j,g_q} I_{\nu_p}^0 - \frac{1}{S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i,k,m} l_{i,k} I_{i,k,m,\Delta\nu_j,g_q} \quad (2.38)$$

Ces résolutions fournissent les intensités directionnelles "monochromatiques" propres à chaque point g_q de la quadrature. L'intensité totale pour ces points peut ensuite être déduite comme suit:

$$I_{i,\Delta\nu_j,g_q} = \sum_{m=1}^M \omega_m I_{i,m,\Delta\nu_j,g_q} \quad (2.39)$$

Par la suite, ces intensités totales sont sommées sur les N points de la quadrature:

$$I_{i,\Delta\nu_j} = \sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q I_{i,\Delta\nu_j,g_q} \quad (2.40)$$

Rappelons que les ω_m représentent les poids de la quadrature angulaire tandis que les $\tilde{\omega}_q$ représentent les poids de la quadrature numérique propre à la méthode CK.

Il faut enfin intégrer sur tout le domaine spectral, et réintroduire la largeur des bandes:

$$I_i = \sum_{j=1}^{N_{bandes}} I_{i,\Delta\nu_j} \Delta\nu_j = \sum_{j=1}^{N_{bandes}} \left[\sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q \sum_{m=1}^M \omega_m I_{i,m,\Delta\nu_j,g_q} \right] \Delta\nu_j \quad (2.41)$$

Cependant pour les deux méthodes, CK optimisée et SNB-CK, les bandes considérées peuvent devenir relativement larges et atteindre 400 cm^{-1} à 1000 cm^{-1} ; l'hypothèse d'une fonction de Planck constante peut alors paraître problématique. Afin de pallier à ce

problème, une solution est d'utiliser les travaux de Chang et Rhee [14] qui permettent de calculer la fraction d'énergie de corps noir relatif à une bande $\Delta\nu$. Cette fraction d'énergie s'exprime de la façon suivante:

$$\Delta I_{\Delta\nu_j}^o = \Delta F_{\Delta\nu_j} \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (2.42)$$

où $\Delta F_{\Delta\nu_j}$ correspond à la fraction de corps noir émis dans l'intervalle $\Delta\nu_j = [\nu_1, \nu_2]$, cette valeur se calcule comme suit:

$$\Delta F = F(0 \rightarrow \nu_1 T) - F(0 \rightarrow \nu_2 T)$$

avec $F(0 \rightarrow \nu T) = \frac{15}{\pi^4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-na}}{n} \left(a^3 + \frac{3a^2}{n} + \frac{6a}{n^2} + \frac{6}{n^3} \right)$ et $a \approx \frac{\nu C_2}{T}$

$$C_2 = 1,4388 \text{ cm K} \quad (2.43)$$

Les équations 2.38 à 2.41 deviennent alors, $\forall m \in \{1, \dots, M\}, \forall q \in \{1, \dots, N\}$:

$$k_{i, \Delta\nu_j, g_q} \Delta I_{i, m, \Delta\nu_j, g_q} = k_{i, \Delta\nu_j, g_q} \Delta I_{\Delta\nu_j}^0 - \frac{1}{S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i, k, m} l_{i, k} \Delta I_{i, k, m, \Delta\nu_j, g_q} \quad (2.44)$$

$$\Delta I_{i, \Delta\nu_j, g_q} = \sum_{m=1}^M \omega_m \Delta I_{i, m, \Delta\nu_j, g_q} \quad (2.45)$$

$$\Delta I_{i, \Delta\nu_j} = \sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q \Delta I_{i, \Delta\nu_j, g_q} \quad (2.46)$$

$$I_i = \sum_{j=1}^{N_{\text{bandes}}} \Delta I_{i, \Delta\nu_j} = \sum_{j=1}^{N_{\text{bandes}}} \left[\sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q \sum_{m=1}^M \omega_m \Delta I_{i, m, \Delta\nu_j, g_q} \right] \quad (2.47)$$

C'est cette formulation qui est utilisée dans les deux derniers chapitres, lors des comparaisons des différentes modélisations des gaz réels.

b. Cas d'un mélange de deux gaz participants

Pour les cas de mélanges de vapeur d'eau et de dioxyde de carbone, la méthodologie appliquée pour formuler l'ETR à résoudre est fondée sur les propriétés de multiplication des transmissivités moyennes. Considérons un mélange de ces deux gaz de transmissivités moyennes respectives $\bar{\tau}_{\Delta\nu,h}(s)$ pour l'H₂O et $\bar{\tau}_{\Delta\nu,c}(s)$ pour le CO₂; la transmissivité du mélange se calcule alors comme suit:

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu,mél}(s) = \bar{\tau}_{\Delta\nu,h}(s) \times \bar{\tau}_{\Delta\nu,c}(s) \quad (2.48)$$

En se basant sur la relation $\bar{\tau}_{\Delta\nu}(s) = \sum_{i=1}^N \tilde{\omega}_i \exp\left(-\int_0^s k_{\Delta\nu,g_i}(t) dt\right)$, il est possible de déduire de

(2.48) la relation suivante:

$$\begin{aligned} \bar{\tau}_{\Delta\nu,mél}(s) &= \left[\sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q \exp\left(-\int_0^s k_{\Delta\nu,g_{qh}}(t) dt\right) \right] \left[\sum_{p=1}^N \tilde{\omega}_p \exp\left(-\int_0^s k_{\Delta\nu,g_{pc}}(t) dt\right) \right] \\ &= \sum_{q=1}^N \sum_{p=1}^N \tilde{\omega}_q \tilde{\omega}_p \exp\left(-\int_0^s [k_{\Delta\nu,g_{qh}}(t) + k_{\Delta\nu,g_{pc}}(t)] dt\right) \end{aligned} \quad (2.49)$$

La transmissivité moyenne est ainsi explicitée à l'aide d'une somme pondérée de $N \times N$ points faisant appel aux coefficients d'absorption propres aux deux espèces.

La formulation de l'ETR à résoudre peut alors être déduite des équations 2.44 et 2.49:

$$\begin{aligned} |k_{i,\Delta\nu_j,g_{qh}} + k_{i,\Delta\nu_j,g_{pc}}| \Delta I_{i,m,\Delta\nu_j,g_{qh},g_{pc}} &= |k_{i,\Delta\nu_j,g_{qh}} + k_{i,\Delta\nu_j,g_{pc}}| \Delta I_{\Delta\nu_j}^0 \\ &\quad - \frac{1}{S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i,k,m} l_{i,k} \Delta I_{i,k,m,\Delta\nu_j,g_{qh},g_{pc}} \end{aligned} \quad (2.50)$$

La luminance totale pour la $i^{\text{ème}}$ cellule s'exprime ensuite comme suit:

$$I_i = \sum_{q=1}^{N_{\text{bandes}}} \left[\sum_{p=1}^N \tilde{\omega}_q \tilde{\omega}_p \sum_{m=1}^M \omega_m \Delta I_{i,m,\Delta\nu_j,g_{qh},g_{pc}} \right] \quad (2.51)$$

Si N est le nombre de points de la quadrature et N_{bandes} le nombre de bandes larges, le calcul du transfert de chaleur par rayonnement nécessite $N_{\text{bandes}} \times N \times N \times M$ résolution de l'ETR.

Le calcul pourrait cependant être allégé en utilisant le concept introduit lors de l'utilisation de la méthode SNB-CK: les coefficients d'absorption sont calculés en utilisant la transformation inverse de Laplace de la transmissivité moyenne. En notant

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu,h}(s) = \exp \left[-\frac{\pi B_h}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4S_h s}{\pi B_h}} - 1 \right) \right] \quad \text{la transmissivité moyenne de H}_2\text{O et}$$

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu,c}(s) = \exp \left[-\frac{\pi B_c}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4S_c s}{\pi B_c}} - 1 \right) \right] \quad \text{celle de CO}_2, \text{ la transmissivité moyenne du mélange}$$

est alors:

$$\bar{\tau}_{\Delta\nu,mél}(s) = \exp \left[-\frac{\pi B_h}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4S_h s}{\pi B_h}} - 1 \right) \right] \times \exp \left[-\frac{\pi B_c}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4S_c s}{\pi B_c}} - 1 \right) \right] \quad (2.52)$$

Si la transformation inverse de Laplace de cette expression était résolue, il serait alors possible d'obtenir les coefficients d'absorption du mélange $k_{i,\Delta\nu_j,g_{qmél}}$ (Cf. § 2.3.2.1.2).

La formulation de l'ETR à résoudre deviendrait ensuite

$$k_{i,\Delta\nu_j,g_{qmél}} \Delta I_{i,m,\Delta\nu_j,g_{qmél}} = k_{i,\Delta\nu_j,g_{qmél}} \Delta I_{\Delta\nu_j}^0 - \frac{1}{S_i} \sum_{k=1}^3 \varphi_{i,k,m} l_{i,k} \Delta I_{i,k,m,\Delta\nu_j,g_{qmél}} \quad (2.53)$$

et la luminance totale:

$$I_i = \sum_{q=1}^{N_{bandes}} \left[\sum_{m=1}^N \tilde{\omega}_q \sum_{m=1}^M \omega_m \overline{\Delta I}_{i,m,\Delta\nu_j,g_q \text{ mél}} \right] \quad (2.54)$$

Il suffirait ainsi de $N_{bandes} \times N \times M$ résolutions de l'ETR pour obtenir le résultat du transfert par rayonnement. Malheureusement du fait de la complexité de l'expression de la transmissivité moyenne du mélange, sa transformation inverse de Laplace n'est pas encore résolue.

2.3.1.2.5 Conclusion

Les deux modèles basés sur les méthodes à bandes étroites et étudiés dans cette thèse sont deux versions de la méthode CK. La première est la version optimisée développée par Soufiani et al, qui utilise des paramètres tabulés sur des bandes spectrales prédéfinies et pour une quadrature numérique imposée (la quadrature de Gauss-Lobatto à sept points). La seconde est la version hybride SNB-CK initiée par Lacis et Oinas, qui se sert des paramètres de la méthode SNB. Cette version présente l'avantage d'être plus souple d'utilisation (choix des regroupements de bandes, choix de la quadrature) et pourrait devenir beaucoup moins exigeante en nombre de résolutions de l'ETR pour le cas des mélanges.

2.3.2 Les modèles globaux

Les modèles de bandes décrits précédemment permettent de connaître des valeurs des flux ou des divergences des flux sur des intervalles spectraux, puis, par sommation, sur tout le domaine; cette caractérisation spectrale peut être particulièrement intéressante pour des études de signatures infrarouges. Elle n'est cependant pas toujours nécessaire: dans certains domaines industriels - par exemple, celui des fours de combustion - une caractérisation globale s'avère souvent suffisante. Deux méthodes globales sont présentées ci-après, d'une part la méthode de somme pondérée de gaz gris (SPGG) et d'autre part la méthode SLW développée par Denison et Webb.

2.3.2.1 La somme pondérée de gaz gris (SPGG)

Le modèle SPGG fut initié par Hottel et Sarofim [7] afin de minimiser les procédures de calculs lors de l'application de la méthode de zone. Nous allons expliciter succinctement ci-dessous cette méthode afin d'appréhender plus aisément le concept de somme pondérée de gaz gris.

2.3.2.1.1 La méthode de Zone

Afin d'expliquer cette méthode, nous allons considérer dans un premier temps une enceinte bidimensionnelle à température imposée et contenant un **gaz gris** anisotherme, et expliquer brièvement la démarche suivie afin de calculer le champ de température et les flux pariétaux. On peut se référer aux ouvrages de Hottel [8] ou de Modest [9] pour des explications plus détaillées.

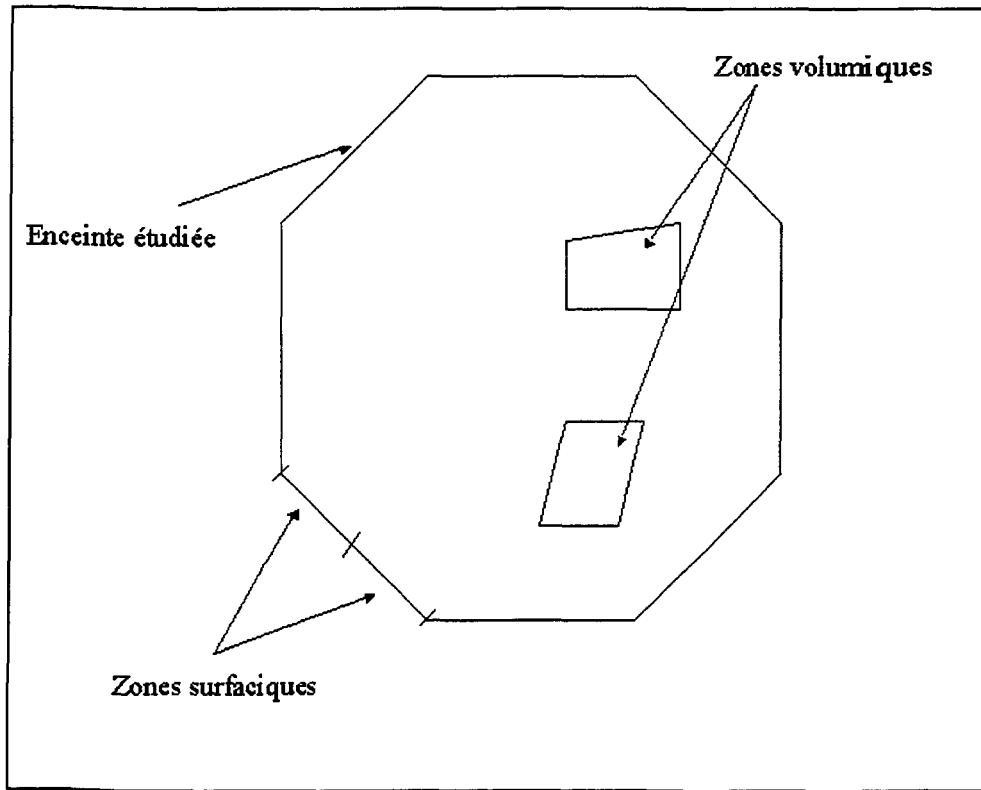


Figure 2.10 Découpage partiel du domaine en zones volumiques et surfaciques

Elle consiste tout d'abord à subdiviser le domaine étudié en un nombre suffisant de zones volumiques (N_g) et surfaciques (N_s), afin que puissent être considérées uniformes leur température et leurs propriétés radiatives. Un bilan énergétique est ensuite établi sur chaque zone en tenant compte des échanges thermiques entre la zone considérée et toutes les zones du système.

Les bilans prennent la forme suivante :

$$q_{g_i} + 4kV_iE_{g_i} = \sum_{j=1}^{N_s} \overline{S_j G_i} E_{s_j} + \sum_{j=1}^{N_g} \overline{G_j G_i} E_{g_j} \quad (2.55)$$

$$q_{s_i} + \varepsilon_i A_i E_{s_i} = \sum_{j=1}^{N_s} \overline{S_j S_i} E_{s_j} + \sum_{j=1}^{N_g} \overline{G_j S_i} E_{g_j} \quad (2.56)$$

Les termes $\overline{S_j G_i}$, $\overline{G_j S_i}$ et $\overline{G_j G_i}$ correspondent aux aires d'échange total entre deux zones i et j ; V_i et A_i correspondent au volume ou à la surface de la zone i . L'aire d'échange total de i vers j se calcule en considérant d'une part le flux provenant de i et atteignant directement j (fournit l'aire d'échange direct), et d'autre part le flux provenant de i et atteignant j après réflexion(s) sur les parois. Les formulations de ces termes dépendent du coefficient d'absorption k du gaz gris et de la longueur optique entre les diverses zones. C'est la recherche de ces termes qui rend l'utilisation de la méthode de zone coûteuse en temps de calcul; ils sont généralement calculés en utilisant la méthode de Monte Carlo.

q_{g_i} représente le bilan thermique de la zone volumique de gaz i et q_{s_i} le flux pariétal au niveau de la zone surfacique i .

Supposons une enceinte pour laquelle les températures aux parois sont fixées et que l'inconnue recherchée soit le champ de température une fois l'équilibre radiatif atteint. A l'équilibre, les bilans thermiques volumiques sont nuls; ainsi, dès que les aires d'échange total sont connues, les émittances de chaque zone gazeuse peuvent être quantifiées en résolvant le système matriciel associé à l'équation (2.55) :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 4kV_1 - \overline{G_1 G_1} & -\overline{G_1 G_1} & \dots & -\overline{G_1 G_{N_g}} \\ -\overline{G_1 G_1} & 4kV_2 - \overline{G_2 G_2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\overline{G_{N_g} G_1} & \dots & \dots & 4kV_{N_g} - \overline{G_{N_g} G_{N_g}} \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} E_{g_1} \\ E_{g_2} \\ \dots \\ E_{g_{N_g}} \end{pmatrix}}_E_g = \underbrace{\begin{pmatrix} \overline{S_1 G_1} & \overline{S_2 G_1} & \dots & \overline{S_{N_g} G_1} \\ \overline{S_1 G_2} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \overline{S_1 G_{N_g}} & \dots & \dots & \overline{S_{N_g} G_{N_g}} \end{pmatrix}}_B \underbrace{\begin{pmatrix} E_{s_1} \\ E_{s_2} \\ \dots \\ E_{s_{N_g}} \end{pmatrix}}_E_s$$

En inversant la matrice A , on obtient : $E_g = A^{-1}BE_s$

La température des différentes zones gazeuses peut alors être déduite:

$$T_{g_i} = \left(\frac{E_{g_i}}{\sigma} \right)^{0.25}$$

Les flux pariétaux sont ensuite obtenus en appliquant (2.56). Par ailleurs, si on désire modifier la valeur des températures imposées aux parois et connaître le nouveau champ de température et les flux pariétaux, il n'est pas nécessaire de recalculer les aires d'échange total ; il suffit de résoudre directement les équations (2.55) et (2.56) pour de nouvelles émissances E_{s_i} .

Supposons maintenant que le **gaz** contenu dans l'enceinte ne soit plus gris mais réel, le calcul des aires d'échange total devient alors beaucoup plus complexe. En effet, il faut non seulement prendre en compte les données géométriques et les propriétés radiatives des enceintes, mais aussi les variations du coefficient d'absorption k dont la valeur dépend de la température locale du gaz et de la température de paroi. Ainsi, pour étudier l'enceinte avec des températures imposées différentes, il faut recalculer à chaque fois toutes les aires d'échange total. C'est un travail fastidieux et trop coûteux en temps de calcul. Hottel et Sarofim ont alors imaginé d'approximer le gaz réel par une somme pondérée de n gaz gris, telle qu'une variation de la température ne modifie pas les caractéristiques des gaz gris (les mêmes coefficients d'absorption k_i sont conservés) mais modifie par contre leurs coefficients de pondération.

A l'aide de ce concept, l'émissivité (totale⁷) d'une zone gazeuse de température T_g s'écrit de la manière suivante :

$$\varepsilon_g(T_g) = \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_g)(1 - e^{-\kappa_i x p L}) \quad (2.57)$$

avec $\begin{cases} \kappa_i : coefficient d'absorption (bar^{-1}cm^{-1}) \\ x : fraction molaire \\ p : pression totale (bar) \end{cases}$

L'émissivité totale correspond à l'intégration sur tout le domaine spectral de l'émission monochromatique émise normalisée :

$$\varepsilon_g(T, s' \rightarrow s) = \frac{1}{I^0(T)} \int_0^\infty \varepsilon_{g,\nu}(s' \rightarrow s) I_\nu^0(T) d\nu \quad (2.58)$$

En introduisant la pression partielle p_p du gaz participant, (2.57) s'exprime aussi comme suit:

$$\varepsilon_g(T_g) = \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_g)(1 - e^{-\kappa_i p_p L}) \quad (2.59)$$

La formulation diffère quelque peu pour l'absorptivité d'une zone de gaz. A l'encontre de l'émissivité, les coefficients de pondération dépendent en effet de façon minime de T_g et essentiellement de la température T_s de la source émettrice :

$$\alpha_g(T_s, T_g) = \sum_{i=0}^n a_{\alpha,i}(T_s, T_g)(1 - e^{-\kappa_i p_p L}) \quad (2.60)$$

⁷ Pour la fin de ce chapitre, l'émissivité et l'absorptivité seront toujours totales lorsqu'aucune précision n'est

Il est possible de traiter un problème avec un gaz réel de manière similaire à celui impliquant un gaz gris. En effet, une fois les aires d'échange total pour les n gaz gris (indépendantes de la température) calculées, les aires pour le gaz réel peuvent être déduites de la façon suivante:

$$\begin{aligned}\overrightarrow{G_i G_j} &= \sum_{k=1}^n a_{\varepsilon,k}(T_{g_i}) \overrightarrow{G_i G_j}^k \\ \overrightarrow{S_i G_j} &= \sum_{k=1}^n a_{\alpha,k}(T_{s_i} T_{g_j}) \overrightarrow{S_i G_j}^k \\ \overrightarrow{S_i S_j} &= \sum_{k=1}^n a_{\alpha,k}(T_{s_i} T_{s_j}) \overrightarrow{S_i S_j}^k\end{aligned}\tag{2.61}$$

où $\overrightarrow{S_i G_j}$ et $\overrightarrow{S_i G_j}^k$ correspondent respectivement à une aire d'échange total du gaz réel et du $k^{\text{ième}}$ gaz gris.

Il ne reste alors qu'à résoudre un système analogue à celui composé des équations (2.55) et (2.56):

$$q_{g_i} + \sum_n 4a_n(\kappa_n p) V_i E_{g_i} = \sum_{j=1}^{N_s} \overrightarrow{S_j G_i} E_{s_j} + \sum_{j=1}^{N_g} \overrightarrow{G_j G_i} E_{g_j}\tag{2.62}$$

$$q_{s_i} + \varepsilon_i A_i E_{s_i} = \sum_{j=1}^{N_s} \overrightarrow{S_j S_i} E_{s_j} + \sum_{j=1}^{N_g} \overrightarrow{G_j S_i} E_{g_j}\tag{2.63}$$

Il convient maintenant d'analyser comment s'interprètent les coefficients de pondération et comment il est possible de calculer ces coefficients ainsi que les coefficients d'absorption.

2.3.2.1.2 Interprétation et obtention des coefficients de pondération et d'absorption

Soit une bande spectrale (Figure 2.11), sur laquelle le comportement du gaz réel doit être approximé par la somme de ceux de deux gaz gris, de coefficients d'absorption respectifs k_1 et k_2 donnés. Les deux coefficients étant définis, il convient ensuite de quantifier le poids relatif à fournir à chacun de ces gaz; ces coefficients de pondération sont notés $a_{1\varepsilon,\Delta\nu}$ et $a_{2\varepsilon,\Delta\nu}$ (l'indice ε fait référence au fait que ces facteurs de pondération sont relatifs à l'émissivité). Ces coefficients peuvent s'interpréter comme représentant la fraction d'énergie de corps noir émise dans la région spectrale associée à leur coefficient d'absorption k respectif. Ainsi sur cette bande, le poids relatif au deuxième gaz gris, de température T , s'exprime comme suit:

$$a_{2\varepsilon,\Delta\nu}(T) = \int_{\Delta\nu(k=k_2)} \frac{E_{g,\nu}(T)}{\sigma T^4} d\nu = \int_{\nu_4}^{\nu_5} \frac{E_{g,\nu}(T)}{\sigma T^4} d\nu + \int_{\nu_8}^{\nu_9} \frac{E_{g,\nu}(T)}{\sigma T^4} d\nu \quad (2.64)$$

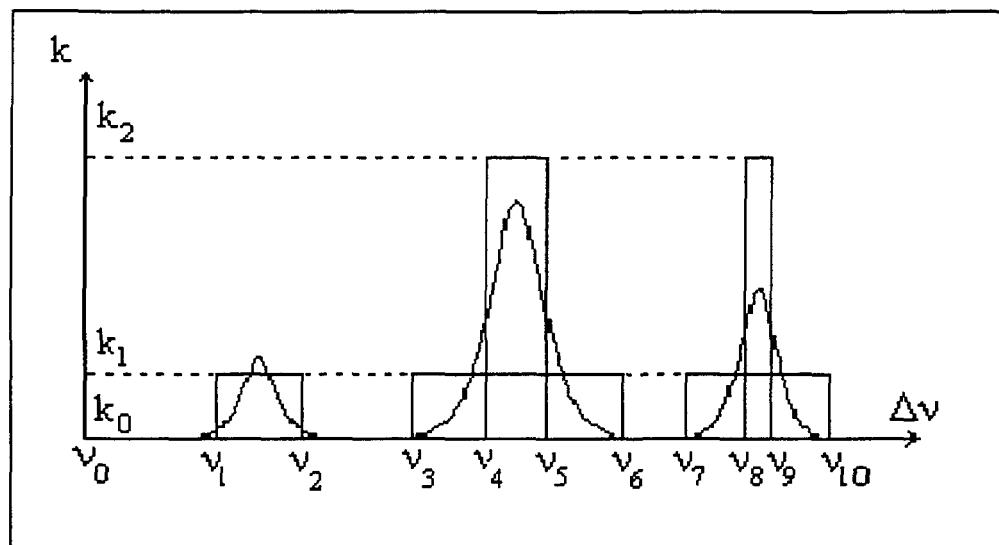


Figure 2.11: Approximation d'un spectre réel par la somme de deux gaz gris

Afin de tenir compte des fenêtres dans le spectre, on doit par ailleurs ajouter à ces deux gaz gris un gaz transparent ($k_0 \sim 0$) de poids a_0 . Celui-ci se retrouve dans le premier terme de l'expression de l'émissivité du gaz

$$\varepsilon_g(T) = \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T)(1 - e^{-\kappa_i p_p L}) \quad (2.65)$$

Le nombre de gaz gris généralement introduits varie généralement entre 3 et 5.

Les coefficients a_i vérifient de plus la relation : $\sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i} = 1$ (2.66)

Les deux principales méthodes utilisées afin de caractériser les $a_{\varepsilon,n}$ (n fixé selon le désir de l'utilisateur) coefficients de la SPGG sont présentées ci-dessous.

a. La méthode graphique

Pour cette méthode, il faut supposer que seules les valeurs de l'émissivité totale du gaz $\varepsilon_g(T)$ en fonction de la température sont connues et cette quantité doit être approximée à l'aide de la méthode de somme pondérée de gaz gris. Deux séries de paramètres doivent alors être calculées: d'une part, les valeurs des coefficients d'absorption des gaz gris κ_i , et d'autre part, les coefficients de pondérations $a_{\varepsilon,i}(T)$. En considérant une température T donnée, la relation (2.65) peut être reformulée de la manière suivante:

$$\varepsilon_g = a_{\varepsilon,1}(1 - e^{-\kappa_1 p_p L}) + a_{\varepsilon,2}(1 - e^{-\kappa_2 p_p L}) + \dots + a_{\varepsilon,n}(1 - e^{-\kappa_n p_p L}) \text{ avec } \kappa_1 < \kappa_2 < \dots < \kappa_n \quad (2.67)$$

La première valeur à obtenir est le coefficient de pondération relatif au gaz transparent; ce coefficient s'obtient en considérant des valeurs suffisamment grandes de $p_p L$:

$$\sum_{i=1}^n a_{\varepsilon,i} = \varepsilon_g \quad (2.68)$$

La valeur de $a_{\varepsilon,0}$ se déduit en effet des équations (2.66) et (2.68): $a_{\varepsilon,0} = 1 - \varepsilon_g$. (2.69)

Les termes $a_{\varepsilon,i}$, κ_i sont ensuite calculés successivement pour $i=1\dots n$ en utilisant des études graphiques. Les calculs pour $i=1$ et 2 sont présentés ci-dessous.

Calcul de κ_1 et $a_{\varepsilon,1}$

Les coefficients κ_i étant classés par ordre croissant, un intervalle $p_p L$ peut être trouvé pour lequel les relations suivantes sont vérifiées :

$$e^{-\kappa_1 p_p L} \gg e^{-\kappa_i p_p L} \quad \forall i = 2, n \quad (2.70)$$

$$e^{-\kappa_i p_p L} \ll 1 \quad \forall i = 1, n \quad (2.71)$$

Les valeurs de $p_p L$ varient généralement entre 0.1 et 1 atm.m. L'équation (2.67) peut alors se simplifier et se réécrire de la façon suivante :

$$\ln\left(\sum_{i=1}^n a_{\varepsilon,i} - \varepsilon_g\right) = -\kappa_1 p_p L + \ln a_{\varepsilon,1} \quad (2.72)$$

A partir des tables de Hottel ou de Hadvig ou à partir de résultats expérimentaux, on peut tracer l'évolution de $\ln\left(\sum_{i=1}^n a_{\varepsilon,i} - \varepsilon_g\right)$ en fonction de $p_p L$ sur $[0,1; 1]$. Les valeurs de k_1 et a_1 sont alors caractérisées (Figure 2.12) en déterminant respectivement la pente de la tangente à la courbe pour des valeurs de $p_p L$ proches de 1 et la valeur de l'ordonnée à l'origine (prolongement de la tangente).

Calcul de κ_2 et $a_{\varepsilon,2}$

Un travail tout à fait similaire est effectué pour le calcul de $a_{\varepsilon,2}$ et κ_2 , mais cette fois-ci, en se plaçant sur un intervalle pour lequel les valeurs de $p_p L$ sont plus faibles d'une décennie ($p_p L \in [0,01; 0,1]$). Il peut alors être supposé que tous les termes exponentiels pour i supérieur à 2 seront négligeables, cette hypothèse devant bien sûr être vérifiée par la suite. L'équation (2.67) se simplifie alors comme suit :

$$\ln\left(\sum_{i=1}^n a_{\varepsilon,i} - \varepsilon_g - a_{\varepsilon,1}e^{-\kappa_i p_p L}\right) = -\kappa_2 p_p L + \ln a_{\varepsilon,2} \quad (2.73)$$

Il suffit alors d'analyser l'évolution de $\ln\left(\sum_{i=1}^n a_{\varepsilon,i} - \varepsilon_g - a_{\varepsilon,1}e^{-\kappa_i p_p L}\right)$ en fonction de $p_p L$ de la même manière que précédemment.

Un processus analogue est appliqué pour le calcul de κ_3 et $a_{\varepsilon,3}$ (3^{ème} partie de la figure 2.12). Une fois réalisé ce travail pour les n gaz gris, les valeurs κ_i , supposées indépendantes de la température, sont connues ainsi que les valeurs de a_i pour la température T considérée. Il reste donc à caractériser l'évolution des termes de pondération vs T . La démarche à suivre est similaire à celle présentée précédemment mais la valeur du coefficient d'absorption est cette fois imposée. Des courbes d'évolution de ces coefficients pour deux gaz gris plus un transparent sont présentées sur la figure 2.13 pour un fuel de pétrole, pour lequel la pression partielle de la vapeur d'eau est identique à celle du dioxyde de carbone. Des tables ont été réalisées à partir de cette méthode et sont disponibles dans les références [39–41].

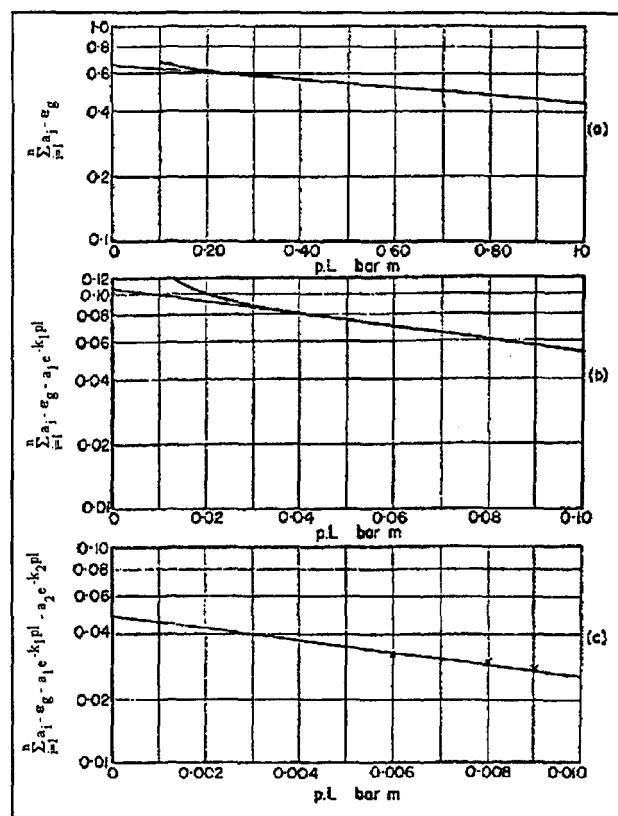


Figure 2.12: Obtention graphique des coefficients de la somme pondérée

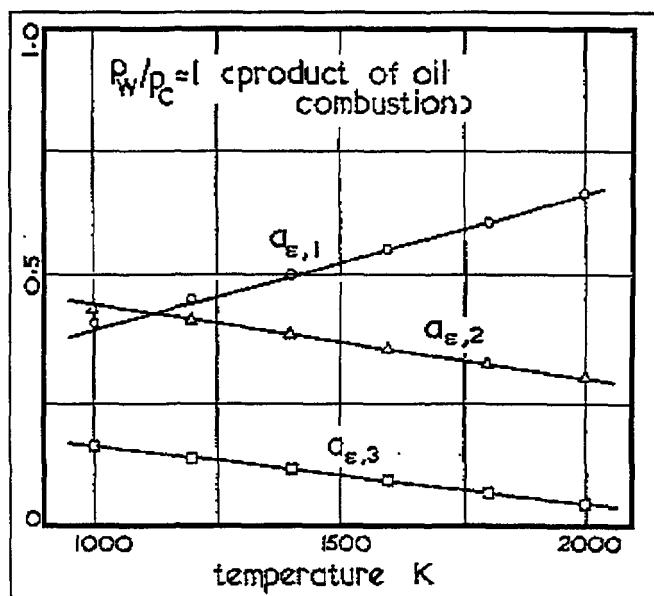


Figure 2.13: Coefficients de pondération pour une somme de deux gaz gris et d'un gaz transparent pour un fuel de pétrole

b. La méthode numérique

La seconde méthode est basée sur un calcul d'optimisation. Elle consiste à introduire une fonction objective F. Celle utilisée par Smith et al [42] est de la forme suivante :

$$F = \sum_{l=1}^L \sum_{m=1}^M \left(\frac{\varepsilon'_{l,m} - \varepsilon_{g,l,m}}{\varepsilon'_{l,m}} \right) \text{ où } \varepsilon'_{l,m} = \sum_{i=1}^n a_{\varepsilon,i}(T_m)(1 - e^{-\kappa_i p_p L_l}) \quad (2.74)$$

où $\varepsilon_{g,l,m}$ peut correspondre soit aux valeurs trouvées dans les abaques de Hottel ou d'Hadvig, soit à des valeurs expérimentales.

Les auteurs ont ensuite minimisé cette fonction en utilisant la technique numérique de Fletcher Powell.

Comme pour la méthode précédente, on peut trouver différentes tables de données relatives à cette technique d'optimisation [42-44].

2.3.2.1.3 Le modèle SPGG et l'équation de transfert [45]

L'étude de l'équation de transfert radiatif sera limité au cas d'une **enceinte grise** d'émissivité ε_p contenant toujours un milieu participant réel mais non dispersif; l'extension à un cas plus général étant très délicate.

L'équation de transfert radiatif monochromatique est rappelée ci-dessous :

$$\frac{dI_\nu(s)}{ds} = k_\nu(s)(I_\nu^0(s) - I_\nu(s)).$$

En intégrant sur le chemin optique s , on obtient :

$$I_\nu(s) = \varepsilon_p I_{p,\nu}^0 e^{-\int_0^s k_\nu(t) dt} + \int_0^s I_\nu^0(s') e^{-\int_{s'}^s k_\nu(t) dt} k_\nu(s') ds' \quad (2.75)$$

où $I_{p,\nu}^0$ est l'énergie de corps noir émis par la paroi à la température T_p pour la longueur d'onde ν .

En intégrant sur tout le domaine spectral, l'équation 2.75 devient:

$$I(s) = \varepsilon_p \int_0^\infty I_{p,\nu}^0 e^{-\int_0^s k_\nu(t) dt} d\nu + \int_0^\infty \int_0^s I_\nu^0(s') e^{-\int_{s'}^s k_\nu(t) dt} k_\nu(s') ds' d\nu \quad (2.76)$$

En utilisant les expressions de l'émissivité spectrale $\varepsilon_\nu(0 \rightarrow s) = 1 - e^{-\int_0^s k_\nu(t) dt}$ et de sa dérivée (Cf. Eq. 2.10):

$$\frac{\partial \varepsilon_\nu(s' \rightarrow s)}{\partial s'} = -k_\nu(s') e^{-\int_{s'}^s k_\nu(t) dt} \quad (2.77)$$

l'équation (2.76) devient:

$$I(s) = \varepsilon_p \int_0^\infty I_{p,\nu}^0 (1 - \varepsilon_\nu(0 \rightarrow s)) d\nu - \int_0^\infty \int_0^s I_\nu^0(s') \frac{\partial \varepsilon_\nu(s' \rightarrow s)}{\partial s'} ds' d\nu \quad (2.78)$$

En introduisant l'émissivité totale, qui correspond à l'intégration, sur tout le domaine spectral, de l'émission monochromatique émise normalisée :

$$\varepsilon(T, s' \rightarrow s) = \frac{1}{I^0(T)} \int_0^\infty \varepsilon_\nu(s' \rightarrow s) I_\nu^0(T) d\nu \quad (2.79)$$

L'équation (2.78) se réexprime comme suit :

$$I(s) = \varepsilon_p(1 - \varepsilon(T_p, 0 \rightarrow s))I_p^0 - \int_0^s I^0(s') \frac{\partial \varepsilon(T(s'), s' \rightarrow s)}{\partial s'} ds', \quad (2.80)$$

Il est ensuite possible d'utiliser l'approximation de somme pondérée de gaz gris pour l'émissivité totale du gaz réel: $\varepsilon(T, s \rightarrow s') \approx \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T)(1 - e^{-k_i(s'-s)})$. Ainsi:

$$\begin{aligned} 1 - \varepsilon(T_p, 0 \rightarrow s) &= 1 - \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_p) + \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_p)e^{-k_i s} = \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_p)e^{-k_i s} \quad (\text{Cf. Eq. 2.66}) \\ \frac{\partial \varepsilon(T(s'), s' \rightarrow s)}{\partial s'} &= - \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T(s')) k_i e^{-k_i(s-s')} \end{aligned}$$

Ce qui permet d'exprimer l'équation (2.80) comme suit:

$$\begin{aligned} I(s) &= \varepsilon_p \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_p) I_p^0 + \int_0^s \sum_{i=0}^n a_{\varepsilon,i}(T_p) k_i e^{-k_i(s-s')} I^0(s') ds' \\ &= \sum_{i=0}^n \left[(a_{\varepsilon,i} I^0(T_p)) e^{-k_i s} + \int_0^s (a_{\varepsilon,i} I^0(T(s'))) e^{-k_i(s-s')} k_i ds' \right] \end{aligned} \quad (2.81)$$

Il convient maintenant d'introduire une famille d'intensités, $I_i(s)$, propres à chaque gaz gris i .

Pour chacun de ces gaz, l'émissivité de corps noir, $I_i^0(s)$, correspond à l'intensité de corps noir en ce point multipliée par le facteur de pondération du $i^{\text{ème}}$ gaz:

$I_i^0(s) = a_{\varepsilon,i}(T(s)) I^0(s)$. L'équation qui doit être résolue pour ce $i^{\text{ème}}$ gaz est:

$$\frac{dI_i}{ds}(s) = k_i [(a_{\varepsilon,i}(T(s)) I^0(s)) - I_i(s)] \quad (2.82),$$

et la solution de cette équation s'exprime alors ainsi:

$$I_i(s) = (a_{\varepsilon,i} I^0(T_p)) e^{-k_i s} + \int_0^s (a_{\varepsilon,i} I^0(T(s'))) e^{-k_i(s-s')} k_i ds' \quad (2.83)$$

Une observation des équations 2.81 à 2.83 permet de déduire que l'intensité, $I(s)$, du gaz réel se calcule à partir des intensités propres aux i gaz gris:

$$I(s) = \sum_{i=1}^n I_i(s) \quad (2.84)$$

Numériquement, le cheminement à suivre afin de calculer l'intensité de la $j^{\text{ème}}$ cellule gazeuse consiste tout d'abord à résoudre pour chaque gaz gris i et pour chaque direction angulaire m les intensités angulaires globales $I_{i,j,m}$ à partir de l'expression 2.85

$$\forall m \in \{1, \dots, M\}, \forall i \in \{1, \dots, n\} \quad k_i I_{i,j,m} = k_i I_{i,j}^0 - \frac{1}{S_j} \sum_{k=1}^3 \varphi_{j,k,m} l_{j,k} I_{i,j,k,m} \quad (2.85)$$

Dans cette formulation n'apparaissent plus les termes relatifs aux points de la quadrature de Gauss ou ceux relatifs à la discrétisation spectrale (Cf. Eq. 2.37). L'intensité totale I_j se déduit ensuite des intensités $I_{i,j,m}$:

$$I_j = \sum_{i=0}^n \sum_{m=1}^M \omega_m I_{i,j,m} \quad (2.86)$$

Les termes de pondération interviennent enfin dans les équations régissant les conditions limites sur les parois (indice p); ainsi :

$$I_{p,i} = \frac{a_{\varepsilon,i} \varepsilon_p \sigma T_p^4 + (1 - \varepsilon_p) \sum \omega_m I_{i,p,m}}{\pi} \quad (2.87)$$

2.3.2.1.4 Limitation de la méthode

Comme spécifié dans la partie 2.3.2.1.1, la somme pondérée de gaz gris a été développée initialement afin de pouvoir étudier les milieux réels anisothermes. La variation de la température est ainsi prise en compte à l'aide du coefficient de pondération $a_d(T)$. La résolution des cas non homogènes est cependant plus délicate: les coefficients d'absorption sont supposés constants dans le milieu et les coefficients de pondération ne tiennent pas compte des variations possibles de ce facteur. Pour les enceintes contenant un gaz participant unique, la SPGG ne permet de modéliser adéquatement qu'un milieu homogène dont la concentration peut être quelconque. Les bases de données propres à des milieux contenant de la vapeur d'eau ou du dioxyde de carbone sont disponibles aux références suivantes [40-42] pour le CO₂ et [29, 39, 41-42] pour H₂O. Pour les gaz réels composés d'un mélange des deux gaz, deux séries de bases de données sont disponibles. La première correspond à la combustion de fuel [42-43], qui est telle que les pressions, après combustion, de la vapeur d'eau p_h et du dioxyde de carbone p_c sont identiques ($\frac{p_h}{p_c} = 1$); la seconde correspond au phénomène de combustion pour lesquels $\frac{p_h}{p_c} = 2$ (par exemple la combustion du méthane) [30, 42-43]. D'autres travaux, correspondant aux cas d'enceintes contenant des suies, sont aussi disponibles aux références [45-47].

2.3.2.2 Modèle SLW

2.3.2.2.1 Présentation de la méthode

Denison et Webb ont développé une nouvelle méthode, dénommée SLW (Spectral Line-based Weighted-sum-of-gray-gases) [20, 49-50], basée sur les concepts de la somme pondérée de gaz gris mais dévolue à pouvoir étudier les milieux non homogènes constitués d'un gaz unique ou d'un mélange de constitution quelconque. L'idée générale de cette méthode est de subdiviser le domaine de coefficients d'absorption en N valeurs k_i ($i=1, \dots, N$) fixées, puis de discréteriser le domaine spectral de telle manière que sur chaque intervalle $\Delta v_{i,j}$ (j désignant le $j^{\text{ème}}$ intervalle pour le coefficient k_i), le coefficient du gaz réel puisse être approximé par une des valeurs k_i .

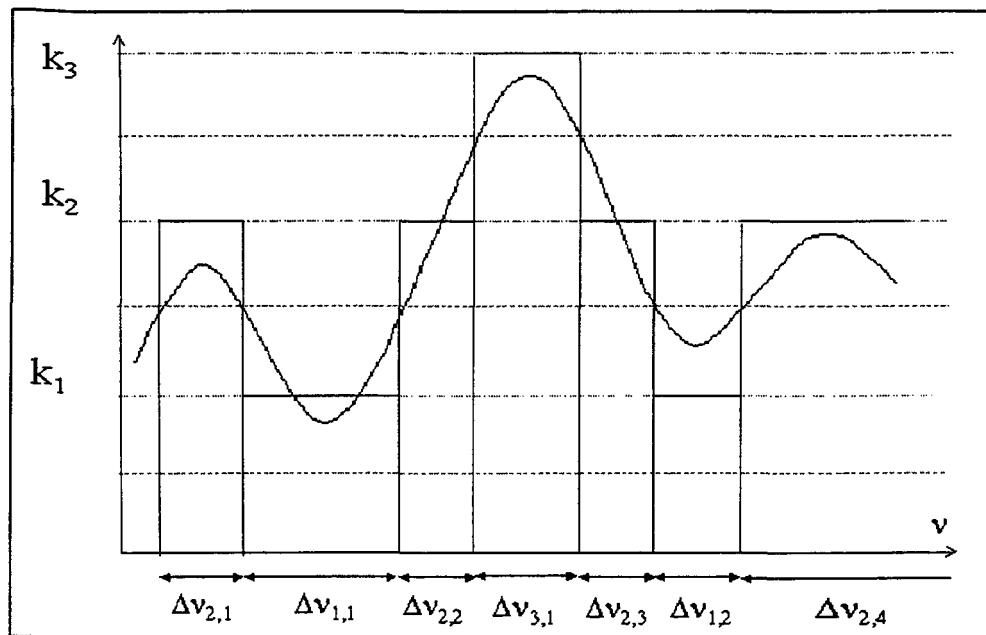


Figure 2.14: Subdivision du spectre en sous intervalles associés aux différentes valeurs du coefficient d'absorption.

L'intégration sur tout le domaine spectral de l'équation de transfert radiatif monochromatique propre à un milieu émettant-absorbant

$$\int_0^{\infty} \frac{dI_{\nu}(s)}{ds} d\nu = \int_0^{\infty} k_{\nu}(s) (I_{\nu}^0(s) - I_{\nu}(s)) d\nu \quad (2.88)$$

peut alors être transformée comme suit:

$$\sum_i \sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} \frac{dI_{\nu}(s)}{ds} d\nu = \sum_i \sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} k_{\nu} (I_{\nu}^0(s) - I_{\nu}(s)) d\nu \quad (2.89)$$

L'approximation est bien sûr de plus en plus précise lorsqu'on augmente le nombre de coefficients d'absorption pris en compte.

Par la suite, l'équation (2.88) devient, en utilisant la formule de Leibnitz:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left(\sum_i \sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} I_{\nu}(s) d\nu \right) &= \frac{dI}{ds}(s) = \sum_i \sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} k_i (I_{\nu}^0(s) - I_{\nu}(s)) d\nu - \underbrace{\sum_i \sum_j I_{\nu}(s) (\nu_{inf,i,j}) \frac{d\nu_{inf,i,j}}{ds}}_A \\ &\quad + \underbrace{\sum_i \sum_j I_{\nu}(s) (\nu_{sup,i,j}) \frac{d\nu_{sup,i,j}}{ds}}_B \end{aligned} \quad (2.90)$$

Les bornes $\nu_{sup,i,j}$ et $\nu_{inf,i,j}$ correspondent aux extrémités des intervalles $\Delta\nu_{i,j}$.

A l'exception de l'étude de cas isothermes, le calcul des deux sommes A et B est très délicat: pour des milieux anisothermes ou hétérogènes, les bornes $\nu_{sup,i,j}$ et $\nu_{inf,i,j}$ peuvent varier de façon significative entre deux positions successives du maillage. Deux solutions sont proposées afin de pallier à ce problème. La première consiste à résoudre l'équation (2.90) en tout point (d'abscisse s) en utilisant le spectre correspondant aux propriétés

thermophysiques en ce point et en négligeant les variations $\frac{d\nu}{ds}$. La seconde consiste à fixer des valeurs moyennes pour le milieu (température et concentration de référence) et à fixer toutes les bornes des intervalles du spectre en les prenant égales à celles du spectre de référence; dans ce cas $\frac{d\nu}{ds} = 0$. C'est cette dernière solution qui est préconisée [20].

Par ailleurs, au lieu d'introduire les coefficients k_i comme variable caractéristique du spectre d'absorption dans l'équation (2.74), Denison propose d'utiliser les sections d'absorption $C_{abs,i}$. Ces sections sont reliées au coefficient k_i selon l'équation suivante: $k_i = N \times C_{abs,i}$, où N (mol/m³) représente la densité molaire du gaz. L'équation (2.90) peut alors se reformuler de la manière suivante:

$$\frac{dI}{ds}(s) = \sum_i \sum_j \int_{\Delta\nu_{j,k}} N(s) C_{abs,i}(s) (I_v^o(s) - I_v(s)) d\nu \quad (2.91)$$

Cette équation pourrait certes se résoudre sur chaque intervalle spectral et utiliser ainsi le concept des méthodes à larges bandes. Cependant la méthode de résolution proposée est tout autre. Elle consiste en fait à quantifier les transferts de chaleur par rayonnement ayant lieu entre deux sections consécutives sur tout le spectre, ce qui nécessite d'associer à chaque section d'absorption $C_{abs,i}$ des coefficients de pondération a_i , dont le calcul est explicité ultérieurement. Le transfert de chaleur total s'obtient ensuite en sommant toutes les contributions ayant lieu entre deux sections.

2.3.2.2.2 Le calcul du coefficient de pondération

Afin de calculer les coefficients de pondération, Denison [20] introduit la fonction de distribution $F_i(s)$ ⁸ du coefficient d'absorption pondérée par la fonction de Planck. Cette fonction permet de définir une fraction d'énergie de corps noir caractéristique de la fraction d'absorption ayant lieu pour des sections d'absorption inférieure à $C_{abs,i}$. Le coefficient de pondération $a_i(s)$, caractérisant le poids du transfert de chaleur radiatif entre les deux sections consécutives $C_{abs,i}$ et $C_{abs,i+1}$, est déduit ensuite en soustrayant la fraction $F_i(s)$ à $F_{i+1}(s)$.

a. La fonction $F_i(s)$

Cette fonction dépend non seulement de la section d'absorption $C_{abs,i}$ considérée, mais aussi de quatre autres paramètres: la température source T_b , la température de gaz T_g , la pression totale p du gaz et la concentration molaire X .

Son expression analytique est la suivante:

$$F_i(s)(C_{abs,i}, T_b, T_g, p, X) = \frac{1}{\sigma T_b^4} \sum_i \int_{\Delta\nu_i(C_{abs}, T_g, p, X)} E_{b\nu}(\nu, T_b) d\nu \quad (2.92)$$

La fonction $F_i(s)$ est représentée graphiquement à la figure 2.15; la valeur de $F_i(s)$ correspond à la fraction ombrée de la fonction de Planck. Plus explicitement, $F_i(s)$ est évaluée en intégrant la fonction de Planck calculée à la température de source T_b , sur les intervalles de nombres d'onde pour lesquels la section d'absorption du spectre, étudié à la température T_g et à la concentration X , est inférieure à $C_{abs,i}$.

b. Les coefficients de pondérations a_i

Le coefficient de pondération a_i représente la fraction de corps noir correspondant à la zone comprise entre les deux sections successives $C_{abs,i}$ et $C_{abs,i+1}$ (Fig. 2.16, partie ombrée) et permet de quantifier le transfert ayant lieu entre elles. On le calcule ainsi de la manière suivante:

$$a_i(s) = F_{i+1}(s)(T_b, T_g, p, X) - F_i(s)(T_b, T_g, p, X) \quad (2.93)$$

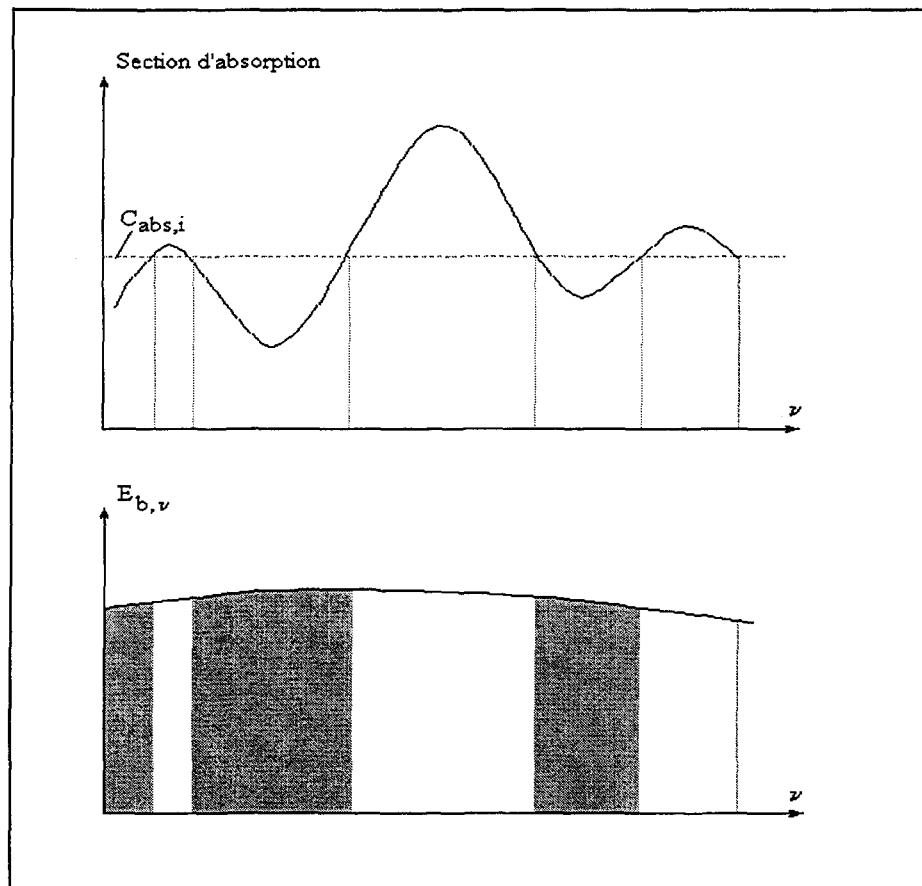


Figure 2.15: Représentation graphique de la fonction de distribution $F_i(s)$ sur un intervalle du domaine de nombre d'onde.

⁸ Elle est calculée pour la i^{eme} section d'absorption et pour le point d'abscisse s

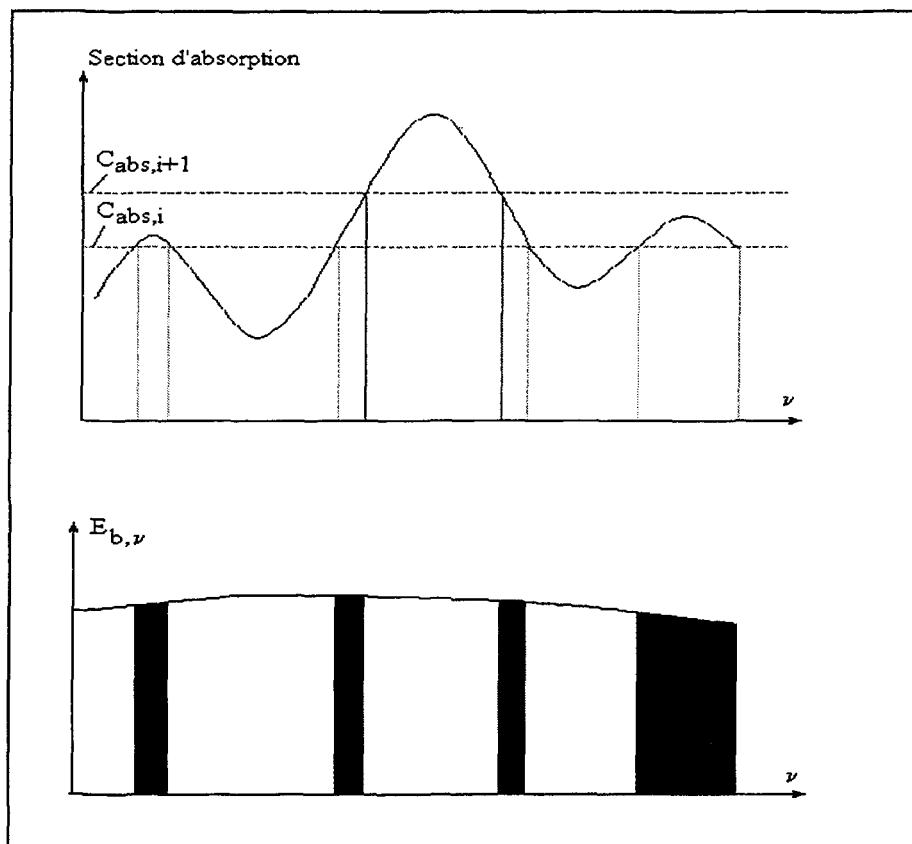


Figure 2.16: Représentation graphique du coefficient de pondération sur un intervalle de nombre d'onde.

2.3.2.2.3 Application de la méthode SLW pour un milieu anisotherme hétérogène

Ce paragraphe décrit les différentes étapes qui doivent être exécutées afin de résoudre l'ETR à l'aide de la méthode SLW.

a. Les variables de référence

Afin de fixer les bornes des intervalles spectraux $\nu_{\min,i,j}$ et $\nu_{\max,i,j}$, deux variables de références doivent être caractérisées : la concentration et la température. Ces valeurs

correspondent aux valeurs moyennes du milieu. Deux exemples sont présentés ci-après. Si la distribution de température du milieu est parabolique avec $T_p=T_1$ et $T_m=T_2$ (T_m correspond à la température au centre de la couche de gaz), la température de référence sera définie par $T_{ref}=T_1+\frac{2}{3}(T_2-T_1)$. Si cette distribution est cosinusoïdale, avec $T=T_{moy}+\frac{\Delta T}{2}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, on pose $T_{ref}=T_{moy}$ (Cf. Fig. 2.17). De tels champs de température sont utilisés au chapitre 3.

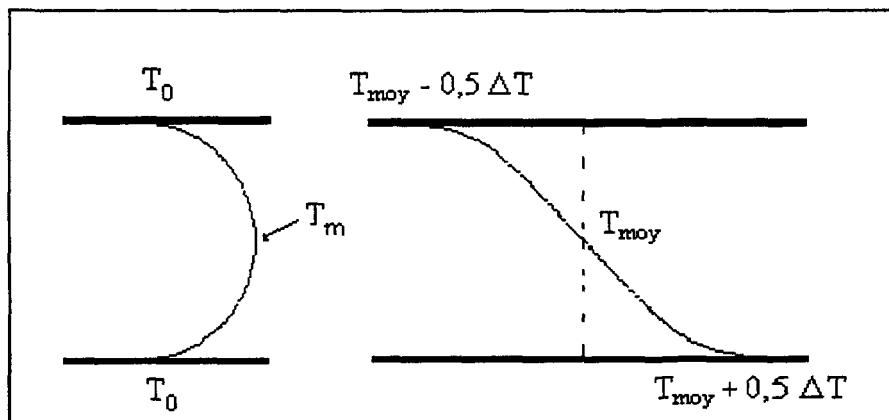


Figure 2.17: Profils parabolique et cosinusoïdal de température entre deux plaques planes

Remarque: Pour un gaz isotherme ($T_g=cste$), $T_{ref}=T_g$.

Le calcul de la concentration de référence suit le même principe.

b. Choix des sections d'absorption

Il faut par la suite définir un nombre M de sections d'absorption $C_{abs,i}$. Deux possibilités sont offertes afin de rendre les calculs des flux de plus en plus précis. La première consiste à optimiser le choix des valeurs de ces sections. La seconde consiste à considérer un

nombre M suffisamment grand et de prendre les sections d'absorption logarithmiquement espacées de $3 \cdot 10^{-5}$ à $60 \text{ m}^2/\text{mol}$ pour H_2O et de $3 \cdot 10^{-5}$ à $600 \text{ m}^2/\text{mol}$ pour le CO_2 [20]. Ne connaissant pas la technique utilisée afin d'obtenir les valeurs des sections optimisées, 15 sections logarithmiquement espacées seront retenues pour les calculs. Le tableau 2.2 présente les valeurs de ces sections.

Tableau 2.2: Valeur des sections d'absorption pour n=15

Numéro	Valeur de la section d'absorption pour le CO_2	Valeur de la section d'absorption pour le H_2O
1	$3,000 \cdot 10^{-5}$	$3,000 \cdot 10^{-5}$
2	$9,968 \cdot 10^{-5}$	$8,456 \cdot 10^{-5}$
3	$3,312 \cdot 10^{-4}$	$2,384 \cdot 10^{-4}$
4	$1,101 \cdot 10^{-4}$	$6,720 \cdot 10^{-4}$
5	$3,657 \cdot 10^{-3}$	$1,894 \cdot 10^{-3}$
6	$1,215 \cdot 10^{-3}$	$5,339 \cdot 10^{-3}$
7	$4,038 \cdot 10^{-2}$	$1,505 \cdot 10^{-2}$
8	0,1342	$4,243 \cdot 10^{-2}$
9	0,4460	0,1196
10	1,4813	0,3371
11	4,9220	0,9503
12	16,3547	2,6787
13	54,3432	7,5510
14	180,5705	21,2851
15	600,0000	60,0000

L'équation (2.90) a été simplifiée précédemment en se fixant des valeurs de référence et en définissant ainsi un spectre d'absorption unique (ne variant pas en fonction de la

position dans le milieu), caractéristique d'un gaz isotherme et homogène. Afin de reproduire le caractère hétérogène et anisotherme du gaz, il s'agit donc maintenant d'introduire dans le modèle les caractéristiques locales ($T(s)$, $X(s)$) du gaz.

c. Milieux anisothermes hétérogènes

La première prise en compte des valeurs locales du milieu est réalisée lors du calcul des fonctions de distribution des coefficients d'absorption (Cf. Eq. 2.92). Il convient en effet d'utiliser lors de ce calcul des valeurs adéquates pour les trois grandeurs T_g , T_b , X (p correspondant simplement à la pression totale réelle du mélange). Ainsi, alors que les valeurs T_g et X sont égales aux valeurs de référence puisqu'elles caractérisent le spectre de référence qui a été fixé, la température de source T_b correspond, quant à elle, à la température locale du gaz.

La valeur $F_i(s)$, au point d'abscisse s du milieu, s'explique finalement comme suit:

$$F_i(s) = F(C_{abs,i}, T(s), T_{ref}, p, X_{ref}) \quad (2.94)$$

Si on considère maintenant un point de l'enceinte (pour le calcul des conditions limites), la valeur de la fonction de distribution qui lui est associée est définie ci-dessous:

$$F_i(paroi) = F(C_{abs,i}, T_p, T_{ref}, p, X_{ref}) \quad (2.95)$$

T_p étant la température de paroi.

Les formules proposées afin de calculer ces fonctions varient selon la nature du gaz absorbant considéré. Pour le dioxyde de carbone, Denison propose:

$$F_i(s) = \frac{1}{2} \tanh[P(T_g, T_b, \xi)] + \frac{1}{2} \quad (2.96)$$

Avec $P = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^3 d_{lmn} \left(\frac{T_g}{2500} \right)^n \left(\frac{T_b}{2500} \right)^m \xi^l$ (2.97)

et $\xi = \ln(C_{abs,i}(s))$ (2.98)

Pour la vapeur d'eau, un terme supplémentaire apparaît correspondant à l'influence de la pression partielle sur l'absorptivité de la vapeur d'eau, on a ainsi:

$$F_i(s) = \frac{1}{2} \tanh[P(T_g, T_b, \xi - \xi_{sb})] + \frac{1}{2} \quad (2.99)$$

Avec $P = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^3 b_{lmn} \left(\frac{T_g}{2500} \right)^n \left(\frac{T_b}{2500} \right)^m (\xi - \xi_{sb})^l$ (2.100)

et $\xi_{sb} = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^2 c_{lmn} \left(\frac{T_b}{2500} \right)^n \xi^m (X)^{l+1}$ (2.101)

Les coefficients b_{lmn} , c_{lmn} , d_{lmn} sont explicités dans la référence [20].

Par la suite les coefficients de pondérations $a_i(s)$ s'obtiennent en utilisant la relation (2.93).

d. Calcul du coefficient d'absorption $k_i(s)$

La seconde prise en compte des valeurs locales du milieu va être réalisée lors du calcul du coefficient d'absorption local $k_i(s)$. La valeur de ce paramètre dépend en effet non seulement de la valeur de la température de la cellule de gaz considérée mais aussi de sa fraction molaire:

$$k_i(s) = N(T(s), p, X(s)) \times C_{abs,i}(T(s), p, X(s)) \quad (2.102)$$

Calcul de la densité molaire locale

En utilisant la loi des gaz parfaits, la densité molaire du gaz considéré pour des conditions thermophysiques quelconques peut s'exprimer en fonction de celle qu'il aurait pour des conditions thermophysiques standards ($p^o = 1 \text{ atm}$, $T = 273 \text{ K}$, $X^o = 1$). Ainsi:

$$N(s) = \frac{p}{p^o} \times \frac{T^o}{T(s)} \times \frac{X^o}{X(s)} \times N^o \quad (2.103)$$

Sous les conditions standards, la densité molaire du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau sont respectivement de $44,77 \text{ mol/m}^3$ et de $42,78 \text{ mol/m}^3$.

Calcul de la section d'absorption locale

Denison a introduit un autre terme correctif: la section d'absorption locale. Ce terme découle du fait que la discréétisation spectrale $\nu_{min,i,j}$, $\nu_{max,i,j}$ associée aux n sections d'absorption - fixées par l'utilisateur - a été réalisée pour des valeurs de référence ($T_{réf}$ et $X_{réf}$). Le spectre variant localement en fonction de la température et de la concentration, ces

intervalles ne correspondent plus aux mêmes sections d'absorption pour des valeurs locales différentes des valeurs de référence. Cependant, en supposant le comportement des gaz réels comme idéal, des valeurs locales de ces sections peuvent être obtenues; un gaz possède un comportement idéal lorsque le fait de modifier sa concentration ou sa température ne modifie pas les positions des raies mais uniquement leur amplitude (Figure 2.18).

Considérons une enceinte contenant un gaz non homogène et/ou non isotherme et recherchons la $i^{\text{ème}}$ section d'absorption locale $C_{abs,i}(s)$ correspondant à une cellule dont la température $T(s)$ et/ou la fraction molaire $X(s)$ sont différentes des valeurs de référence T_{ref} et X_{ref} . Le gaz étant supposé idéal, les raies d'absorption propres à cette cellule sont centrées aux mêmes nombres d'ondes qu'une cellule aux température et fraction molaire de référence; seules les amplitudes varient. Et, si $\psi_i(v)$ représente le découpage spectral (réunion de plusieurs intervalles) correspondant à la $i^{\text{ème}}$ section d'absorption de référence $C_{abs,i,ref}$, $\psi_i(v)$ doit aussi correspondre au découpage spectral propre à la section d'absorption locale $C_{abs,i}(s)$ d'une cellule à $T(s)$ et $X(s)$ différente des valeurs de références (Figure 2.17). Afin de connaître la valeur de la section d'absorption associée à ces deux valeurs $T(s)$ et $X(s)$, il faut résoudre l'égalité suivante:

$$F(C_{abs,i}(T), T_b = T_{ref}, T_g = T, X) = F(C_{abs,i,ref}, T_b = T_{ref}, T_g = T_{ref}, X_{ref}) \quad (2.104)$$

Cette propriété ne découle que d'une approximation du comportement d'un gaz réel, mais son application permet cependant d'incorporer de manière satisfaisante les effets anisothermes et hétérogènes.

La section d'absorption de référence $C_{abs,i,ref}$ est calculée quant à elle comme suit:

$$C_{abs,i,ref} = \sqrt{C_{abs,i} \times C_{abs,i+1}} \quad (2.105)$$

Par ailleurs, afin de calculer la section locale d'absorption, Denison propose de résoudre l'équation 2.104 en utilisant une méthode itérative (méthode de la bissection, méthode de Newton-Raphson ou une méthode couplant les deux).

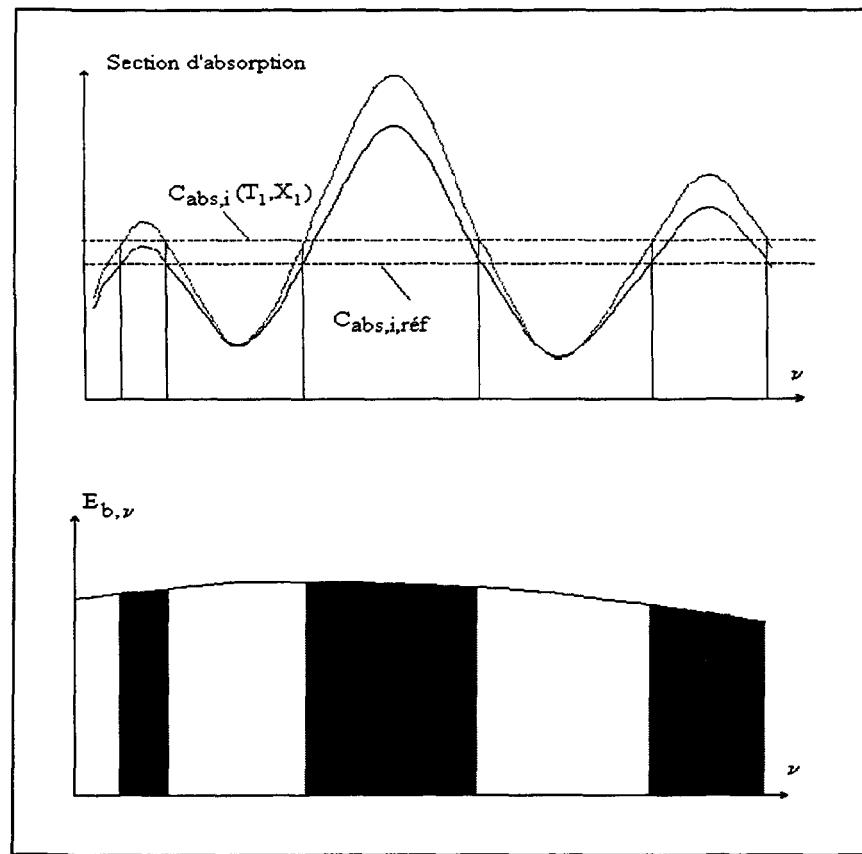


Figure 2.18: Illustration d'un spectre idéal

2.3.2.2.4 Le modèle SLW et l'équation de transfert

L'équation de transfert qu'il faut résoudre est (Cf. 2.76)

$$\frac{dI}{ds}(s) = \sum_i \sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} k_i(s) (I_\nu^o - I_\nu) d\nu \quad (2.106)$$

Par ailleurs, en introduisant l'intensité propre à chaque section d'absorption i , on a:

$$\sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} I_\nu d\nu = I_i \quad (2.107)$$

$$\sum_j \int_{\Delta\nu_{i,j}} I_\nu^o d\nu = a_i I^o \quad (2.108)$$

En combinant (2.106), (2.107) et (2.108), on obtient un système de L équations - L étant le nombre de sections d'absorption choisies - à résoudre.

$$\frac{dI_i}{ds}(s) = k_i(s) (a_i(s) I^0(s) - I_i(s)) \quad (2.109)$$

ou bien, pour une direction particulière m de la discrétisation angulaire choisie pour l'application de la méthode des ordonnées discrètes:

$$\frac{dI_{i,m}}{ds}(s) = k_i(s) (a_i(s) I^0(s) - I_{i,m}(s)) \quad (2.110)$$

On obtient ensuite la luminance $I(s)$ en quantifiant la double sommation suivante

$$I(s) = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^L \omega_m I_{i,m}(s) \quad (2.111)$$

où M représente le nombre total de directions angulaires

2.3.2.2.5 Conclusion

Le modèle SLW est basé sur un concept similaire à celui du modèle SPGG et mène au même type de résolution de l'ETR. Cependant des raffinements pour les calculs des coefficients d'absorption et des coefficients de pondération lui permettent d'être applicable aux milieux hétérogènes quelconques.

CHAPITRE 3

COMPARAISONS MONODIMENSIONNELLES

3.1 Introduction

Avant de pouvoir débuter les analyses de comparaisons, des études préparatoires sont nécessaires. La première consiste à valider les codes monodimensionnels relatifs aux différentes méthodes SNB-CK, CK, SLW et SPGG à l'aide de résultats de référence, et à montrer que la méthode SNB-CK 1 (l'ETR est résolue sur des bandes étroites de 25 cm^{-1}) pourra elle-même servir de méthode de référence pour les comparaisons. La seconde consiste à analyser différentes versions (pour divers regroupements et quadratures) de la méthode hybride SNB-CK et à choisir celles qui sont les plus intéressantes.

Ces pré-études effectuées, les comparaisons des modèles numériques retenus seront alors réalisables. Les cas monodimensionnels, nécessitant un temps de calcul beaucoup moins important que les cas bidimensionnels, sont appropriés pour analyser de façon détaillée la dépendance de la précision du flux aux parois et de la divergence du flux pour des conditions d'utilisation nettement différentes. Les paramètres considérés pour ces cas monodimensionnels sont: la distance entre les deux plaques parallèles et les champs de distribution de la température et de la fraction molaire. Cette analyse, bien que se rapprochant de celle effectuée par L. Pierrot [28, 29], s'en distingue nettement sous plusieurs aspects: différentes versions de la méthode SNB-CK sont introduites, un vaste

champ de paramètres est investigué et une attention particulière est portée à la variation de la divergence du flux au sein du milieu. Ce paramètre revêt, en effet, un caractère très important lorsque la modélisation du procédé industriel nécessite le couplage du code de rayonnement avec un autre code tenant compte par exemple des phénomènes de convection, de combustion... Ce second code fournit au code de rayonnement les champs de température et de fraction molaire mais a besoin de connaître les termes sources de chaleur qui se déduisent des valeurs de la divergence du flux calculées par le code de rayonnement.

Les cas bidimensionnels seront considérés ultérieurement dans le chapitre 4.

Sommaire du chapitre:

1. Validation des codes monodimensionnels - La méthode SNB-CK 1 sert de méthode de référence pour les comparaisons.
2. Recherche des variantes optimales de la méthode SNB-CK en fonction des deux variables: regroupement et quadrature numérique.
3. Comparaison des différentes méthodes pour le dioxyde de carbone.
4. Comparaison des différentes méthodes pour la vapeur d'eau.
5. Comparaison des différentes méthodes pour un mélange de ces deux gaz.

3.2 Validation des codes numériques propres aux méthodes SNB-CK, CK, SLW et SPGG

La validation des codes nécessite de comparer les résultats qu'ils fournissent avec soit des résultats de référence, ce qui nécessiterait par exemple d'utiliser une méthode raies par raies, soit des résultats disponibles dans la littérature. Cette seconde alternative a été retenue. Ils proviennent, d'une part, des travaux doctoraux de Denison [20] et surtout, d'autre part, de ceux de Pierrot [28]; ces deux auteurs ont utilisé pour valider leurs modèles une méthode raie par raie. Leur travaux ne portent cependant pas sur les mêmes propriétés de milieux: Denison considère des milieux dont la température et les dimensions d'enceinte varient respectivement entre 1 000 et 1 800K et entre 0.1 et 3m, tandis que Pierrot étudie des milieux dont les températures atteignent 2500K et l'épaisseur 10m. Les études de Denison présentant plus de diversité et correspondant mieux aux conditions des fours de combustion (en température et en dimension) qui seront considérées dans cette thèse, beaucoup plus de validations seront effectuées à partir de ces travaux. Les propriétés des milieux retenus sont fournies au tableau 3.1. Pour deux des cas tirés de cette thèse, les résultats de Kim et al [50] et Liu et al [37] sont aussi présentés.

Le maillage utilisé pour les calculs se compose de 30 nœuds et est rétréci au niveau des parois⁹ afin de pouvoir tenir correctement compte des variations de fraction molaire ou de température dans ces zones. Deux exceptions sont cependant faites: l'une pour le troisième cas (Tableau 3.1), la concentration devenant nulle au niveau des parois, un maillage non-uniforme n'est pas nécessaire; l'autre pour le quatrième cas, la distance atteignant 10 m, il

est nécessaire d'introduire un maillage non-uniforme possédant plus de mailles (50). La quadrature angulaire numérique associée à la méthode aux ordonnées discrètes est la quadrature S_8 . La quadrature numérique liée à la méthode SNB-CK 1 est par ailleurs la quadrature de Legendre à 20 points. Les résultats obtenus sont présentés aux figures 3.1 à 3.7.

Tableau 3.1: Cas tests utilisés pour la validation des méthodes SNB-CK 1, CK, SLW, SPGG. La distribution cosinusoïdale décrite par $(T_m; \Delta T)$ est calculée comme suit: $T(x) = T_m + \frac{\Delta T}{2} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, et celle parabolique $(T_0; T_1; T_2)$ comme suit $T(x) = 4 \frac{T_1 - T_0}{L} \left(x - \frac{x^2}{L}\right) + T_0$. L correspond à la distance entre les plaques.

Cas	Milieu gazeux	Distribution de température (K)	Distribution de concentration (%)	émissivité (ϵ)	$T(x=0)$	Épaisseur x (m)
1	H_2O	isotherme 1 000	100	1	0 0	0,1
2	H_2O	cosinusoïdale (1 000;500)	10	1	1 250 750	2
3	H_2O	isotherme 1 000	parabolique (0;100;0)	1	0 0	1
4	H_2O	parabolique (500,2 500,500)	10	1	500 500	0,25 à 10
5	CO_2	isotherme 1 000	20	0,7	2 000 300	0,1
6	CO_2	cosinusoïdale (1 250;1 000)	30	1	1 750 750	0,2
7	H_2O CO_2	isotherme 1 250	40 20	0,8	400 1 500	0,1

⁹ Les nœuds du maillage sont explicités à l'annexe C

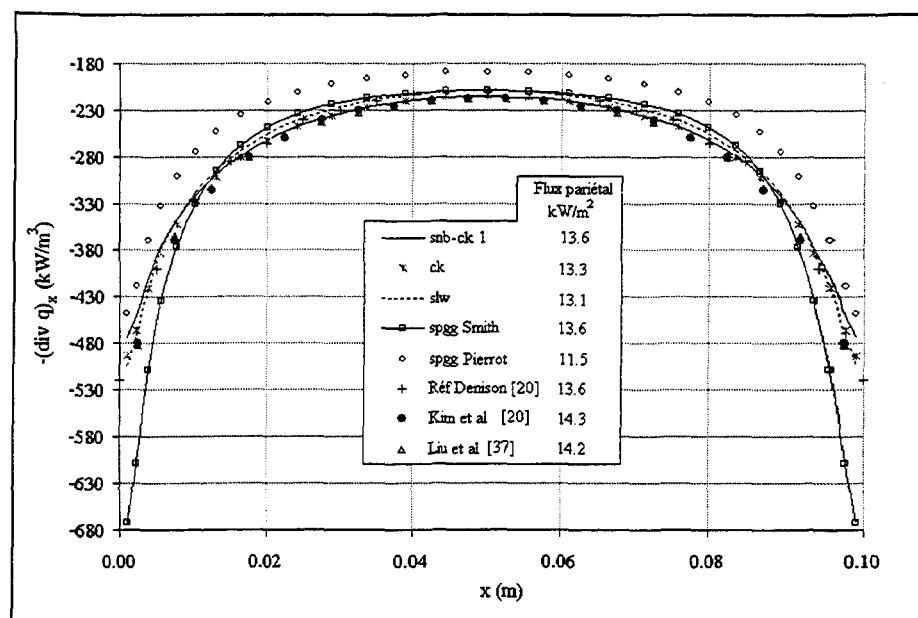


Figure 3.1: Cas 1, évolution de la valeur de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 000 K) et homogène (100%) de H₂O, valeur du flux pariétal en x=0.

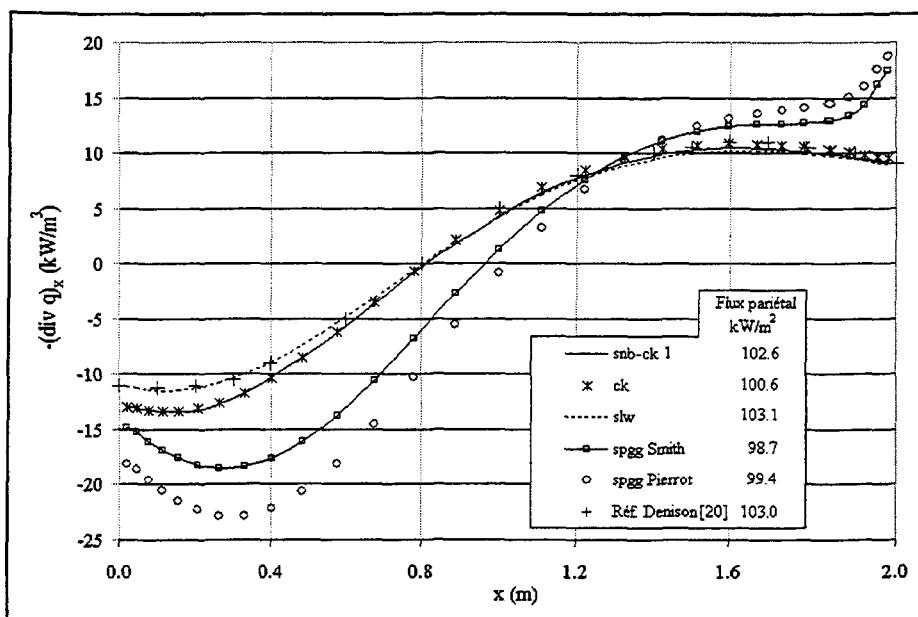


Figure 3.2: Cas 2, évolution de la valeur de la divergence du flux pour un milieu anisotherme (cosinusoïdal) et homogène (10%) de H₂O, valeur du flux pariétal en x=2.

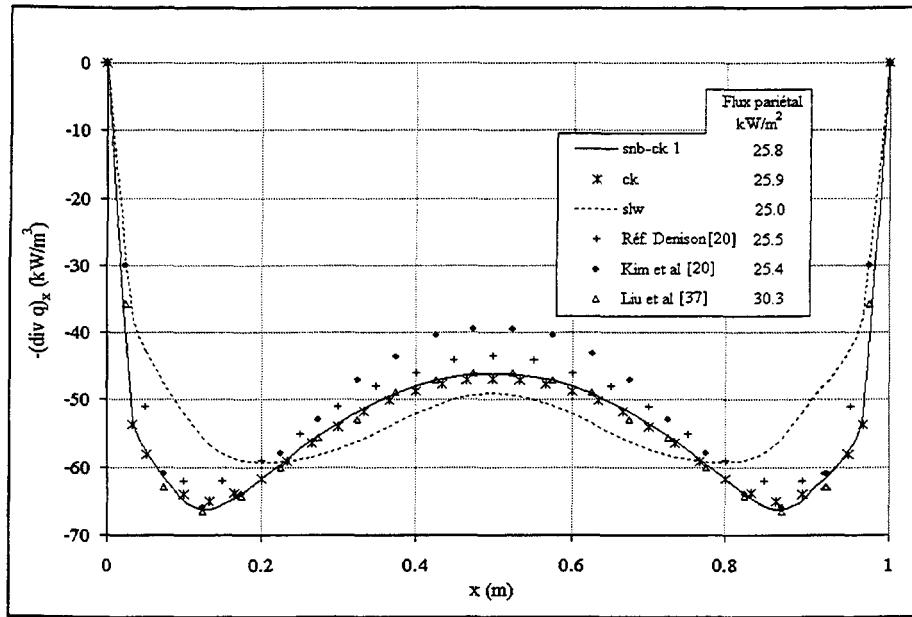


Figure 3.3: Cas 3, évolution de la valeur de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 000 K) et inhomogène (parabolique) de H_2O , valeur du flux pariétal en $x=0$.

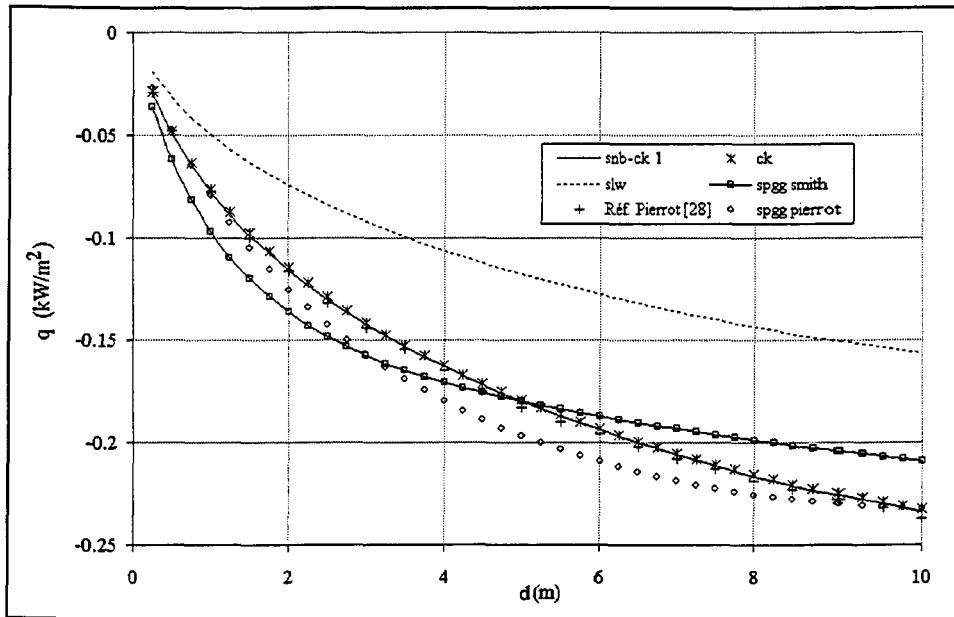


Figure 3.4: Cas 4, évolution de la valeur du flux pariétal en fonction de la distance entre les plaques parallèles, pour un milieu anisotherme (parabolique) et homogène (10%) de H_2O .

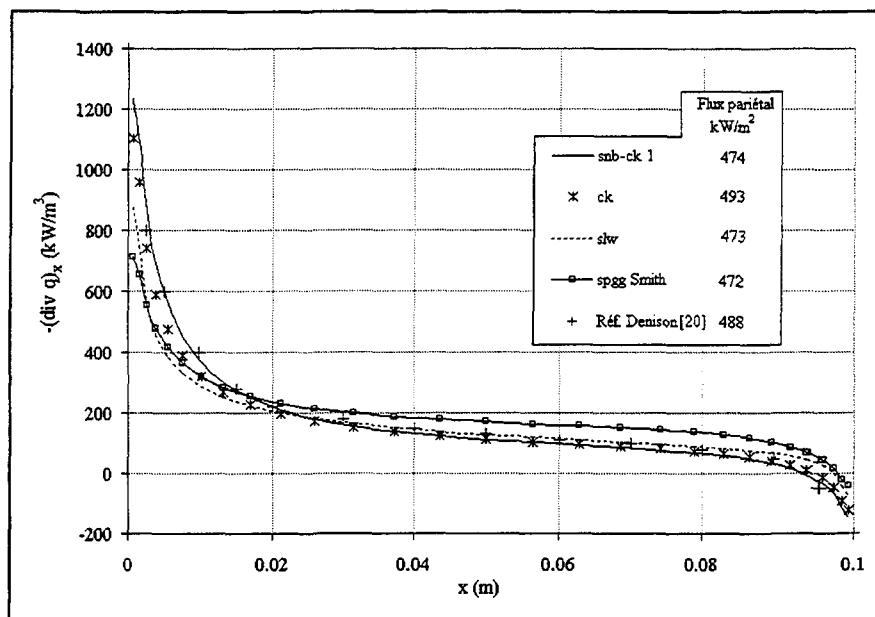


Figure 3.5: Cas 5, évolution de la valeur de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1000 K) et homogène (20%) de CO₂, valeur du flux pariétal en x=0,1.

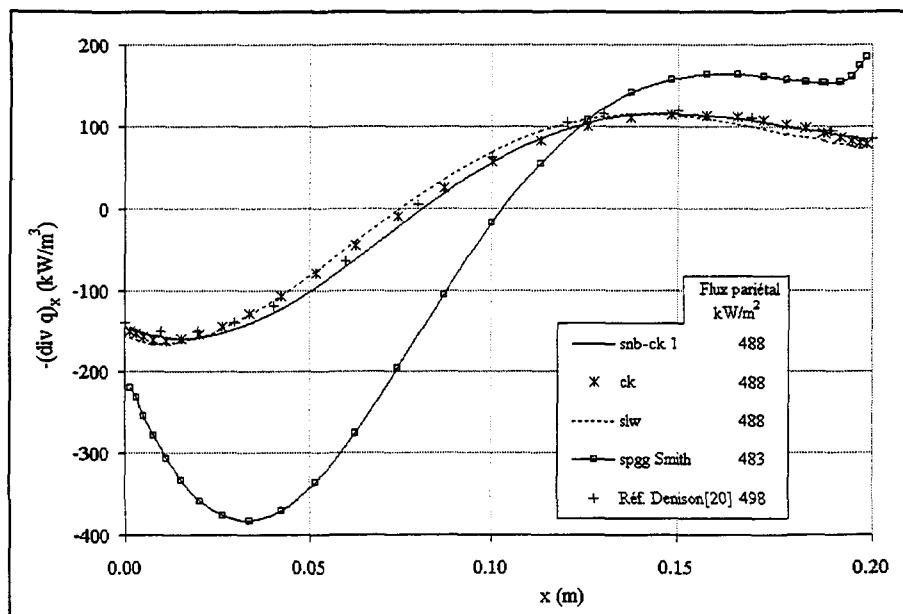


Figure 3.6: Cas 6, évolution de la valeur de la divergence du flux pour un milieu anisotherme (cosinusoïdal) et homogène (30%) de CO₂, valeur du flux pariétal en x=0,2.

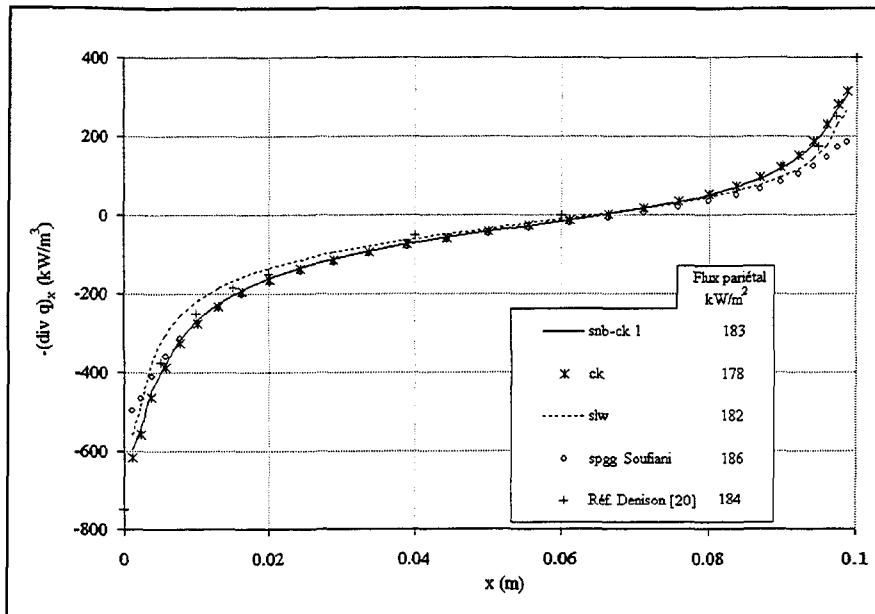


Figure 3.7: Cas 7, évolution de la valeur de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 250 K) et homogène (20% - 40%) de CO₂ et de H₂O. Le flux pariétal est calculé en x=0.

Ces tests permettent d'observer les bonnes correspondances des résultats des méthodes SNB-CK1, CK et SLW avec ceux fournis par la méthode de référence utilisée par Denison (Figures 3.1 à 3.3, 3.5 à 3.7), et ceci aussi bien pour la divergence du flux radiatif que pour le flux pariétal. Les écarts relatifs pour ce dernier sont inférieurs à 4%. Cet écart est calculé

comme suit: $\Delta(\%) = \frac{\phi_{modèle} - \phi_{référence}}{\phi_{référence}} \times 100$. Ces résultats sont donnés en détails au tableau

3.2. De plus, ces petites variations peuvent être attribuées aussi bien aux modélisations numériques qu'au maillage utilisé (aucune spécification du maillage n'est disponible dans les travaux de Denison). Pour le cas de référence de Pierrot (Figure 3.4), les résultats diffèrent: pour ces hautes températures, la méthode SLW ne permet plus d'obtenir des résultats de bonne précision et les écarts relatifs maximaux atteignent 51%. Les écarts

exprimés dans le tableau 3.2 pour ce cas correspondent aux écarts maximums trouvés avec chaque méthode lorsque la distance entre les plaques varie entre 0,1 et 10 m.

Les trois différentes versions de la méthode SPGG mènent, dans la plupart des cas, à des résultats de qualité inférieure aux autres méthodes. Ainsi, les écarts relatifs varient entre -4,2% et 3,2% pour les cas 2, 3, 5, 6 et 7, ils atteignent 15,5% pour le cas 1 (Figure 3.1) et 29% pour le cas 4 (Figure 3.4). Pour ce dernier cas, les résultats sont meilleurs que ceux de la méthode SLW. Par ailleurs, les écarts pour la divergence du flux sont eux toujours assez conséquents. Ainsi, l'écart relatif de la SPGG tabulée par Smith est de 20% au niveau des parois dans le premier cas (Figure 3.1), et atteint 150% pour le cas 5 anisotherme au point $x=0,03$ (Figure 3.5). Ces tests permettent de plus de visualiser les limitations théoriques des sommes pondérées. En effet, non seulement elles ne permettent pas de considérer le cas 3 non-homogène (Figure 3.3), mais en plus, les versions qui sont développées pour les cas de mélange imposent un rapport bien déterminé entre la pression partielle en vapeur d'eau (p_{H_2O}) et celle en dioxyde de carbone (p_{CO_2}); ceci explique l'absence de résultats de la somme pondérée tabulée par Smith pour le cas 7 (Figure 3.7).

Tableau 3.2: Écart relatif (en %) entre les valeurs des flux pariétaux trouvés avec les différents modèles de gaz réels et celles trouvées par Denison et al ou Pierrot et al (cas 4).

	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5	Cas 6	Cas 7
SNB-CK1	0,0	-0,4	1,2	1,9	-2,9	-2,0	-0,6
CK	-1,9	-2,3	1,6	2,8	0,8	-2,0	-3,0
SLW	-4,0	0,1	2,1	51,0	-3,0	-2,0	-1,0
SPGG Smith	-0,2	-4,2		29,0	3,2	-3,0	
SPGG Pierrot	-15,5	-3,4		20,6			
SPGG Soufiani							1,1
Liu et al	4,4		20,4				
Kim et al	5,1		0,4				

Conclusions

Ces validations permettent de constater le bon comportement des méthodes SNB-CK 1 et CK pour l'étude des milieux contenant de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone, et qui peuvent avoir des distributions en température et en fraction molaire quelconque. La méthode SLW a un comportement similaire pour ces cas tests tant que la température du milieu n'est pas trop importante. Enfin, la méthode SPGG montre quant à elle ses premières limitations: elle n'est bien sûr pas applicable pour des milieux hétérogènes (du fait de sa conception) et des erreurs notables sur l'évolution de la divergence du flux sont observables, en particulier pour des milieux anisothermes.

Pour la suite des comparaisons, il est nécessaire de choisir une méthode qui pourra servir de référence. Ce rôle sera joué par la méthode SNB-CK 1; cette méthode permet en effet de reproduire de façon fidèle les cas de référence considérés dans cette partie.

Avant d'approfondir les comparaisons entre ces méthodes, des nouvelles méthodes vont être introduites. Celles ci sont les variantes de la méthode hybride SNB-CK regroupant des bandes étroites entre elles et utilisant des quadratures d'ordre quelconque (Cf. § 2.3.1.2.3).

3.3 Variantes de la méthode SNB-CK

3.3.1 Introduction

La méthode SNB-CK 1, utilisée précédemment, est une méthode très précise mais qui nécessite de devoir résoudre l'équation de transfert radiatif sur 367 bandes étroites et pour une quadrature numérique utilisant 20 points. Cependant, le choix des deux paramètres, la largeur des intervalles spectraux et le nombre de points (ordre) de la quadrature numérique(g_i, ω_i) servant à définir les coefficients d'absorption $k_{A\bar{\nu}i}$, n'est pas imposé et est laissé à l'utilisateur. Afin de réduire les temps de calculs, il est alors intéressant d'essayer de réduire d'une part le nombre de bandes et d'autre part l'ordre utilisés dans la quadrature numérique. Il convient ensuite d'observer leurs influences sur la précision des résultats obtenus. Les influences sur le temps de calcul seront analysées ultérieurement à l'aide des modèles bidimensionnels au chapitre 4.

3.3.2 Les variantes à regroupement uniforme SNB-CK M

Deux types de regroupements sont considérés dans cette étude, d'une part des regroupements uniformes et d'autre part un regroupement tenant compte des bandes

d'émission du dioxyde de carbone. Les regroupements uniformes sont réalisés de façon à définir des intervalles spectraux consécutifs regroupant toujours le même nombre M de bandes étroites, la méthode SNB-CK étudiée sur ces types d'intervalles est nommée SNB-CK M.

Si le regroupement considéré est uniforme avec 10 bandes (SNB-CK 10), le nombre de bandes larges sur lesquelles sont résolues les équations de transfert radiatif n'est plus que de 37. Le nombre de résolutions devient alors $37*N$ pour un gaz seul et $37*N^2$ pour un mélange de deux gaz, N étant l'ordre de la quadrature numérique. Le temps de calcul dépendant du nombre de résolutions de l'ETR à effectuer, une diminution du nombre de résolutions permettra un gain en temps de calcul. La relation entre ces deux nombres est explicitée au dernier chapitre. Le tableau 3.3 présente le nombre de résolutions nécessaires dans le cas de regroupements de 1, 10, 20 et 30 bandes et pour une quadrature à 3, 5, 7, 15 et 20 points.

Tableau 3.3: Nombre d'équations de transfert radiatif à résoudre en fonction du regroupement et de l'ordre de la quadrature considérés.

	Nombre de bandes	N=3	N=5	N=7	N=15	N=20
SNB-CK 1 CO ₂ ou H ₂ O CO ₂ +H ₂ O	365	1 095 3 285	1 825 9 125	2 555 1 7885	5 475 8 2125	7 300 14 6000
SNB-CK 10 CO ₂ ou H ₂ O CO ₂ +H ₂ O	37	111 333	185 925	259 1813	555 8325	740 14 800
SNB-CK 20 CO ₂ ou H ₂ O CO ₂ +H ₂ O	19	57 171	95 475	133 931	285 4 275	380 7 600
SNB-CK 30 CO ₂ ou H ₂ O CO ₂ +H ₂ O	13	39 117	65 325	91 637	195 2 925	260 5 200

Il convient pour ces variantes SNB-CK M de trouver le meilleur compromis possible entre, d'une part, le nombre de bandes à regrouper, la quadrature à utiliser et, d'autre part, la précision désirée.

3.3.3 La variante SNB-CK OPT

Ce regroupement est inspiré des bandes d'émission du gaz carbonique qui correspondent aux longueurs d'ondes suivantes: 2, 2,7, 4,3 et 15 μm . Les quatre bandes larges d'émission primaire regroupent au total 96 bandes étroites; sur les autres bandes étroites (soit 269), le CO₂ peut être considéré comme transparent. Le découpage du spectre a été réalisé en considérant des bandes relativement larges sur les bandes de transparence (ces bandes peuvent regrouper jusqu'à 40 bandes étroites) et plus étroites pour les bandes d'émission (7 à 8 bandes étroites). Ce découpage est présenté au tableau 3.4.

Ainsi 8 bandes sont affectées aux fenêtres de transparence du CO₂ sur lesquelles ce gaz peut être modélisé par un seul gaz gris transparent; sur les 13 autres le CO₂, étant participant, est modélisé par N gaz (N est fixé par l'utilisateur). Ce regroupement présente l'avantage de diminuer de façon importante le nombre (nb) de résolutions à effectuer, qui devient:

$$nb=8+13*N \text{ avec le CO}_2$$

$$nb=21*N \text{ avec H}_2\text{O (ce gaz est participant sur tout le spectre)}$$

$$nb=8*N+13*N^2 \text{ pour un mélange H}_2\text{O+CO}_2$$

Par ailleurs, bien que ce regroupement ne semble adéquat à priori, que dans le cas de l'étude d'une enceinte contenant uniquement du CO₂, il sera aussi utilisé en présence de H₂O.

La méthode SNB-CK liée à ce regroupement est notée SNB-CK OPT. Le tableau 3.5 présente le nombre d'*ETR* à résoudre pour cinq valeurs de *N*.

Tableau 3.4: Regroupement des bandes en tenant compte des bandes primaires d'émission du CO₂.

numéro de la bande large	nombre de bandes regroupées	borne inférieure (μm)	borne supérieure (μm)
1	40	1.0738	1.2030
2	40	1.2030	1.3675
3	40	1.3675	1.5842
4	40	1.5842	1.8824
5¹⁰	8	1.8824	1.9560
6	8	1.9560	2.0356
7	7	2.0356	2.1108
8	35	2.1108	2.5890
9	7	2.5890	2.7119
10	7	2.7119	2.8470
11	7	2.8470	2.9963
12	33	2.9963	3.9801
13	7	3.9801	4.2781
14	7	4.2781	4.6253
15	7	4.6253	5.0314
16	29	5.0314	7.9208
17	8	7.9208	9.4118
18	8	9.4118	11.5942
19	8	11.5942	15.0943
20	7	15.0943	20.5128
21	12	20.5128	53.3333

¹⁰ Les termes en gras correspondent aux bandes pour lesquelles le CO₂ est un gaz participant

Tableau 3.5: Nombre de résolutions de l'ETR à effectuer avec la version optimisée.

SNB-CKOPT	N=3	N=5	N=7	N=15	N=20
CO ₂	47	73	99	203	268
H ₂ O	63	105	147	315	420
CO ₂ +H ₂ O	141	365	693	3045	5360

Différents tests sont présentés ci-après avec la méthode SNB-CK 1 et permettent de visualiser tout d'abord l'influence de l'ordre de la quadrature utilisé, puis l'influence du regroupement utilisé: SNB-CK 10, SNB-CK 20, SNB-CK 30 et SNB-CK OPT.

3.3.4 Tests sur l'ordre de la quadrature

Différentes recherches dans la littérature [3-4, 23-24] permettent de penser que l'utilisation d'une quadrature de Gauss-Lobatto d'ordre 7 est suffisante afin d'obtenir un résultat de bonne précision. Cependant un travail récent de Liu et al [37] permet d'envisager une diminution de cet ordre en considérant par exemple des quadratures de Gauss-Legendre à 4 ou 5 points. Comme il a été décrit dans les tableaux 3.3 et 3.5, une diminution de l'ordre de la quadrature permettrait une diminution du nombre de résolutions de l'ETR et donc une réduction du temps de calcul. Afin de visualiser l'influence de la quadrature, six tests sont présentés ci-dessous avec de la vapeur d'eau (Tableau 3.6). Les quadratures qui sont confrontées les unes aux autres sont les quadratures de Legendre à 20, 15, 7, 5 et 3 points et la quadrature de Gauss Lobatto à 7 points et elles utilisées avec la méthode SNB-CK 1.

D'un point de vue de la notation, la méthode SNB-CK 1 utilisant une quadrature de Legendre à 7 points est nommée SNB-CK 1-7l; la lettre l correspond à la quadrature de Legendre, g fait référence à celle de Gauss-Lobatto. Les résultats obtenus sont présentés aux figures 3.8 à 3.13.

Tableau 3.6: Cas tests utilisés pour la visualisation de l'influence des différentes quadratures

cas	Distribution de température (K)	Distribution de concentration (%) pour H ₂ O	ε	T(x=0) T(x=L) (K)	Épaisseur x (m)
1	isotherme 1 500	20	1	0 0	1
2	isotherme 1 500	10	1	0 0	1
3	isotherme 1 800	10	1	0 0	1
4	cosinusoïdale (1 250;1 000)	20	0.8	1 750 750	0,7
5	parabolique (300;1 500;300)	20	1	300 300	0
6	isotherme (1 600)	parabolique (0;30;0)	1	0 0	1

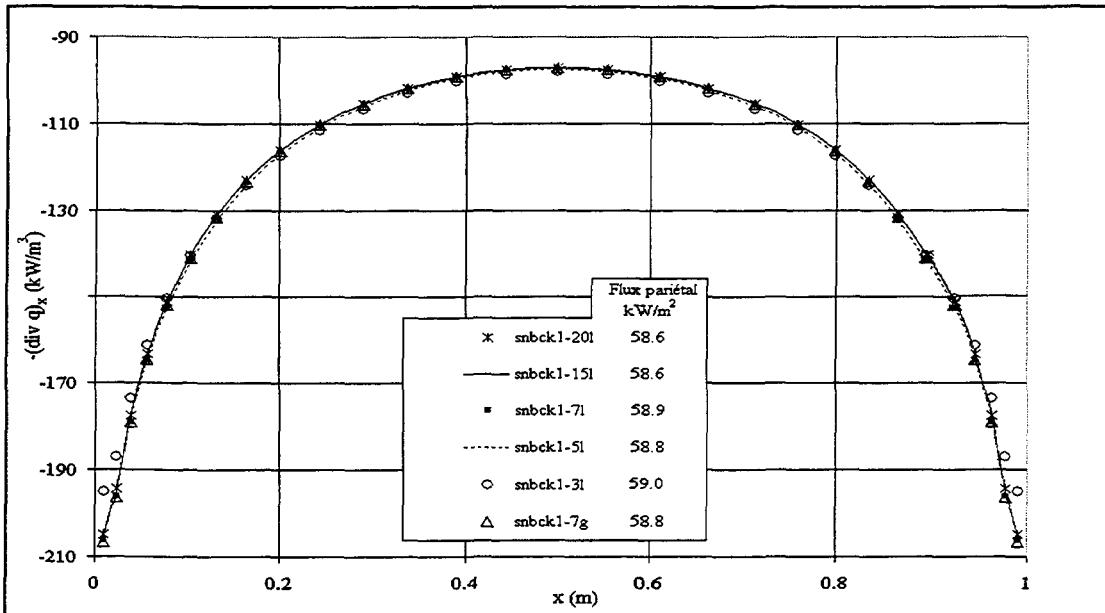


Figure 3.8: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 500 K) et homogène (20%) de vapeur d'eau (Cas 1), valeur du flux pariétal en $x=0$.

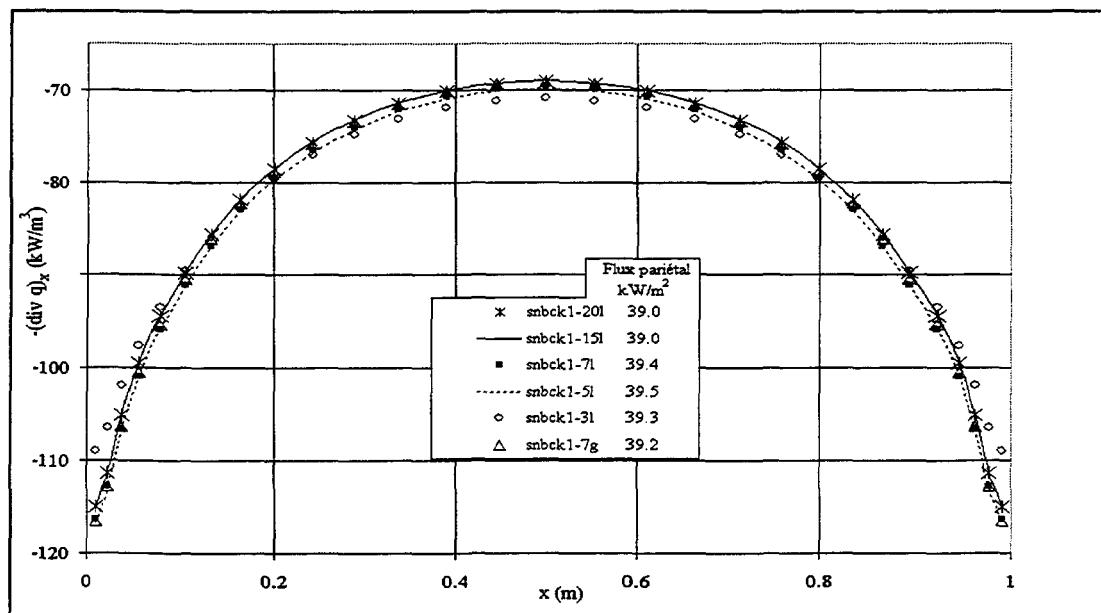


Figure 3.9: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 500 K) et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 2), valeur du flux pariétal en $x=0$.

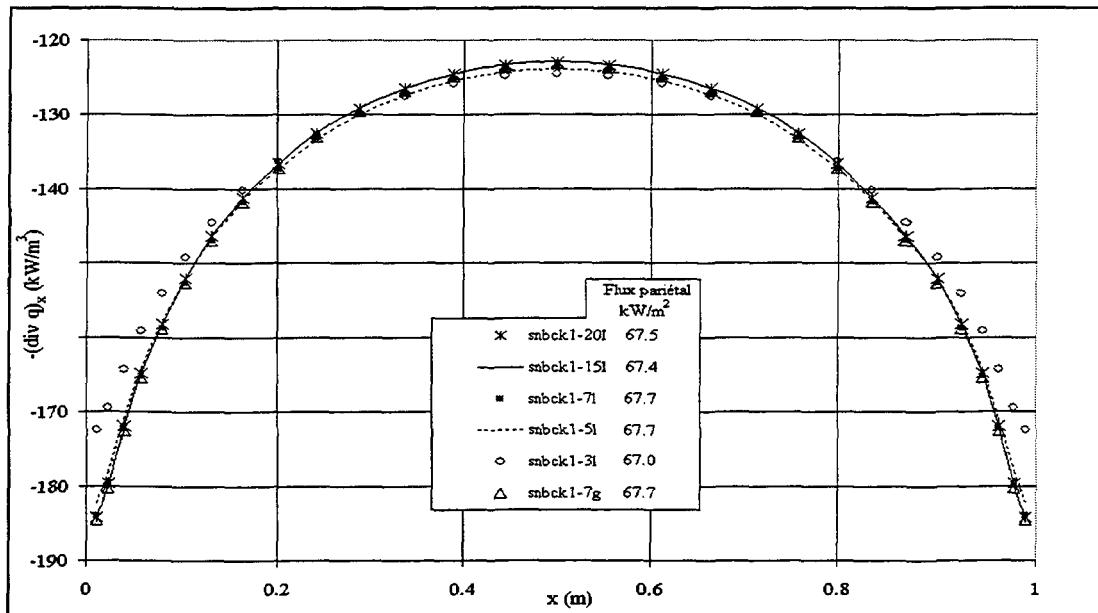


Figure 3.10: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 800 K) et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 3), valeur du flux pariétal en $x=0$.

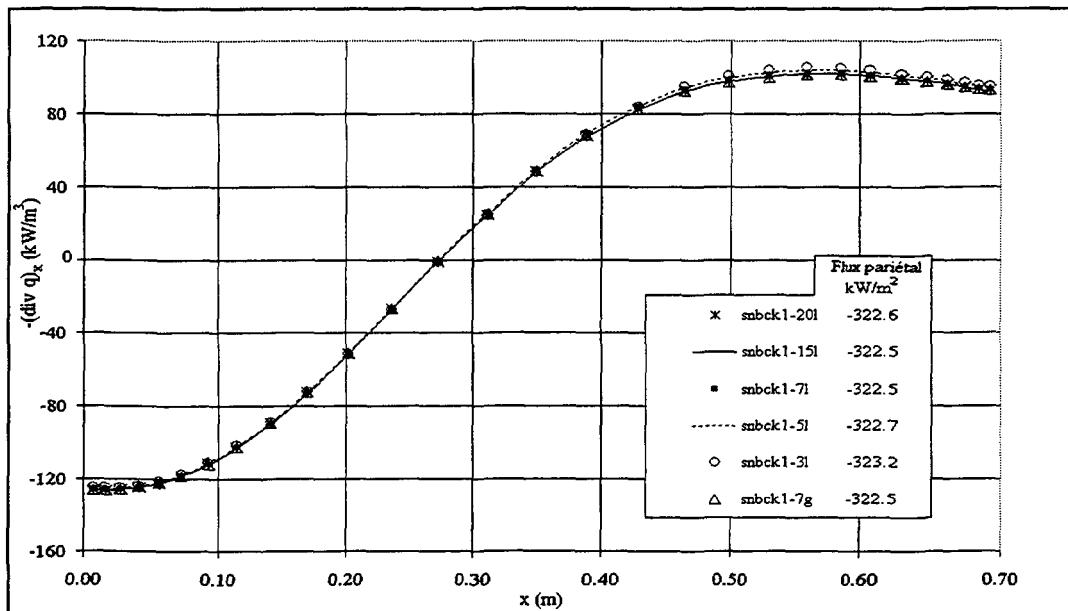


Figure 3.11: Évolution de la divergence du flux pour un milieu anisotherme (cosinusoïdal) et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 4), valeur du flux pariétal en $x=0$.

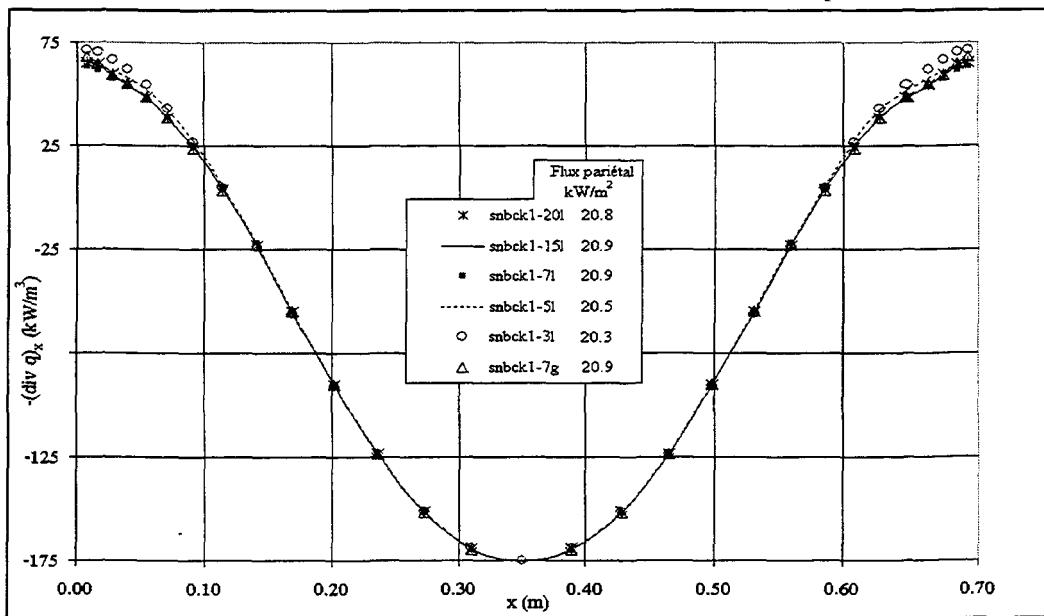


Figure 3.12: Évolution de la divergence du flux pour un milieu parabolique et homogène (10%) de vapeur d'eau (Cas 5), valeur du flux pariétal en $x=0$.

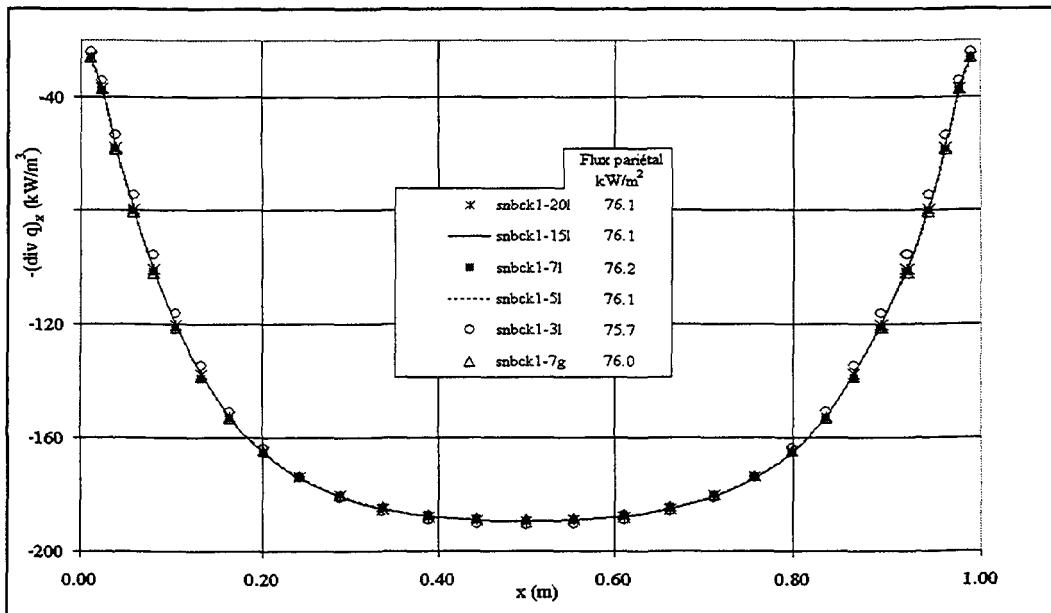


Figure 3.13: Évolution de la divergence du flux pour un milieu isotherme (1 600 K) et inhomogène (parabolique) de vapeur d'eau (Cas 6), valeur du flux pariétal en $x=0$.

Ces six études permettent d'obtenir de nombreux renseignements sur l'influence de la quadrature considérée. Tout d'abord, il peut être observé que pour toutes les quadratures, les résultats obtenus pour les flux pariétaux sont assez semblables; les écarts relatifs entre les différents résultats sont ainsi inférieurs à 2,4% (Tableau 3.7)¹¹. La divergence du flux radiatif est quant à elle sujette à plus de variations tout dépendant de la quadrature utilisée. Ainsi, alors que les résultats sont similaires avec les quadratures à 15 et 20 points, on peut noter une légère dispersion des résultats lorsque l'ordre de la quadrature est diminué. La similitude des résultats fournis par les quadratures 15 et 20 permet en outre de conclure que la convergence numérique est atteinte pour un ordre égal à 15.

Les figures 3.8 à 3.13 illustrant l'évolution de la divergence du flux pour les différentes quadratures permettent d'observer que les résultats fournis avec les deux quadratures à 7 points sont très semblables à ceux fournis par la quadrature à 20. Cette observation peut être confirmée par le calcul des écarts relatifs. Cependant avant d'exprimer les valeurs des écarts relatifs, il est important d'observer les évolutions des divergences, car ces valeurs peuvent entraîner des conclusions erronées. En effet, il peut advenir que les écarts relatifs deviennent importants alors que les écarts effectifs entre les courbes sont minimes. On peut observer ce phénomène pour le cas 4 (Figure 3.11): pour $x=0,27$, les valeurs de la divergence sont sensiblement les mêmes et sont respectivement $-1,048 \text{ kW/m}^3$ pour $N=20$ et $-0,45 \text{ kW/m}^3$ pour $N=7$, l'écart relatif obtenu est quant à lui de 57%. Le problème est identique pour le cas 5 (Figure 3.12). Pour de telles évolutions, certaines zones ne doivent pas être considérées. En tenant compte de ces remarques, il peut être observé que les écarts

¹¹ La quadrature de référence sera la quadrature de Gauss-Legendre à 20 points

maximums entre les valeurs de la divergence du flux trouvées avec une quadrature à 7 points et celles trouvées avec une quadrature à 20 points n'atteignent que 4,6% pour le cas 5 (distribution parabolique), et restent inférieurs à 1,3% pour les cinq autres (Tableau 3.8 et Figures 3.8 à 3.13). Ces résultats corroborent les suggestions faites dans la littérature conseillant d'utiliser une quadrature à 7 points. Par ailleurs, aucune réelle différence n'est observable entre les deux types de quadratures, Gauss-Lobatto ou Gauss-Legendre.

La précision des résultats obtenus avec la quadrature de Gauss-Legendre à 5 points reste tout à fait similaire à celles des quatre précédentes. En effet, au maximum les écarts atteignent -1.8% pour le flux pariétal (cas 5) et 2.8% pour la divergence du flux (cas 6), et ils restent dans la majorité des cas de l'ordre de 1%.

La chute en précision est beaucoup plus importante pour la divergence du flux lorsque la quadrature considérée est à 3 points. Une augmentation importante des écarts relatifs est ainsi notable au niveau des parois: à l'exception de la distribution sinusoïdale en température, les écarts varient entre de -8.2% et 9.1% et sont au minimum en valeur absolue de 4.2%. Le fait de trouver, avec la quadrature de Legendre à 3 points, des flux pariétaux de bonne précision et des erreurs importantes sur la divergence du flux peut paraître contradictoire mais rejoint au contraire les conclusions qui peuvent être obtenues avec une modélisation de gaz gris: une modélisation de gaz gris peut permettre d'obtenir une bonne valeur du flux pariétal mais pas de la divergence. La divergence du flux semble nécessiter une quadrature numérique contenant un plus grand nombre de points que celle nécessaire pour le flux pariétal; l'utilisation de trois gaz n'est pas suffisante pour retrouver le comportement du gaz réel.

Tableau 3.7: Écart relatif (en %) entre les résultats du flux pariétal fournis par les quadratures à 15, 7, 5 et 3 points et ceux fournis par la quadrature à 20 points.

Quadrature	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5	Cas 6
Legendre 15	0,0	-0,2	0,0	0,0	0,2	0,1
Legendre 7	0,5	1,0	0,4	0,0	0,3	0,1
Gauss-Lobatto 7	0,3	0,4	0,4	0,0	0,1	-0,1
Legendre 5	0,6	1,3	0,3	0,0	-1,8	0,1
Legendre 3	0,3	0,8	-0,7	0,2	-2,4	-0,6

Tableau 3.8: Écart relatif (en %) entre les résultats des divergences du flux fournis par les quadratures à 15, 7, 5 et 3 points et ceux fournis par la quadrature à 20 points.

Quadrature	Cas 1		Cas 2		Cas 3		Cas 4		Cas 5		Cas 6	
	x=0	x=0,5	x=0	x=0,5	x=0	x=0,5	x=0	x=0	x=0,35	x=0	x=0,5	
Legendre 15	0,0	0,0	-0,1	-0,2	0,1	-0,1	0,1	0,1	0,0	0,4	0,0	
Legendre 7	0,7	0,2	1,2	0,7	-0,1	0,4	0,0	-2,7	0,7	0,7	-0,1	
Lobatto 7	0,9	0,0	1,3	-0,1	0,2	0,2	-0,1	-4,6	0,7	0,0	-0,5	
Legendre 5	0,2	0,3	1,5	1,0	-1,0	0,7	0,1	-0,6	0,3	2,8	0,0	
Legendre 3	-4,7	0,1	-5,2	2,6	6,4	1,2	-1,0	9,1	0,1	8,2	0,6	

Conclusions

Deux quadratures se démarquent des autres pour leur bon compromis entre le nombre de résolutions de l'ETR et la précision des résultats trouvés; ce sont les quadratures de Legendre à 5 et 7 points. Les quadratures à 7 points fournissent des résultats ayant une précision légèrement supérieure, semblable à celle obtenue avec la quadrature à 20 ou à 15 points; cette méthode nécessite en contrepartie plus de résolutions que celles à 5 points. Aucune modification importante n'est visible par ailleurs entre les résultats fournis par la quadrature de Gauss-Lobatto à 7 points et ceux trouvés à l'aide de Legendre du même

ordre. La quadrature à 3 points permet d'obtenir des résultats rapides, satisfaisants en précision pour le flux pariétal mais discutables pour la divergence du flux.

3.3.5 Comparaison des efficacités respectives des différents regroupements

La partie précédente a permis d'évaluer l'influence de la quadrature pour la méthode SNB-CK 1 (sans regroupement). Trois ordres N de quadratures de Legendre peuvent être retenus, 3, 5 et 7, bien que la quadrature à 3 points fournit a priori des résultats de bien moindre qualité pour la divergence du flux. Il convient maintenant d'évaluer leur influence pour différents regroupements. Quatre regroupements sont considérés: trois uniformes avec $M=\{10; 20; 30\}$ et le quatrième selon les bandes d'émission primaires du CO₂. Les évaluations sont effectuées à l'aide des mêmes cas tests que ceux de la partie précédente (Tableau 3.6), et en utilisant toujours une quadrature S_8 et le maillage à 30 nœuds resserrés au niveau des parois. Ces évaluations vont permettre de trouver les meilleurs compromis regroupement/quadrature qui seront ensuite comparés de façon approfondie avec les autres types de méthodes (SLW, CK ...) pour des milieux contenant de la vapeur d'eau, du dioxyde de carbone ou un mélange de ces deux gaz. Afin de pouvoir comparer la pertinence des différentes variantes de la méthode hybride SNB-CK, les résultats qu'elles fournissent pour les six cas tests vont être comparés à ceux obtenus avec la méthode SNB-CK 1-20¹² (pas de regroupement de bandes et utilisation d'une quadrature de Gauss-Legendre à 20 points). Ces comparaisons vont être présentées d'une part dans le tableau 3.9, dans lequel sont explicités les écarts relatifs pour les flux pariétaux, et

¹² La lettre l est désormais omise; les quadratures utilisées avec les méthodes SNB-CK sont maintenant toujours des quadratures de Gauss-Legendre.

d'autre part à l'aide des figures 3.14 à 3.19 illustrant l'évolution des écarts relatifs pour la divergence du flux. Du fait du grand nombre de variantes considérées, deux figures sont fournies pour chaque cas, l'une illustrant les évolutions des méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-7, SNB-CK 10-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK OPT 7, SNB-CK OPT 5, l'autre illustrant celles des méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3.

Pour toutes ces variantes, la précision sur les flux pariétaux reste tout à fait acceptable. Les écarts relatifs restent en effet inférieurs à 4% (Tableau 3.9). Bien que les trois variantes SNB-CK 30-7, SNB-CK 30-5 et SNB-CK OPT-3 fournissent des résultats légèrement moins précis, aucune distinction nette n'est réellement observable. La distinction est, comme précédemment, plus conséquente pour la divergence du flux. Une bonne correspondance des résultats est ainsi obtenue pour le cas 4 (distribution sinusoïdale de la température): les différences des écarts entre les méthodes sont au maximum de 6,5%, voire de 3% si la méthode SNB-CK OPT 3 est omise (Figure 3.17) et les écarts relatifs restent au maximum de 4,5%. Pour le cas 5, les écarts au contraire atteignent au contraire des valeurs beaucoup plus importantes (Figure 3.18); une différence de 25% est observée au niveau des parois entre les écarts obtenus avec les variantes SNB-CK 20-5 et SNB-CK 30-3. Pour tous les cas, à l'exception du cas cosinusoidal (cas 4), les différences maximales entre les méthodes sont obtenues au niveau des parois, zone de discontinuité (température ou concentration) entre le milieu gazeux et la paroi froide; les écarts au sein du milieu sont bien moindres (quand ces écarts ont un sens, c'est à dire pour des valeurs de la divergence du flux éloignées de 0). Ainsi pour le cas 2, les écarts atteignent 20% au niveau des parois (entre les versions SNB-CK OPT-

3 et SNB-CK 30-7) pour seulement 3% au sein du milieu. Pour le cas cosinusoïdal, la distinction entre les variantes se produit entre la zone pariétale et le centre du milieu gazeux, cette particularité peut être une conséquence de la faible variation de la température au niveau des parois.

A la lumière du tableau 3.10, cinq variantes se distinguent des autres pour la bonne précision des résultats qu'elles fournissent. Ainsi, les variantes SNB-CK 10-7, SNB-CK 10-5, SNB-CK 20-5, SNB-CK OPT 7 et SNB-CK OPT 5 fournissent pour les cas 1, 2, 3, 4 et 6 des écarts relatifs inférieurs à 3,5%; ces écarts augmentent cependant pour le cas parabolique en température (cas 5) au niveau des parois. Deux raisons peuvent expliquer la moins bonne précision des autres méthodes: d'une part un trop grand nombre de bandes regroupées ensemble dans les variantes à regroupement uniforme, d'autre part un ordre de quadrature trop faible. Ainsi, les méthodes SNB-CK 30 fournissent pour la majorité des cas, des écarts relatifs au niveau des parois beaucoup plus importants que ceux des cinq variantes nommées précédemment. L'écart moyen au niveau des parois est en effet de 9,24% pour la SNB-CK 30-7 contre 3,4% pour la SNB-CK 10-7. De même, une nette augmentation des écarts relatifs peut être observée lorsque l'ordre de la quadrature est trop faible et pris égal à 3.

Rappel des cas considérés (Cf. Tableau 3.6)

cas	température (K)	concentration (%)	ε	$T(x=0 \text{ et } x=L)$	$x (m)$
1	isotherme, 1 500	homogène, 20	1	0 0	1
2	isotherme, 1 500	homogène, 10	1	0 0	1
3	isotherme, 1 800	homogène, 10	1	0 0	1
4	cosinusoidale	homogène, 20	0.8	1 750 ... 750	0,7
5	parabolique	homogène, 20	1	300 300	0
6	isotherme, 1600	parabolique	1	0 0	1

Table 3.9: Écart relatif (en %) entre les résultats du flux pariétal fournis par les 12 variantes et ceux fournis par la méthode SNB-CK 1-20.

Quadrature	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5	Cas 6
SNB-CK 10-7	0,7	1,5	0,7	0,0	-3,2	0,2
SNB-CK 10-5	0,5	1,3	0,3	0,0	-3,3	0,0
SNB-CK 10-3	0,1	0,4	1,2	0,2	-2,6	-0,8
SNB-CK 20-7	1,0	2,2	1,4	0,0	-3,7	0,6
SNB-CK 20-5	-2,0	2,1	1,1	0,0	-3,3	0,4
SNB-CK 20-3	0,9	0,6	0,9	0,3	-2,0	-0,1
SNB-CK 30-7	2,4	-3,8	2,3	-0,2	-1,2	1,8
SNB-CK 30-5	2,1	-3,3	1,6	-0,1	-1,6	1,4
SNB-CK 30-3	0,8	1,4	0,9	0,1	-1,4	-0,3
SNB-CK OPT-7	0,2	1,0	0,3	0,0	-3,6	-0,4
SNB-CK OPT-5	0,2	0,7	-0,3	0,1	-3,4	-0,5
SNB-CK OPT-3	-1,0	-1,9	-3,3	0,5	-3,7	-1,9

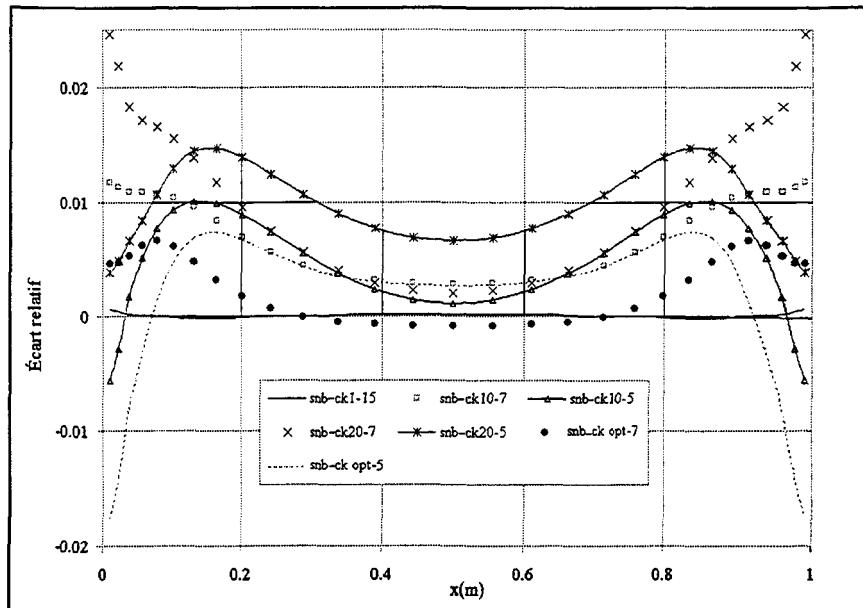
Tableau 3.10: Écarts relatifs (%) pour les différentes variantes de la divergence du flux

	ETR	Cas 1		Cas 2		Cas 3		Cas 4		Cas 5		Cas 6	
		x=0	x=0,5	x=0	x=0,5	x=0	x=0,5	x=0	x=0,35	x=0,04	x=0,56	x=0	x=0,5
SNB-CK 10-7	259	1,2	0,3	3,0	1,0	0,4	0,8	-0,2	2,5	5,7	0,2	6,5	-0,1
SNB-CK 10-5	185	-0,6	0,1	0,4	1,4	-1,8	1,1	-0,4	2,3	5,9	0,2	1,6	-0,2
SNB-CK 10-3	111	-6,8	1,6	-7,4	2,9	-8,0	1,0	-1,3	4,2	16,6	-0,4	-11,0	1,1
SNB-CK 20-7	133	2,5	0,2	4,6	1,5	1,7	1,4	0,6	8,9	11,4	0,8	8,9	-0,1
SNB-CK 20-5	95	0,4	0,7	1,7	2,4	-0,8	1,8	0,5	3,5	13,4	0,9	3,1	0,3
SNB-CK 20-3	57	-6,5	3,0	-7,2	3,3	-7,8	1,6	-0,7	4,4	19,1	-0,7	-11,1	2,4
SNB-CK 30-7	91	6,2	1,3	9,0	2,5	4,9	1,8	1,2	2,8	10,5	2,0	14,4	0,7
SNB-CK 30-5	65	5,4	1,3	5,7	2,6	2,2	1,7	0,6	2,4	11,8	1,5	7,4	0,7
SNB-CK 30-3	39	-3,6	1,1	-5,0	2,9	-6,1	0,5	-1,7	2,9	23,9	-0,2	-9,2	0,8
SNB-CK OPT 7	99	0,5	0,0	0,7	0,7	-0,5	0,5	-0,5	2,6	7,3	0,0	1,3	-0,6
SNB-CK OPT 5	73	-1,8	0,3	-1,0	1,0	-3,2	0,6	-1,0	2,3	5,4	0,6	-0,8	-0,2
SNB-CK OPT 3	47	-9,1	1,1	-10,1	1,1	-10,9	-0,6	-4,0	5,2	14,0	-3,1	-14,3	1

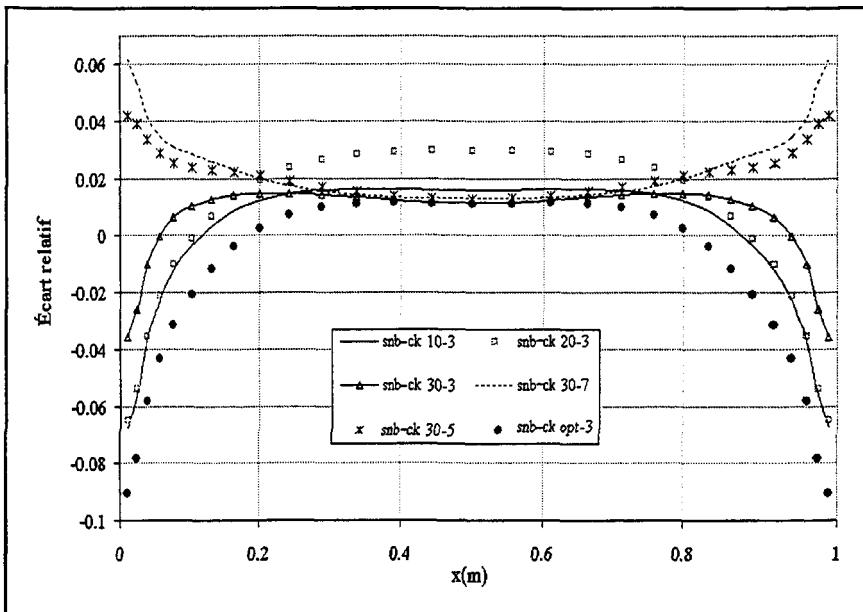
Il convient maintenant de statuer sur les variantes à conserver pour la suite des comparaisons.

Sur les trois variantes à regroupements uniformes mises en exergue précédemment, seules les méthodes **SNB-CK 10-5** et **SNB-CK 20-5** sont conservées; la méthode SNB-CK 10-7 fournissant des résultats similaires à la méthode SNB-CK 10-5 et nécessitant plus de résolutions de l'ETR (74 en plus) est rejetée. Pour les méthodes SNB-CK OPT, bien que les méthodes SNB-CK OPT 5 et SNB-CK OPT 7 fournissent le même degré de précision, c'est la méthode **SNB-CK OPT 5** qui est retenue puisqu'elle nécessite 26 résolutions de l'ETR de moins que sa consœur.

(a)

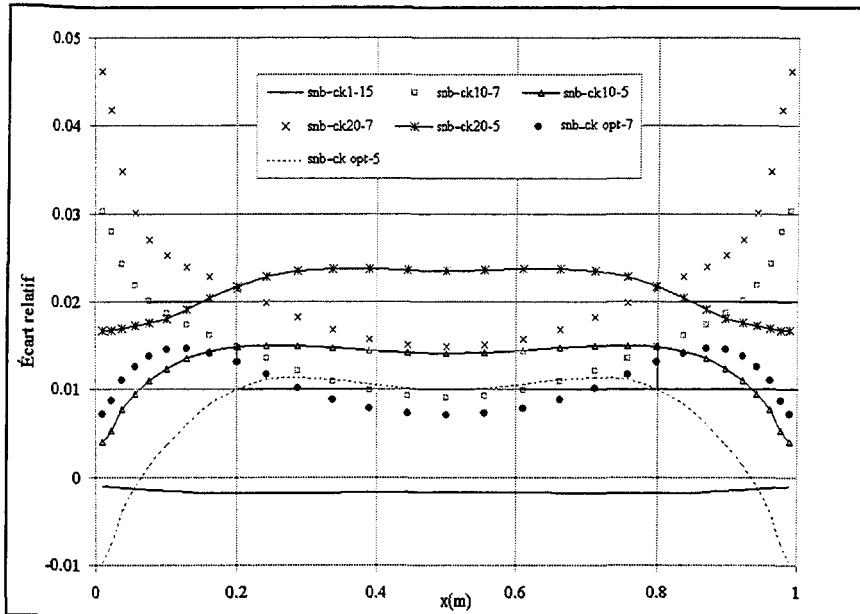


(b)

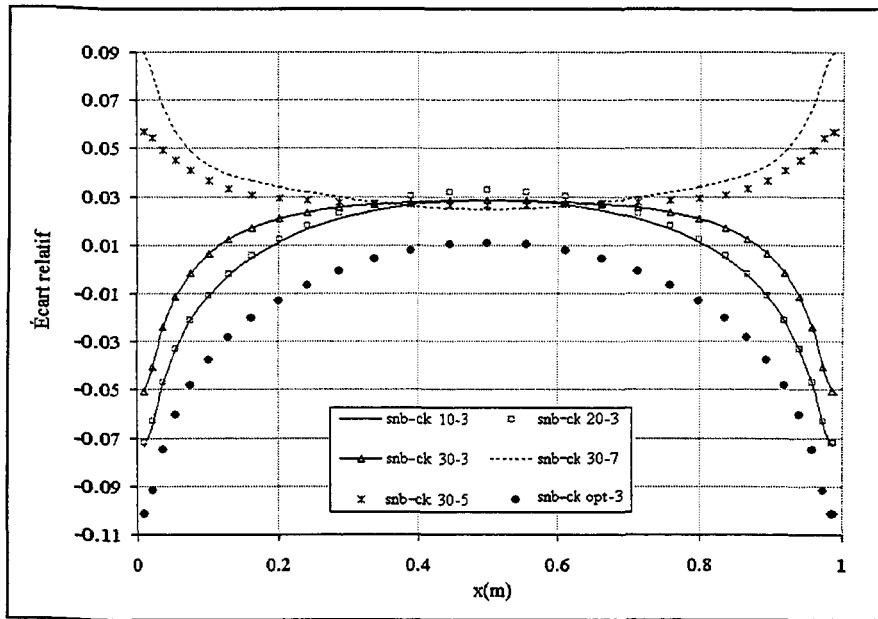


Figures 3.14. Cas 1, milieu isotherme (1 500 K), homogène (20%), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.

(a)

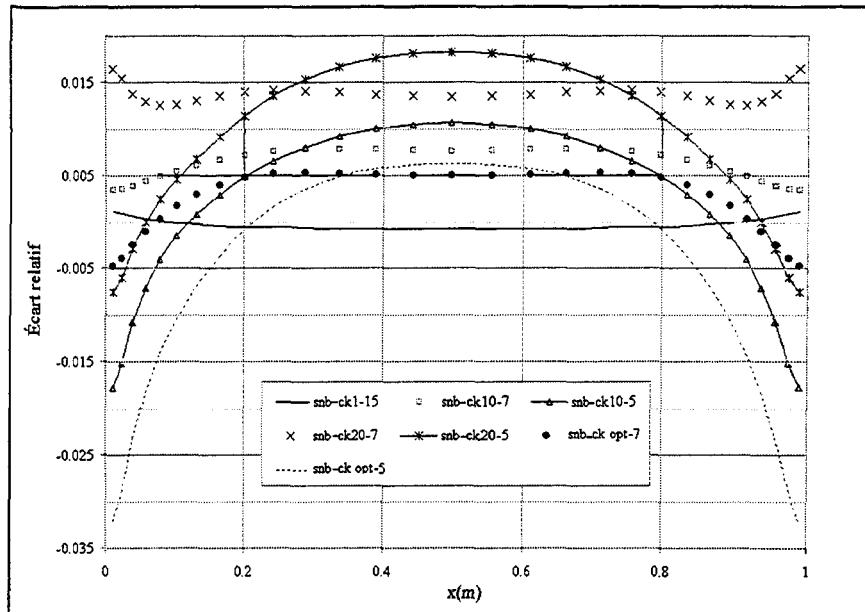


(b)

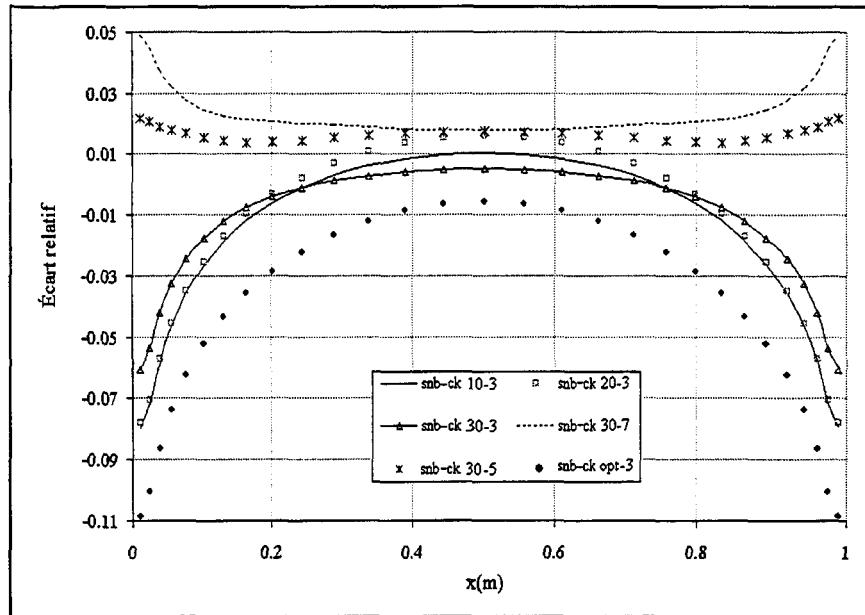


Figures 3.15. Cas 2, milieu isotherme (1 500 K), homogène (10%), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.

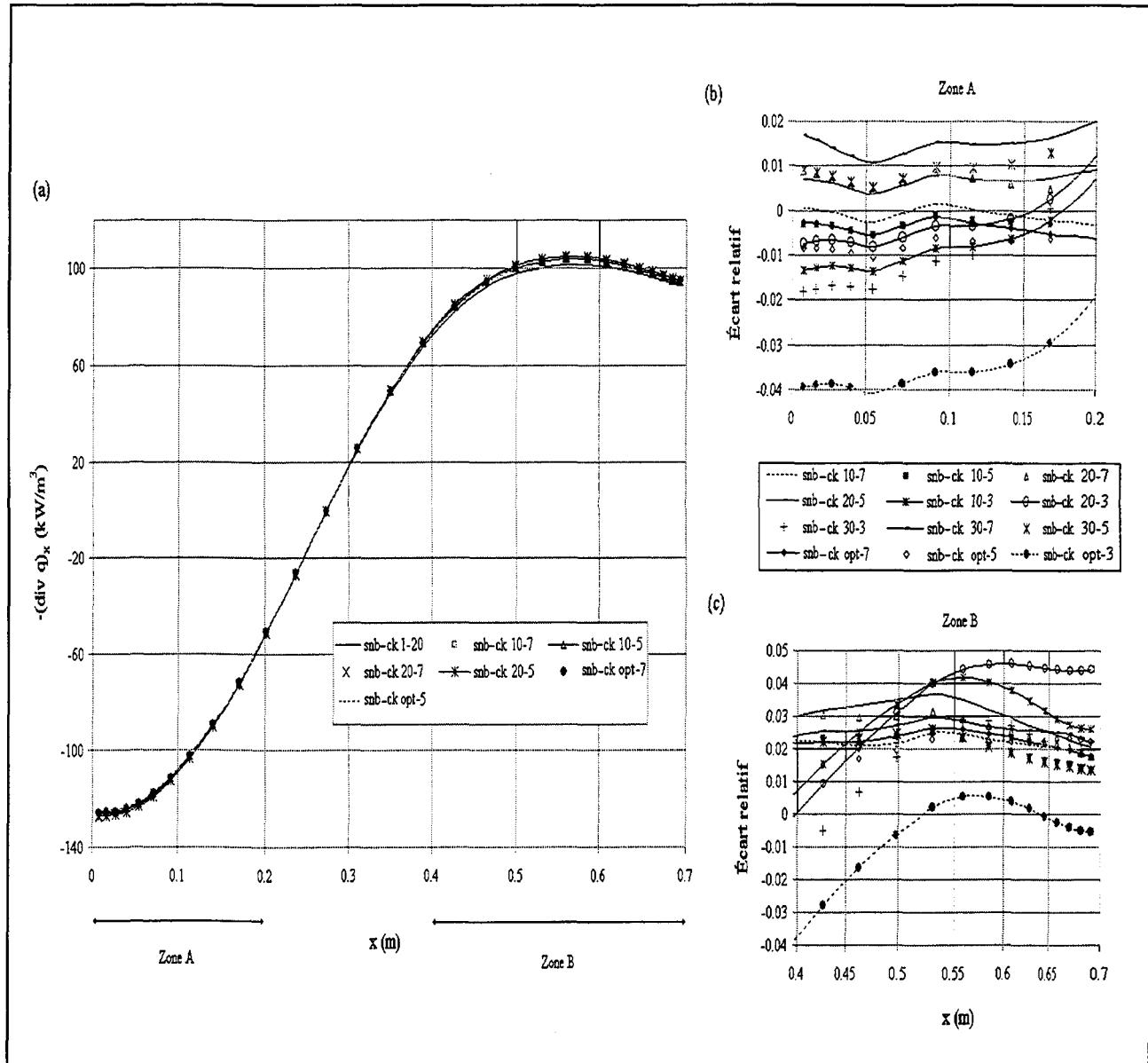
(a)



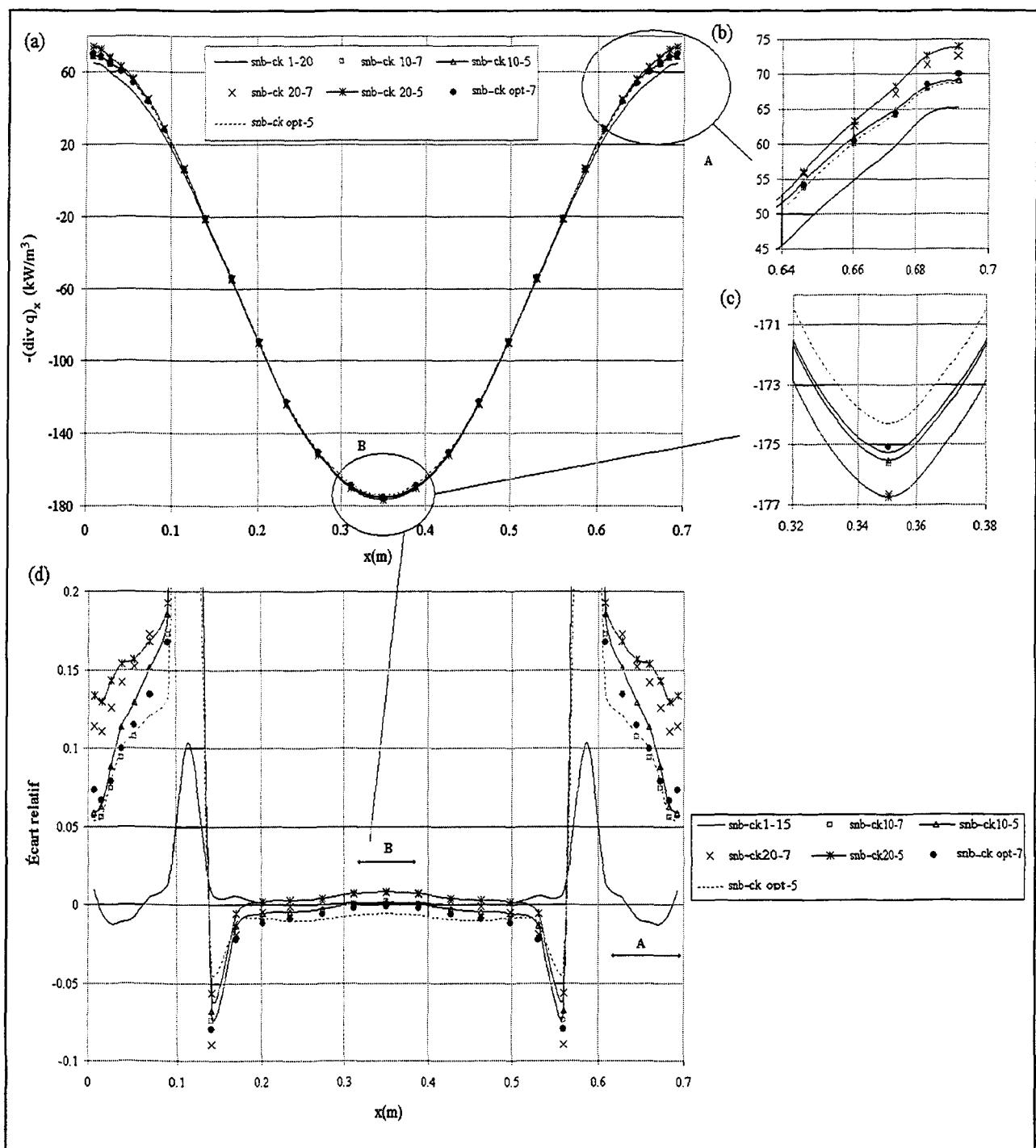
(b)



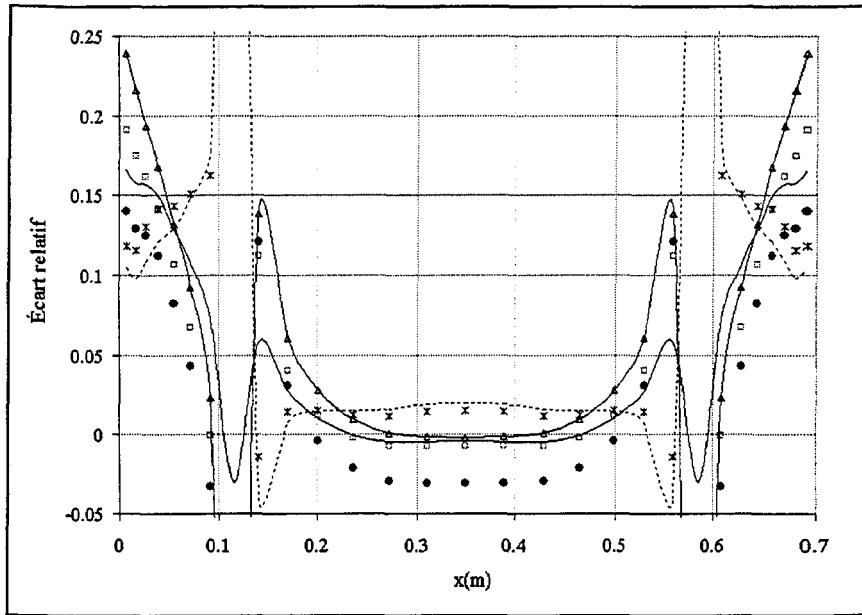
Figures 3.16. Cas 3, milieu isotherme (1 800 K), homogène (10%), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.



Figures 3.17: Cas 4, milieu anisotherme (cosinusoïdal), homogène (20%), parois grises ($\varepsilon=0.8$). (a) Évolution des divergences du flux trouvées avec les méthodes SNB-CK 1-20, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT-5, SNB-CK OPT-7. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les différentes variantes et la méthode SNB-CK 1-20, pour x compris entre 0 et 20 cm (paroi chaude). (c) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les différentes variantes et la méthode SNB-CK 1-20, pour x compris entre 40 et 70 cm (paroi froide).

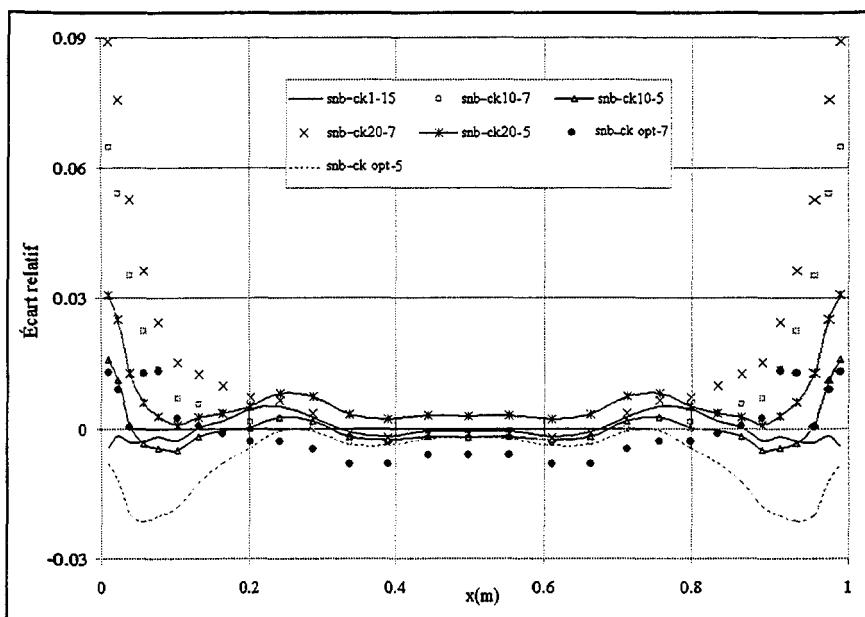


(e)

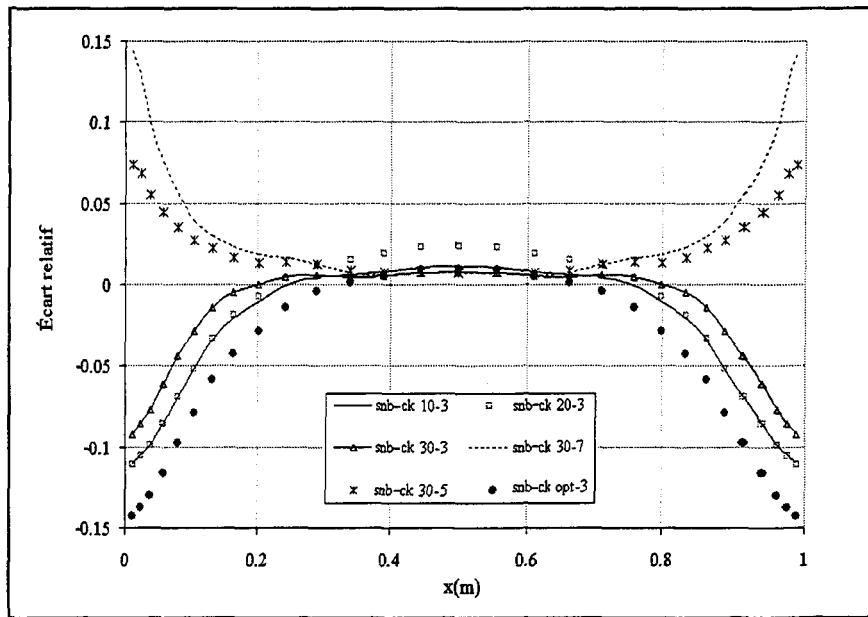


Figures 3.18. Cas 5, milieu anisotherme (parabolique), homogène (20%), parois noires maintenues à 300K. (a) Évolution des divergences du flux trouvées avec les méthodes SNB-CK 1-20, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT -7. (b) et (c) Agrandissement de ces évolutions sur deux zones, l'une pariétale, l'autre centrale. (d) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT-5, SNB-CK OPT-7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (e) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.

(a)



(b)



Figures 3.19. Cas 6, milieu isotherme (1 600 K), inhomogène (parabolique), parois noires maintenues à 0K. (a) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 1-15, SNB-CK 10-5, SNB-CK 10-7, SNB-CK 20-5, SNB-CK 20-7, SNB-CK OPT 5, SNB-CK OPT 7 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20. (b) Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec les méthodes SNB-CK 10-3, SNB-CK 20-3, SNB-CK 30-3, SNB-CK 30-5, SNB-CK 30-7, SNB-CK OPT 3 et ceux trouvés avec la méthode SNB-CK 1-20.

3.3.6 Influence de la technique de résolution de l'ETR

Comme il a été présenté lors de la partie 2.3.1, deux techniques de résolution de l'ETR sur l'ensemble du spectre sont utilisables. La première consiste à résoudre l'ETR sur les différentes bandes, en introduisant la valeur de l'intensité $I_{\nu_0}^0$ de corps noir relative au centre de la bande considérée (la fraction d'intensité de corps noir de cette bande serait approximée par $\Delta I^0 = \Delta\nu \times I_{\nu_0}^0$) ; l'intensité d'une cellule quelconque est alors calculée comme suit:

$$I_i = \sum_{j=1}^{N_{bands}} I_{i,\Delta\nu_j} \Delta\nu_j = \sum_{j=1}^{N_{bands}} \left[\sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q \sum_{m=1}^M \omega_m I_{i,m,\Delta\nu_j,g_q} \right] \Delta\nu_j \quad (\text{Cf. Eq. 2.41})$$

La seconde, retenue pour nos calculs, consiste à introduire la fraction d'intensité de corps noir relative à chaque bande, calculée en utilisant la formulation de Chang et Rhee [14]

$(\Delta I^0 = \Delta F \frac{\sigma T^4}{\pi})$, puis de calculer l'intensité de chacune des cellules comme suit:

$$I_i = \sum_{j=1}^{N_{\text{bandes}}} \Delta I_{i,\Delta\nu_j} = \sum_{q=1}^{N_{\text{bandes}}} \left[\sum_{q=1}^N \tilde{\omega}_q \sum_{m=1}^M \omega_m \Delta I_{i,m,\Delta\nu_j,g_q} \right] \quad (\text{Cf. Eq. 2.47})$$

Afin de visualiser les erreurs qui sont faites en utilisant une intensité constante sur chaque bande large (première technique), le troisième cas (milieu homogène, 10% et isotherme, 1 800K) est repris ci-dessous, pour ces deux techniques, avec les différents regroupements uniformes (avec 1, 10, 20 et 30 bandes étroites) et le regroupement spécifique; la quadrature angulaire utilisée est la quadrature de Legendre à 7 points. La méthode de référence est toujours la méthode SNB-CK 1-20. Pour cette méthode à bandes étroites, les deux techniques fournissent des résultats tout à fait similaires (Figure 3.20): sur des bandes étroites de 25 cm^{-1} , la fonction de Planck peut être considérée comme quasiment constante, si bien que les fractions d'intensité de corps noir calculées avec les deux techniques sont équivalentes. L'écart maximal entre les deux techniques est ainsi de 0,1%. La figure 3.21 permet de visualiser les écarts relatifs obtenus avec les divers regroupements et la quadrature à 7 points. Tandis que la méthode SNB-CK 1-7 fournit les mêmes résultats avec les deux techniques (même explication qu'avec la méthode SNB-CK 1-20), une diminution de la précision plus ou moins prononcée apparaît avec les autres regroupements lorsque l'hypothèse de l'intensité de corps noir constante est utilisée. La diminution la plus importante est obtenue avec le regroupement

spécifique: l'écart relatif maximum passe ainsi de 0,5% à 6,5%. Ceci est dû au fait que certaines bandes larges peuvent atteindre pour ce regroupement $1\ 000\ \text{cm}^{-1}$.

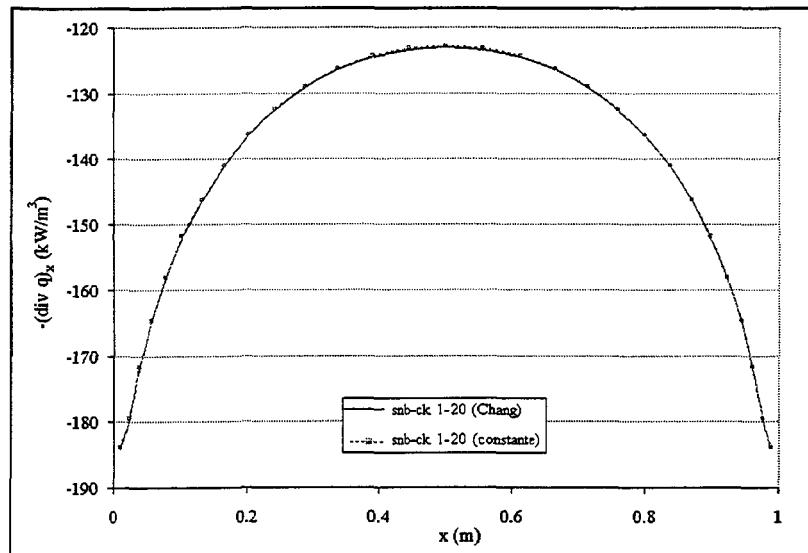


Figure 3.20: Comparaison des deux techniques de résolution de l'ETR avec la méthode SNB-CK 1-20 et pour un milieu isotherme (1 800 K) et homogène (10%).

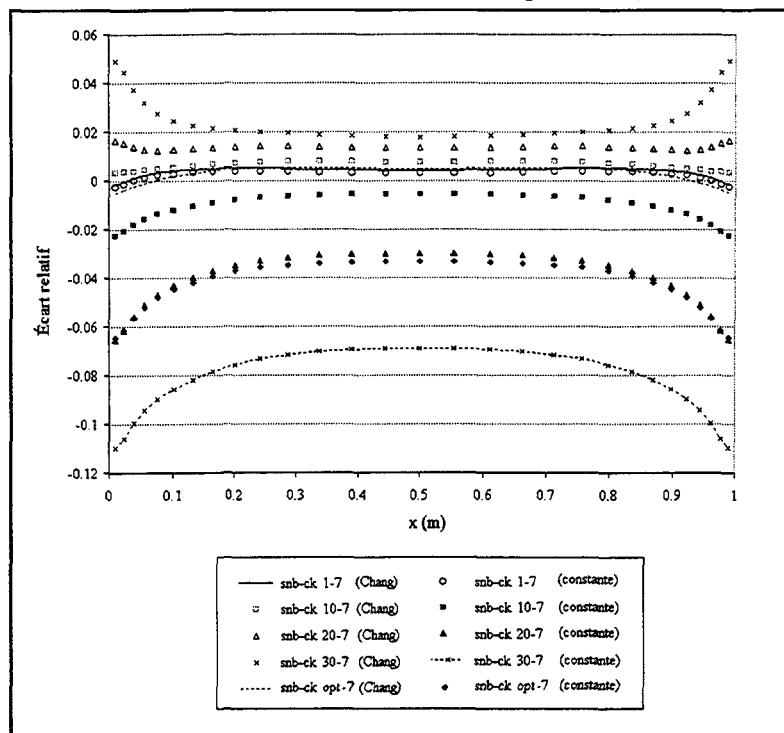


Figure 3.21: Comparaison des deux techniques de résolution de l'ETR avec les différents regroupements uniformes et spécifique de la méthode SNB-CK et pour un milieu isotherme (1 800 K) et homogène (10%).

3.3.7 Conclusions

Trois versions de la méthode hybride SNB-CK sont retenues pour la suite des comparaisons: ce sont les variantes SNB-CK 10-5, SNB-CK 20-5 et SNB-CK OPT 5. Par ailleurs, pour les deux dernières méthodes, il est particulièrement important d'utiliser la formulation de Chang et Rhee [14] lors de la résolution de l'ETR; le fait d'utiliser une valeur de l'intensité de corps noir constante sur les bandes larges peut diminuer, en effet, de façon conséquente leur précision respective.

3.4 Comparaisons monodimensionnelles des modèles de gaz réels retenus

Les méthodes retenues pour les comparaisons monodimensionnelles sont, d'une part, les méthodes SPGG, SLW et CK, et d'autre part, en se basant sur les résultats obtenus au chapitre 3.3, les trois méthodes hybrides SNB-CK 10-5, SNB-CK 20-5 et SNB-CK OPT-5 (dans la suite de cette partie le "-5" est omis). Ces comparaisons concernent les précisions des résultats obtenus lors des calculs du flux pariétal et de la divergence du flux. Afin que l'analyse soit la plus complète possible, diverses caractéristiques d'enceinte sont étudiées. Ainsi, pour les enceintes contenant un unique gaz participant, trois types de milieux ont été choisis:

- des milieux homogènes et isothermes dont la température varie entre 1 000 et 1 800K, la fraction molaire pour la divergence du flux varie quant à elle, entre 2 et 20% pour le CO₂ et entre 5 et 50% pour H₂O. Pour le flux pariétal, les fractions molaires considérées pour les deux gaz sont pour tous les cas de gaz unique 5%, 10% et 20%; de ce

fait, seules les fractions molaires pour la divergence du flux sont explicitées pour les deux prochains types de milieux.

- des milieux hétérogènes et isothermes dont la température varie entre 1 300 et 1 800K, la fraction molaire varie de façon parabolique de 1% aux parois à $x_m\%$ au centre avec $x_m \in [2,20\%]$ pour le CO₂ et $x_m \in [5,50\%]$ pour H₂O.

- des milieux homogènes et anisothermes dont la température varie de façon parabolique de 300K (au niveau des parois qui sont maintenues arbitrairement à 0K) à 1500K (au centre de l'enceinte) et la fraction molaire entre 2 et 20% pour le CO₂ et entre 5 et 50% pour H₂O.

Lorsque l'enceinte contient un mélange de CO₂ et de H₂O, une condition est imposée sur le rapport entre la fraction molaire du CO₂ et celle de H₂O, $\frac{P_{H_2O}}{P_{CO_2}} = 2$ et les trois mêmes types de milieux sont analysés:

- des milieux homogènes et isothermes dont la température varie entre 1 000 et 1 800K, la fraction molaire du CO₂ pour la divergence du flux varie entre 4 et 15%. Pour le flux pariétal, les valeurs de la fraction molaire pour le CO₂ sont, avec le mélange, toujours de 5%, 10% et 15%.

- des milieux hétérogènes et isothermes dont la température varie entre 1 300 et 1 800K, la fraction molaire varie de façon parabolique avec $x_m \in [4,15\%]$ pour le CO₂.

- des milieux homogènes et anisothermes dont la température varie de façon parabolique de 800K, aux parois, à 1 500K au centre de l'enceinte et la fraction molaire entre 4 et 15% pour le CO₂.

Les murs de l'enceinte sont noirs et la distance séparant les deux plaques parallèles varie entre 0,1 et 2 mètres. La quadrature numérique S_8 due à Carlson et Lathrop est utilisée et le maillage est non-uniforme (resserré au niveau des parois) à 20 points (présenté à l'Annexe C).

3.4.1 Comparaisons monodimensionnelles avec le CO₂

a. Les flux pariétaux

En analysant les résultats obtenus avec les modèles de gaz réels pour les différentes caractéristiques de l'enceinte, deux méthodes se distinguent des autres pour leur précision sur les flux pariétaux: ce sont les méthodes CK et SNB-CK OPT. Quels que soient les champs de température et de fraction molaire, les écarts relatifs entre leurs valeurs et celles fournies par la méthode SNB-CK 1 sont au maximum de 6,5% (Planches¹³ 1-6) et en moyenne sur les cas isothermes, de 2%. L'écart maximum est atteint pour la méthode SNB-CK OPT pour le milieu homogène isotherme à 1 000K (Planche 1a) et pour la méthode CK pour le milieu homogène isotherme à 1 800K (Planche 3b). Pour la méthode SNB-CK OPT, une augmentation de la température permet de réduire les écarts relatifs au niveau des petites (inférieures à 0,4 m) et grandes (supérieures à 1,6 m) distances (Figure 3.22). Ces écarts, en valeur absolue, sont en outre toujours supérieurs pour les petites distances. Les écarts pour les grandes épaisseurs pouvant être négatifs, une augmentation de l'épaisseur ne permet pas de diminuer continûment les écarts; elle permet cependant d'obtenir au maximum des écarts de 3,5% (Planche 1b) pour une distance de 2m. Pour la méthode CK,

¹³ Les planches citées dans la partie 3.4 sont présentées en annexe D.

une augmentation de la température ne permet une réduction des écarts que pour les faibles distances; pour les grandes distances les écarts augmentent au contraire en valeur absolue (la méthode CK sous estime les flux et les écarts deviennent négatifs). D'une manière générale les résultats fournis par la méthode CK sont plus précis que ceux de la méthode SNB-CK OPT pour des petites distances et moins précis pour de plus grandes distances (Figure 3.23), et ce d'autant plus que la température est importante. Par ailleurs, une augmentation de la fraction molaire ne permet pas de diminuer l'écart relatif maximal.

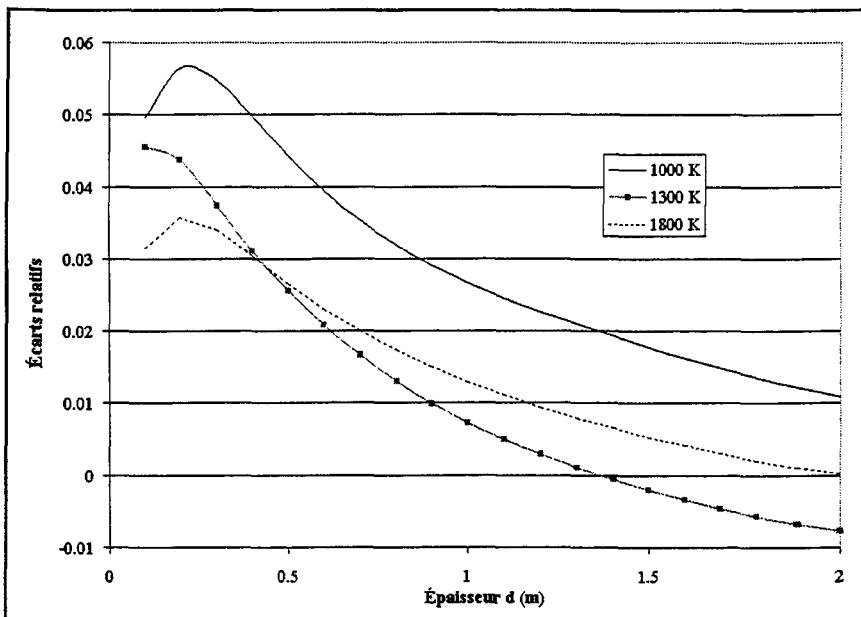


Figure 3.22: Évolutions des écarts relatifs pour le flux pariétal de la méthode SNB-CK OPT par rapport à la méthode SNB-CK 1, pour un milieu isotherme homogène (10% de CO₂) en fonction de la température.

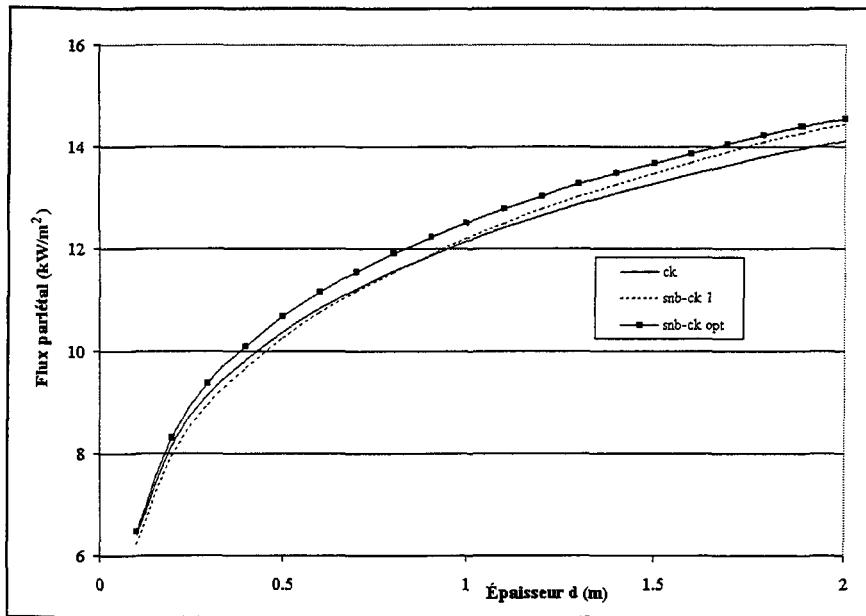


Figure 3.23: Variation des divergences du flux calculées avec les méthodes CK, SNB-CK 1 et SNB-CK OPT pour un milieu isotherme à 1 300K et homogène (10% CO₂) en fonction de l'épaisseur d de l'enceinte.

Les résultats fournis par les deux autres méthodes hybrides, SNB-CK 10 et SNB-CK 20, sont moins précis que ceux fournis par les deux précédentes méthodes. Les écarts relatifs atteignent ainsi pour le milieu homogène isotherme à 1 000K, 10,7% avec la première et 16% avec la seconde (Planche 1a). Ces écarts diminuent cependant sensiblement lors d'une augmentation de la température. Ainsi, pour les cas homogènes (avec 10% CO₂) et isothermes, l'écart maximal pour la méthode SNB-CK 10 est de 10,7% à 1 000K et n'est plus que de 6% à 1 800K; cette variation est aussi visible pour les milieux inhomogènes (Figure 3.24). L'évolution des écarts est similaire pour la méthode SNB-CK 20 (Planches 1a - 6a), mais reste cependant de 12% à 1 800K.

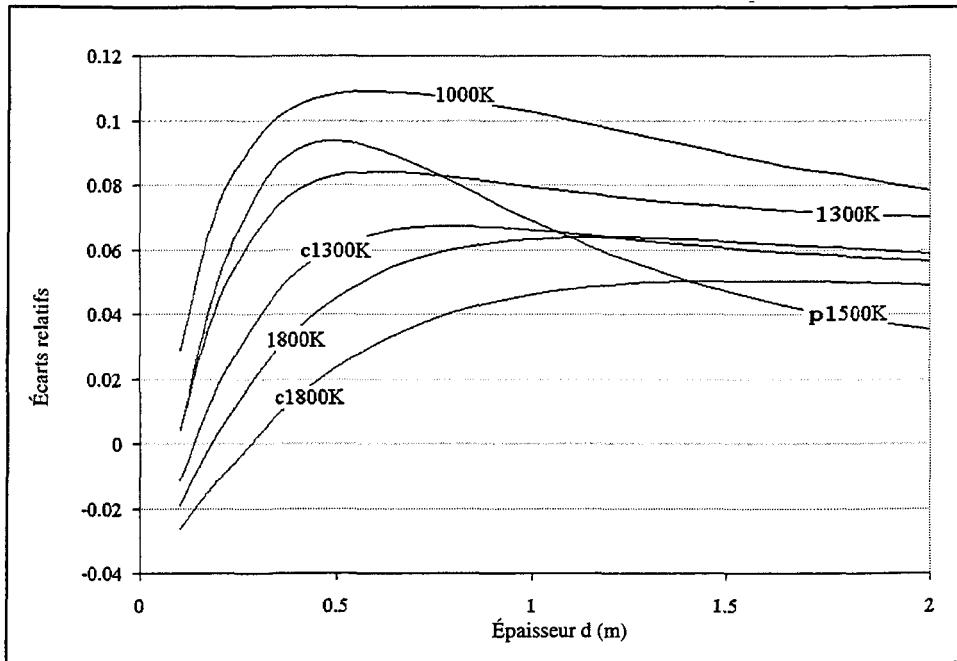


Figure 3.24: Évolutions des écarts relatifs de la méthode SNB-CK 10 pour un milieu homogène (10% de CO₂) en fonction de la température. Trois courbes correspondent aux milieux homogènes et isothermes à 1 000K, 1 300K et 1 800K, deux autres aux milieux hétérogènes (distribution parabolique, de fraction molaire maximale $x_m=10\%$) et isothermes c1300K et c1800K, et la dernière au milieu homogène (10% de CO₂) et anisotherme (distribution parabolique, $T_m=1 267K$) p1500K.

Aucune diminution des écarts maximums n'est visible lors d'une augmentation de la fraction molaire, seule la distance pour laquelle ces écarts sont obtenus est modifiée. Cette propriété peut être visualisée en observant les planches 1a à 3b; ainsi avec la méthode SNB-CK 20 et pour un milieu homogène isotherme à 1 800K, l'écart maximal reste quasiment identique (varie de 13,8 à 13,9%, Planches 3a-3b), mais l'épaisseur pour laquelle il est atteint varie de 0,8m à 0,2m lorsque la concentration passe de 5% à 20%. Cet écart maximal est en fait obtenu pour une même longueur optique, que l'on définit comme étant le produit de l'épaisseur de la couche gazeuse par la concentration du gaz. Ce phénomène est illustré sur la figure 3.25, mais il n'est valable que pour les variantes de la méthode SNB-CK. En effet, avec les méthodes CK, SLW et SPGG, pour une même valeur de

longueur optique obtenue pour des fractions molaires différentes, les écarts relatifs diffèrent (Figure 3.26).

Les meilleurs résultats fournis par la méthode SNB-CK 10 par rapport à ceux de la méthode SNB-CK 20 s'expliquent facilement par le fait que ces deux versions utilisent la même sorte de regroupement mais avec un nombre de bandes par regroupement variant du simple au double. La très bonne précision de la méthode SNB-CK OPT pourrait à première vue paraître surprenante, cette version possédant presque deux fois moins de larges bandes que la versions SNB-CK 10. Deux explications peuvent cependant être apportées. D'une part, les bandes étroites qui composent une bande large pour la méthode SNB-CK OPT ont des propriétés relativement équivalentes; ces bandes ne sont pas composées d'une association de bandes transparentes et de bandes participantes. Cette propriété n'est pas vérifiée pour les méthodes à regroupement uniforme; ainsi la 19^{ième} bande large de la variante SNB-CK 10 est constituée de 5 bandes étroites participantes et de 5 bandes étroites transparentes (Cf. Tableau 3.4). D'autre part, les bandes larges participantes de la méthode SNB-CK OPT comprennent seulement 7 à 8 bandes étroites au lieu de 10 ou 20 pour les méthodes SNB-CK 10 ou SNB-CK 20.

La méthode SLW est moins précise que les quatre précédentes méthodes, et surtout présente le désavantage de fournir des résultats variant de façon importante et monotone en fonction de la distance pour une fraction molaire donnée. Les écarts sont, dans la plupart des cas, négatifs (sous-estimation) pour les faibles distances et positifs (surestimation) pour les plus grandes distances (Planches 1-6) et les variations peuvent atteindre des amplitudes de 20% (Planche 1). L'écart maximum est lui aussi obtenu à 1 000K et atteint 19% (Planche 1); pour les milieux homogènes, il n'est jamais inférieur à 10%, mais est légèrement moins

conséquent pour les milieux hétérogènes (Planches 4, 5). Cette méthode ne permet d'obtenir que des résultats qualitatifs.

La méthode SPGG utilisant les bases de données de Smith et al, fournit des résultats de précision raisonnable à faible température (1 000K), les écarts maximums atteignent 8% (Planche 1). Cependant une hausse de la température ou de la fraction molaire crée une augmentation de l'écart qui atteint 13% à 1 800K avec 20% de CO₂ (Planche 3b). Une hausse de la température crée de plus une plus grande amplitude des évolutions des écarts relatifs qui atteint des valeurs similaires à celle de la méthode SLW.

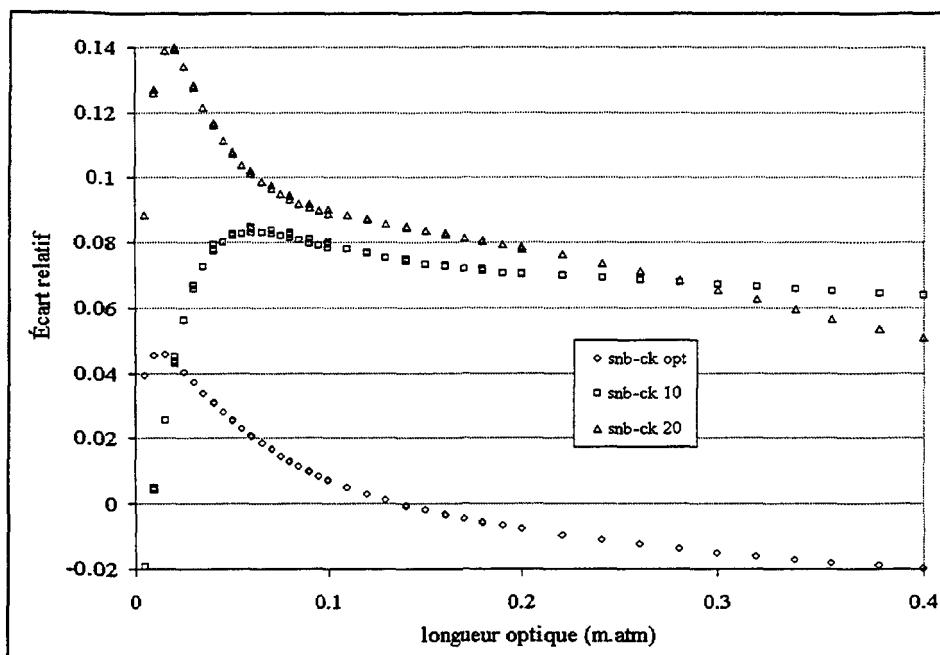


Figure 3.25: Valeurs des écarts relatifs obtenus avec les méthodes SNB-CK 10, SNB-CK 20 et SNB-CK OPT en fonction de l'épaisseur optique (obtenue pour trois fractions massiques 5%, 10% et 20%) pour un milieu homogène isotherme à 1 300K.

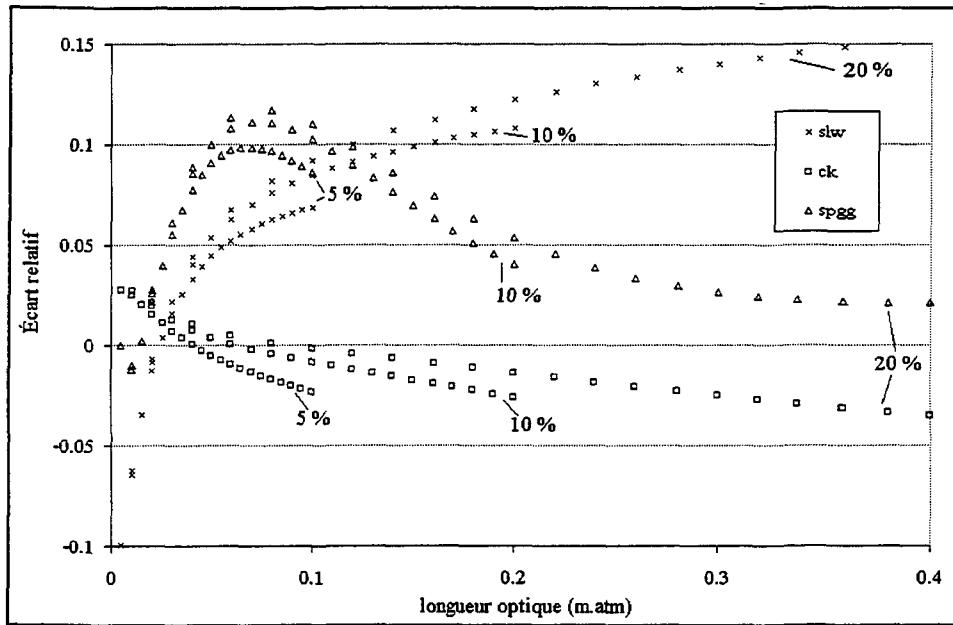


Figure 3.26: Valeurs des écarts relatifs obtenus avec les méthodes CK, SPGG et SLW en fonction de l'épaisseur optique (obtenue pour trois fractions massiques 5%, 10% et 20%) pour un milieu homogène isotherme à 1 300K.

b. La distribution de la divergence du flux

Comme pour le calcul du flux pariétal, les méthodes SNB-CK OPT et CK se distinguent des autres pour la précision de leurs résultats. Pour la méthode SNB-CK OPT, l'écart relatif maximum est de 8,7% (pour le cas anisotherme, l'écart maximal considéré est pris au centre de l'enceinte, Cf. Partie 3.3); il correspond à un milieu gazeux homogène et isotherme qui possède d'une part une faible fraction molaire en CO₂, 2%, et qui est d'autre part à relativement faible température, 1 000K (Planche 7a). Une augmentation de la température permet de diminuer sensiblement l'écart relatif maximal. Cet écart passe ainsi de 8,7% à 5,8% pour un milieu homogène (2% CO₂) isotherme dont la température varie entre 1 000K et 1 300K (Planche 9a); à 1 800K, il n'est plus que de 4,9% (Planche 11a). Cette diminution est aussi visible pour les cas hétérogènes. L'influence de la température

est illustrée sur la figure 3.27 pour un milieu contenant 4% de CO₂. Une augmentation de l'épaisseur du milieu s'accompagne par ailleurs d'une plus grande amplitude dans les évolutions des écarts relatifs (Planches 7a, 8a), mais sans cependant modifier les valeurs maximales des écarts. Et aucune réelle modification n'est observable en augmentant la fraction molaire du milieu.

L'écart relatif maximal pour la méthode CK est du même ordre de grandeur que celui du modèle SNB-CK OPT; il est de 9,1% et est atteint pour un milieu homogène et isotherme à 1 800K (Planche 12b). Les évolutions des écarts diffèrent cependant. D'une part, les écarts ne diminuent pas de façon monotone en fonction de la température: les meilleurs résultats sont obtenus pour les températures intermédiaires, soit pour les tests à 1 300K (Planches 9, 10). D'autre part, les écarts s'accentuent globalement lorsque la distance interplaque d augmente. Ainsi, pour un milieu isotherme à 1 800K et hétérogène de concentration maximale égale à 10%, l'écart maximal varie de -1,8% à -8,2% lorsque d varie de 0,4 à 1,6 m (Planches 11b, 12b). Par ailleurs, à l'encontre de la méthode SNB-CK OPT, et des versions hybrides SNB-CK 10 et SNB-CK 20, pour lesquels les écarts relatifs diffèrent peu pour une même longueur optique (obtenue pour deux fractions molaires différentes), les écarts évoluent sensiblement pour une même longueur optique avec la méthode CK; les évolutions illustrées sur les figures 3.28 correspondent aux variations des résultats obtenus avec les différentes méthodes pour un milieu homogène ((c=2% et d=1,6m) et (c=8% et d=0,4m)) et isotherme (1 300K).

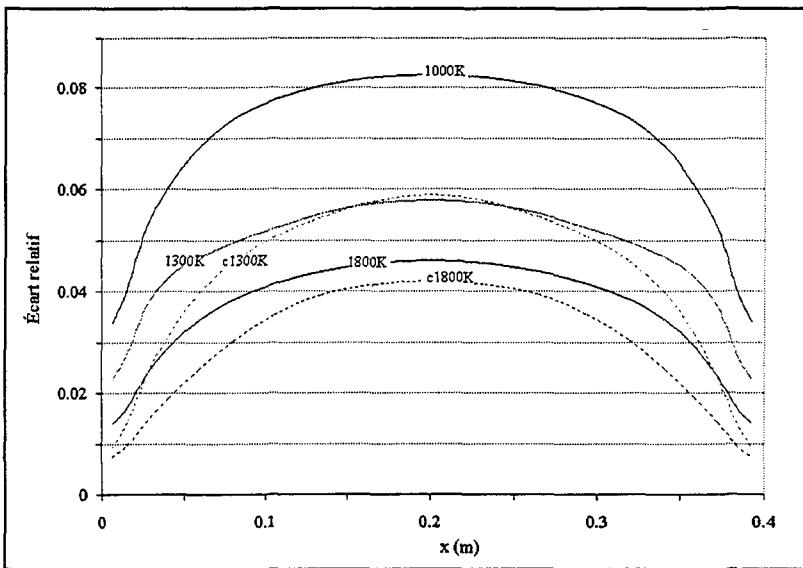


Figure 3.27: Variation en fonction de la température des écarts relatifs de la divergence du flux calculée avec la méthode SNB-CK OPT pour une enceinte contenant 4% de CO₂ et ayant 0,4 m d'épaisseur.

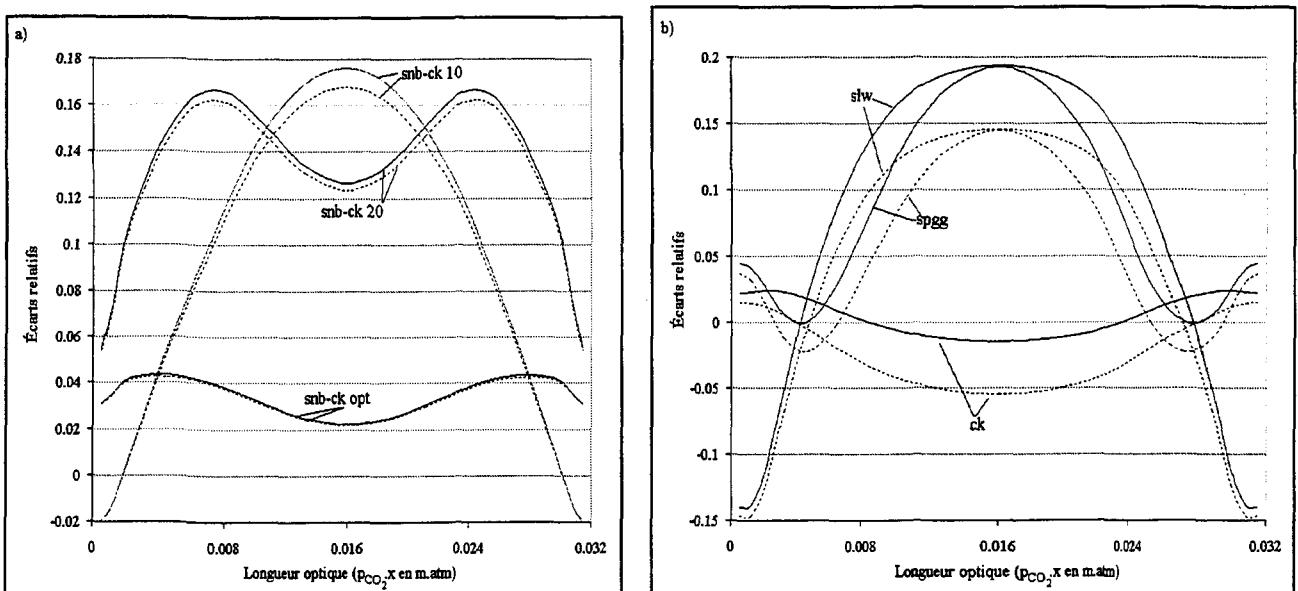


Figure 3.28: Évolution des écarts relatifs propres à chaque méthode, pour une même épaisseur optique de 0,032 m.atm pour deux distances interplaques différentes: 0,4 m (trait plein) et 1,6 m (trait pointillé). a) Avec les méthodes hybrides SNB-CK OPT, SNB-CK 10 et SNB-CK 20. b) Avec les méthodes CK, SLW et SPGG.

Les figures 3.28a-b illustrent aussi le fait que la précision des méthodes SNB-CK 10 et SNB-CK 20 pour le calcul de la divergence du flux est beaucoup moins bonne que celles

des méthodes CK et SNB-CK OPT. Les écarts relatifs atteignent 23,8 % pour la SNB-CK 10 et 32 % pour la SNB-CK 20 (à 1 000K). Comme pour le modèle SNB-CK OPT, une augmentation de température permet de diminuer ce manque de précision; les écarts ne sont plus respectivement que de 13% et 24% à 1 800K, soit encore 3 à 5 fois celui de la SNB-CK OPT (Planches 11a, 12a). Une autre façon de visualiser la baisse de qualité des résultats des deux méthodes hybrides par rapport aux méthodes SNB-CK OPT et CK consiste à comparer l'amplitude des variations de l'écart relatif lors de l'augmentation de la distance interplaqué, pour des distributions de fraction molaire et de température données. Tandis que ces variations sont au maximum de 10% pour la méthode CK (Planche 12b) et de 12% pour la méthode SNB-CK OPT (Planche 8a), l'amplitude atteint 28% pour la SNB-CK 10, et 38% pour la SNB-CK 20 avec 20% de CO₂ (Planche 7a, Figure 3.29). Les amplitudes des variations des écarts sont en moyenne deux fois plus importantes avec la méthode SNB-CK 10 qu'avec la méthode SNB-CK OPT, et trois fois plus importantes avec la méthode SNB-CK 20. Ces méthodes hybrides conduisent alors à des résultats plus qualitatifs que quantitatifs.

Pour la méthode SLW, les écarts relatifs atteignent des valeurs maximales variant entre 19 et 25% pour les milieux isothermes (Planches 7b à 16b). Ces écarts sont inférieurs à ceux des variantes SNB-CK 10 et SNB-CK 20 à 1 000K et supérieurs à 1 800K. Les amplitudes des variations sont globalement entre 30 et 40%, et correspondent au double de celles obtenues avec la méthode SNB-CK 10 pour les hautes températures ou pour un milieu hétérogène. Pour le milieu anisotherme, l'écart n'est cependant que d'une dizaine de pour-cent au centre de l'enceinte.

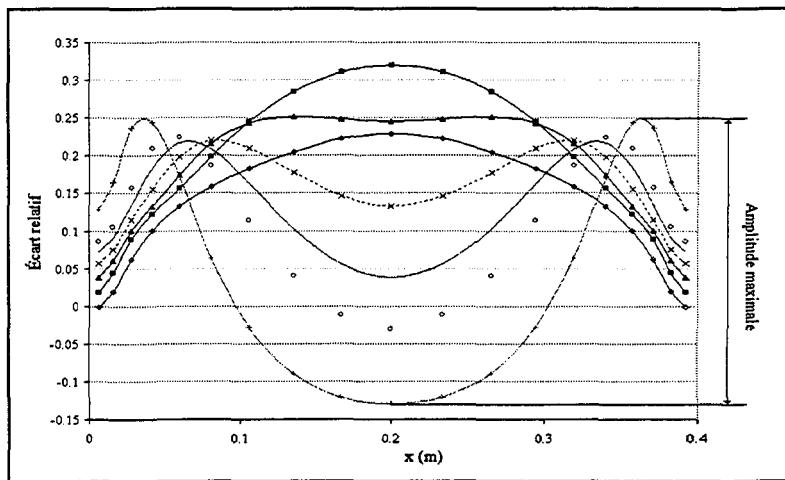


Figure 3.29: Amplitude maximale des variations de l'écart relatif pour la méthode SNB-CK 20, les écarts sont de 25% à $x=0.75$ m et de -13% à $x=0.2$ m

A l'encontre de la méthode SNB-CK OPT, les écarts obtenus avec la méthode SPGG augmentent avec la température; ils atteignent ainsi 31% pour un milieu homogène (les milieux hétérogènes ne pouvant être étudiés avec cette méthode) et isotherme à 1 800K (Planches 11b, 12b). Quelles que soient la température et la dimension de l'enceinte, les écarts maximums sont au moins de 20%. Cependant, pour les faibles températures (1 000 à 1 300 K), ces écarts sont obtenus uniquement avec des fractions molaires supérieures à 6%; pour des fractions inférieures ou égales à 6%, ils restent raisonnables et varient entre -10% et 10% au sein du milieu (Planches 7b, 8b, 9b). De même, pour le milieu anisotherme, une assez bonne prédition au centre de l'enceinte est obtenue avec les faibles fractions molaires. Par ailleurs, dans la plupart des cas, les écarts subissent d'importantes variations, plus importantes que celles précédemment obtenues avec la méthode SLW, et les amplitudes peuvent atteindre plus de 50% (Planche 12b).

c. Conclusion

Ces comparaisons permettent de mettre en exergue deux méthodes, d'une part la SNB-CK OPT et d'autre part la CK; les résultats qu'elles fournissent sont en effet très semblables à ceux obtenus avec la méthode SNB-CK 1. Selon les caractéristiques du milieu, de légères variations de leur précision respective peuvent cependant être observées; il apparaît préférable d'utiliser la méthode CK pour des températures modérées (de l'ordre de 1 300 K) ainsi que pour de faibles dimensions de l'enceinte, et la méthode SNB-CK OPT pour de plus hautes températures ou de plus grandes dimensions. Par ailleurs, une nette distinction est visible entre les résultats fournis par les deux types de regroupements de la méthode SNB-CK: uniformes ou spécifique aux bandes d'émission. Pour un nombre de résolution de l'ETR identique, le regroupement spécifique aux bandes d'émissivité du CO₂ permet d'obtenir des résultats dont la précision est globalement 2 fois supérieure à ceux fournis avec le regroupement uniforme. Ainsi, alors que de très bons résultats sont obtenus avec la méthode SNB-CK OPT, la méthode SNB-CK 10 ne permet d'obtenir de bons résultats qualitatifs, voire quantitatifs que pour les hautes températures. Les résultats fournis avec les méthodes SNB-CK 20, SLW et SPGG sont, quant à eux, de précision inférieure et ne sont généralement que qualitatifs. De plus, à l'exception de la méthode SPGG, aucun changement notable de la valeur de l'écart maximal n'est obtenu en modifiant la fraction molaire du CO₂.

Des schémas de synthèse (figures 3.30 et 3.31) sont présentés ci-après pour les cas isothermes. Ils permettent de mettre en évidence pour des conditions de température, de fraction molaire et d'épaisseur données, si d'une part, les méthodes fournissent des résultats

de précision pouvant être considéré comme bonne (écart relatifs inférieurs à 5% pour le flux pariétal et inférieurs à 10% pour la divergence du flux), et si, d'autre part, ce sont les méthodes à utiliser préférentiellement. Les zones de bonne précision sont spécifiées sur les axes de fraction molaire et de distance de la manière suivante:

- un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre
- un trait pointillé et gras pour un paramètre correspond à une zone où la méthode peut être précise, tout dépendant de la valeur du second paramètre
- un trait pointillé et fin pour un paramètre correspond à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre.

Afin d'expliciter cette schématisation, considérons le cas des méthodes SNB-CK 20 et CK à 1 000K pour le flux pariétal. Pour la méthode SNB-CK 20 et pour les faibles distances, quelle que soit la valeur de la fraction molaire, les écarts relatifs sont supérieurs à 5%. Pour des distances supérieures, les écarts peuvent être inférieurs à 5% tout dépendant de la valeur de la fraction molaire en CO₂; cette fraction doit cependant être supérieure à approximativement 5% (ceci est schématisé par le trait fin situé au début de l'axe des fractions molaires). Pour la méthode CK, pour des distances ou des fractions molaires supérieures approximativement à 0,4m et à 15%, les écarts relatifs sont inférieurs à 5%. Pour les autres cas, les écarts peuvent être soit supérieurs soit inférieurs.

Les zones de préférence sont quant à elles illustrées par les zones grisées sur les différentes surfaces; quand les mêmes zones sont grisées pour deux méthodes différentes, cela signifie que les deux méthodes produisent des résultats du même ordre de précision et qui sont plus précis que ceux des autres méthodes.

Ces schémas peuvent aussi servir pour prédire les résultats pour les milieux hétérogènes ou anisothermes, ou pour choisir la méthode à utiliser. Considérons le milieu isotherme et homogène à 1800K pour le flux pariétal; la méthode CK est supérieure en précision à la méthode SNB-CK OPT pour les faibles distances, et ceci est d'autant plus vrai que la fraction molaire est faible. On peut donc raisonnablement s'attendre à obtenir, pour un milieu isotherme et hétérogène de même température et de fraction molaire maximale 20%, une zone de préférence de la méthode CK vis-à-vis de la distance légèrement plus importante que celle correspondant au milieu homogène à 20%, puisque la fraction molaire moyenne n'est que de 13.3%. Ceci est effectivement observé sur les planches 3b et 5b; la zone de préférence augmente de 0.2m.

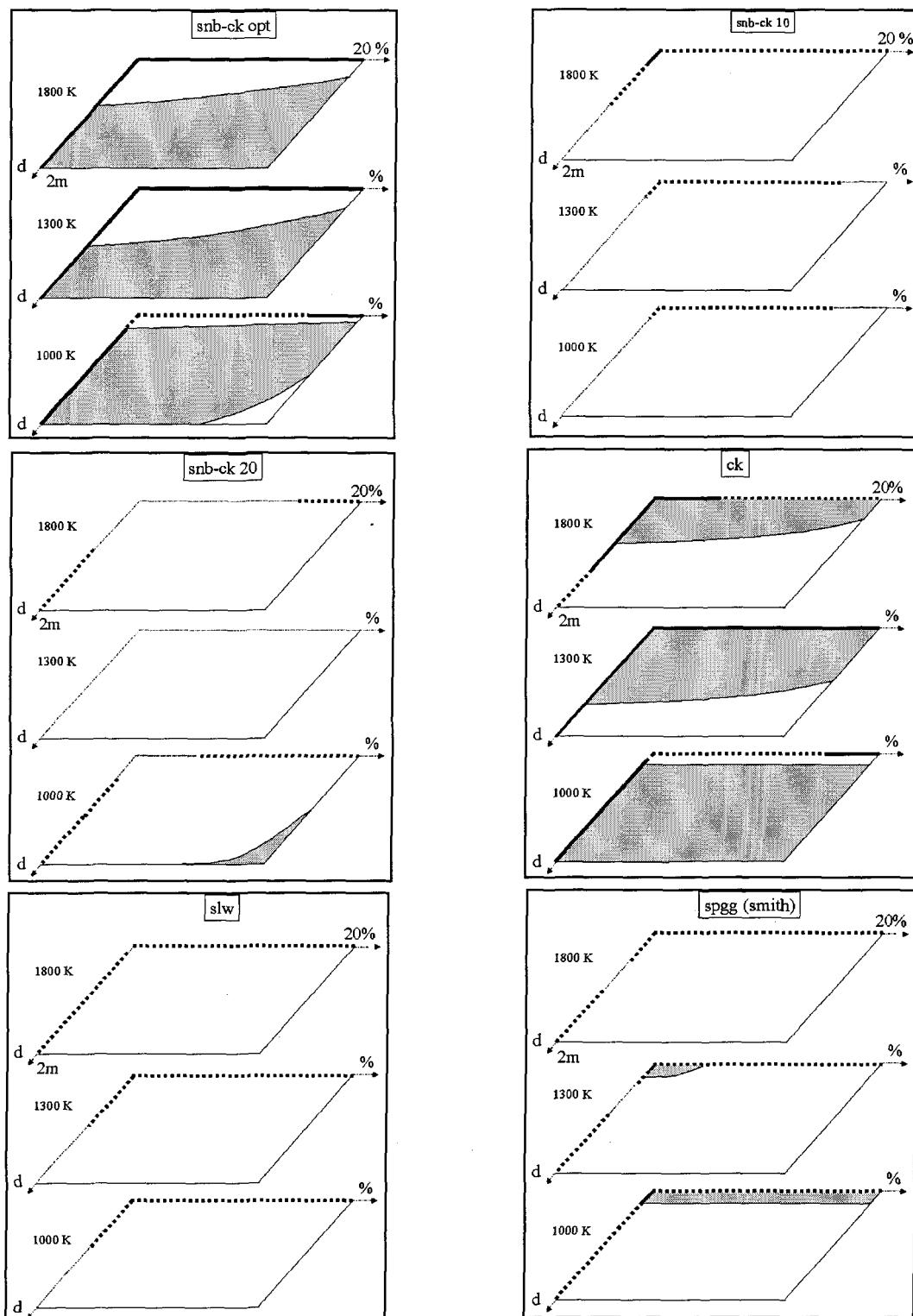


Figure 3.30: Schématisation pour le CO₂ et pour chacune des méthodes, des zones de bonne précision et de préférences pour le calcul du flux pariétal. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquels les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.

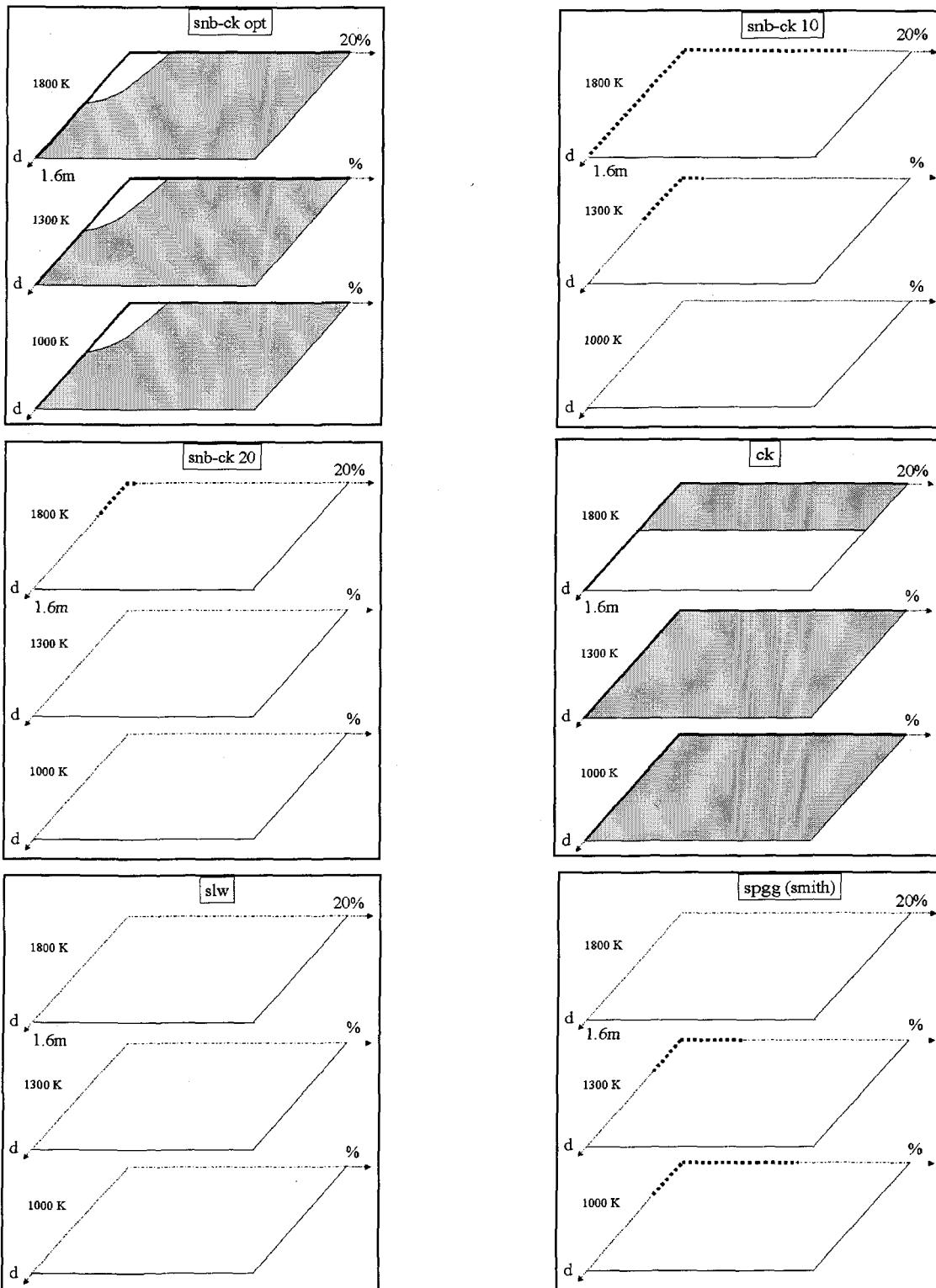


Figure 3.31: Schématisation pour le CO_2 et pour chacune des méthodes, des zones de bonne précision et de préférences pour le calcul de la divergence du flux. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquels les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.

3.4.2 Comparaisons monodimensionnelles avec H₂O

a. Le flux pariétal

A l'instar des comparaisons effectuées avec le CO₂, les deux méthodes SNB-CK OPT et CK fournissent des résultats de bonne précision. Cependant, à l'encontre des résultats obtenus avec le CO₂, pour le H₂O deux autres modèles fournissent des résultats analogues; ce sont les deux autres méthodes hybrides SNB-CK 10 et SNB-CK 20. Une explication à ce phénomène provient du fait que les bandes de transparence pour la vapeur d'eau sont moins marquées que pour le dioxyde de carbone.

Le cas le plus défavorable pour les trois méthodes hybrides correspond au milieu homogène isotherme à 1 000 K et avec 5% de H₂O (Planche 19a); l'écart maximal atteint pour ces conditions est de 25% pour la méthode SNB-CK 20. Une hausse d'un des trois paramètres, température, fraction molaire, ou distance entre les parois permet cependant de diminuer de façon conséquente cet écart. Ainsi, en augmentant la température, il n'est plus que de 7% à 1 300 K, que le milieu soit homogène ou non (Planches 20a, 22a), 4,5% pour le milieu anisotherme à 1 500K (Planche 24a) et de 4% à 1 800 K (Planches 21a, 23a, Figure 3.32). Le fait d'augmenter la fraction molaire de 5 à 20%, à 1 000K, permet aussi de diminuer les écarts de 25% à 6,5%. L'influence d'une modification de la distance est un peu moins importante: pour une distance de 2m à 1 000K et avec 5% de H₂O, l'écart maximal est en effet toujours de 12% (Planche 19b). Par ailleurs, à l'exception du cas isotherme à 1 000 K, les écarts relatifs obtenus pour les différents milieux sont inférieurs à 7% et sont souvent de l'ordre de 2% (Planches 20a à 24b). En outre, la précision des résultats est toujours de très bonne qualité lorsque la fraction molaire ou la température sont

élevées (pour ces tests, 20% et 1 800K). Dans de tels cas, une augmentation de la fraction molaire à haute température (1 800 K) ou de la température à haute fraction molaire (20%) ne permet plus qu'une légère réduction des écarts. Ainsi, une variation de la température de 1 000 à 1 800K pour un milieu homogène de 20% de H₂O n'entraîne qu'une diminution de 5% de l'écart maximal, et cette diminution n'est plus que de 1% pour une variation de la fraction molaire de 5 à 20% à 1 800K (Planche 21, Figure 3.33).

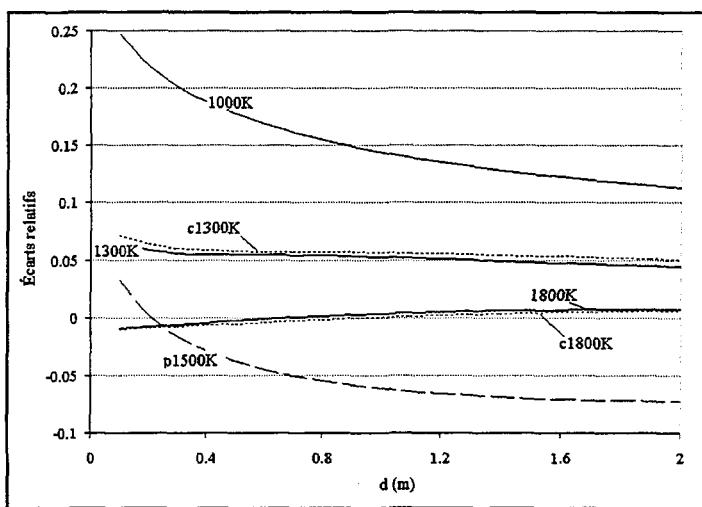


Figure 3.32: Influence de la température sur la valeur des écarts relatifs maximums propres à la méthode SNB-CK 20 pour 5% de H₂O

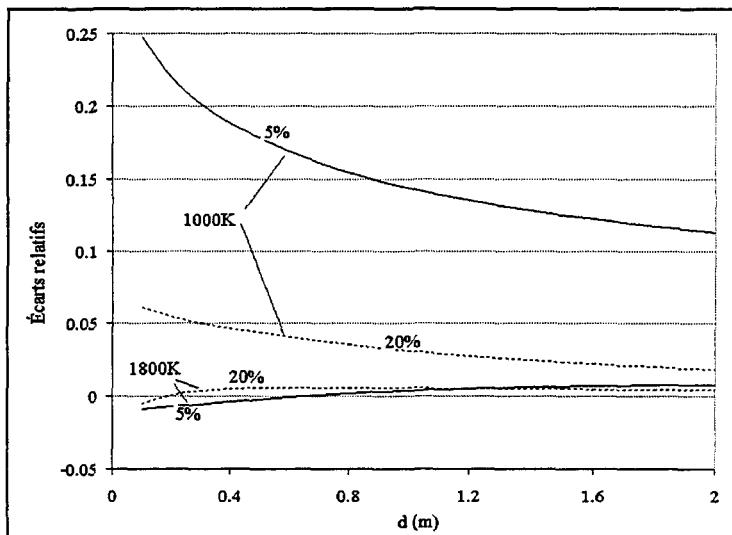


Figure 3.33: Influence de la valeur de la fraction molaire de H₂O sur l'évolution des écarts relatifs de la méthode SNB-CK 20 pour deux milieux isothermes homogènes, l'un maintenu à 1 000K l'autre à 1 800K.

Le fait que la fraction molaire ait une influence supérieure à celle de la distance entre les plaques peut aussi être visualisé à l'aide des valeurs des écarts relatifs trouvées pour une même longueur optique mais pour des fractions molaires différentes. La figure 3.34 illustre l'évolution de ces écarts relatifs pour trois fractions molaires de 5%, 10% et 20% et pour les trois méthodes hybrides. Une nette différence entre les écarts relatifs peut être observée pour une même longueur optique obtenue avec 5 et 20%; cette différence atteint environ 4,5% avec la méthode SNB-CK 20 et pour une longueur optique de 0,03 m.atm.

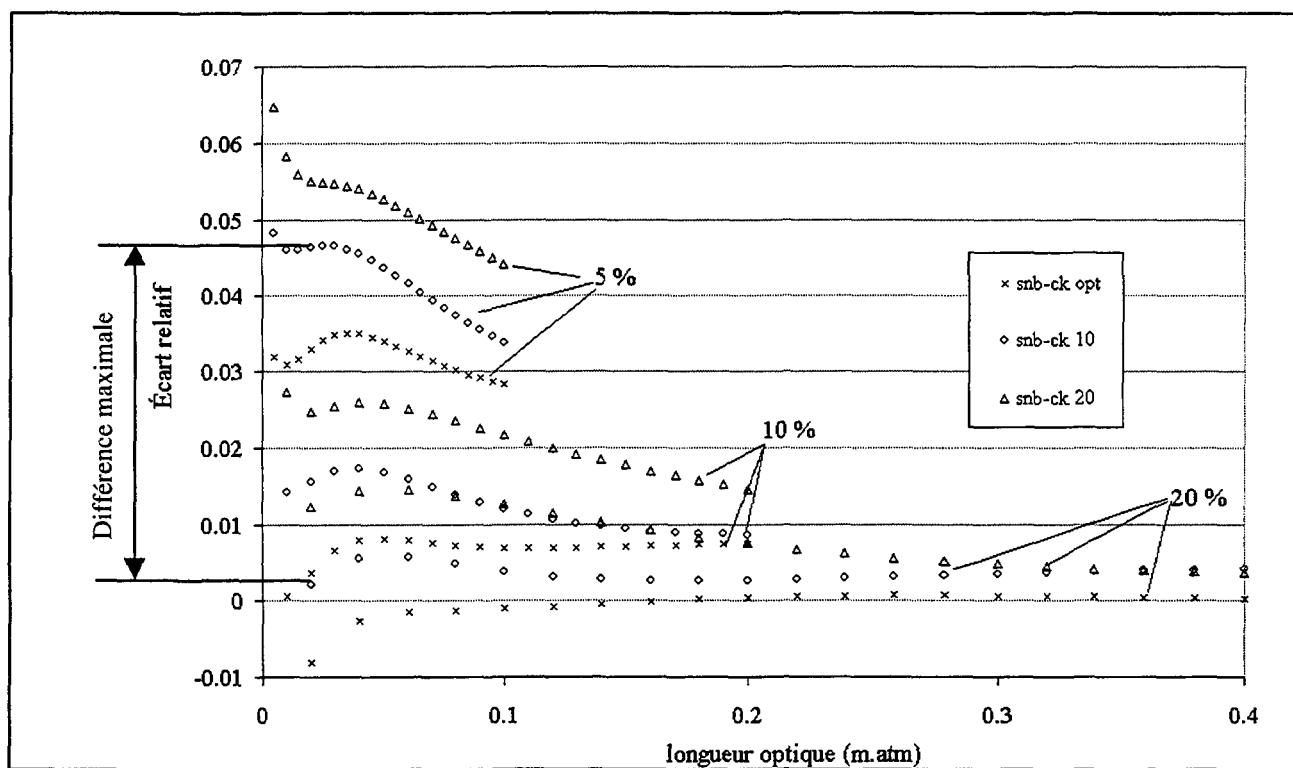


Figure 3.34: Variation des écarts relatifs pour les méthodes hybrides, pour un milieu homogène et isotherme (1 300 K) en fonction de la longueur optique et de la fraction molaire.

Les résultats fournis avec la méthode CK sont, comme il a été mentionné précédemment, assez similaires à ceux des méthodes hybrides, la seule différence notable se produit pour les faibles distances entre les plaques (inférieures à 0,4m) et les faibles

températures. Pour de tels cas, les écarts sont plus importants de 4 à 5% (Cf. Planches 19, 20, 22).

Les résultats fournis par la méthode SLW sont à l'inverse de ceux des quatre modèles précédents. Ils sont en effet de bonne qualité à basse température mais deviennent très peu fiables pour des températures plus élevées. La méthode SLW fournit ainsi de meilleurs résultats à 1 000K et de plus mauvais à 1 800K (homogène ou hétérogène). Pour des distances supérieures à 0,4m et une fraction molaire de 10%, l'écart relatif maximal est ainsi de 2,7% (comparativement à 7,6% pour la méthode SNB-CK OPT, planche 19a) à 1 000K, de 13,2% (1,2% pour SNB-CK OPT, planche 20a) à 1 300K et de 23,5% (2,2% pour SNB-CK OPT, planche 21a) à 1 800K. Une des explications de cette augmentation des écarts relatifs provient du fait que cette méthode traite mal les bandes d'émission à hautes températures (hot lines, Cf. Webb [20]).

Les deux bases de données de la méthode SPGG fournissent des résultats assez différents l'une de l'autre: alors que ceux obtenus avec les données de Smith et al ont une meilleure précision à 1 000K (Planche 19) que ceux fournis avec les données de Pierrot et al , le phénomène est inversé à 1 800K (Planche 21). A 1 300K, les résultats pour les deux bases de données sont similaires (Planche 20). Pour les milieux homogènes à 1 000K et 1 300K, la base de données de Smith et al permet d'obtenir, pour une fraction molaire d'au moins 10%, une précision de l'ordre de 5 à 10% pour des distances supérieures à 0,4m; pour des distances inférieures, les écarts atteignent 27%. La base de données de Pierrot et al permet quant à elle d'obtenir une bonne précision à 1 800K, les écarts variant de 3 à 8%. Cette méthode est cependant plus influencée que les méthodes hybrides ou CK par une variation de la fraction molaire de la vapeur d'eau (Figure 3.35).

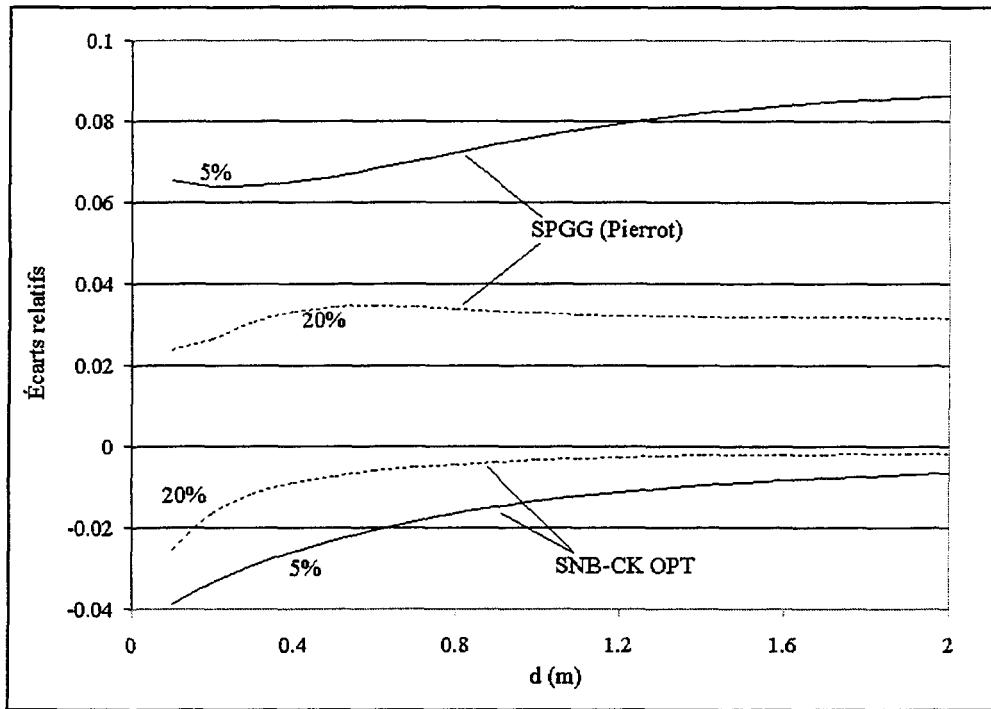


Figure 3.35: Variation des écarts relatifs des méthodes SPGG (Pierrot) et SNB-CK OPT lors d'une augmentation de la fraction molaire pour un milieu homogène isotherme à 1 800K.

b. La divergence du flux

Comme pour les calculs des flux pariétaux, les trois méthodes hybrides fournissent des résultats quasi similaires. Les écarts maximums sont toujours observés pour les faibles températures et les faibles fractions molaires et sont situés au niveau des parois. Ils varient pour ces trois méthodes entre 21 et 24,5% pour le milieu homogène isotherme à 1 000K composé de 5% de H₂O et dont la distance entre les plaques est de 0,4m (Planche 25a). Les écarts ne sont aussi importants qu'à 1 000K; pour des températures supérieures, ils ne sont généralement que de l'ordre de quelques pour-cent. Ceci se vérifie tout particulièrement pour les méthodes SNB-CK OPT et SNB-CK 10 qui fournissent des résultats de meilleure précision aux températures basses et intermédiaires (jusqu'à 1 300 K) que la méthode SNB-CK 20 (Planches 27a, 28a). Pour les milieux à 1 800K, les écarts maximums ne sont plus

que de 4% (Planches 29a, 30a). En outre, comme pour les flux pariétaux, une augmentation de la fraction molaire du milieu permet, à 1 000K, de diminuer de façon significative les écarts relatifs, l'écart maximal n'est plus que de 7% pour 20% de H₂O. L'influence de la concentration est aussi visible en comparant les résultats obtenus avec les deux milieux isothermes à 1 300K, le premier étant homogène, le second hétérogène. Les écarts relatifs pour une même fraction molaire maximale sont ainsi supérieurs au niveau des parois pour le milieu hétérogène, 11%, à ceux correspondant au milieu homogène, 3,6% (Planches 27a et 31a, avec la méthode SNB-CK 20); ce phénomène s'explique par le fait que, près des parois, la fraction molaire du gaz n'est que de 1% pour le cas hétérogène.

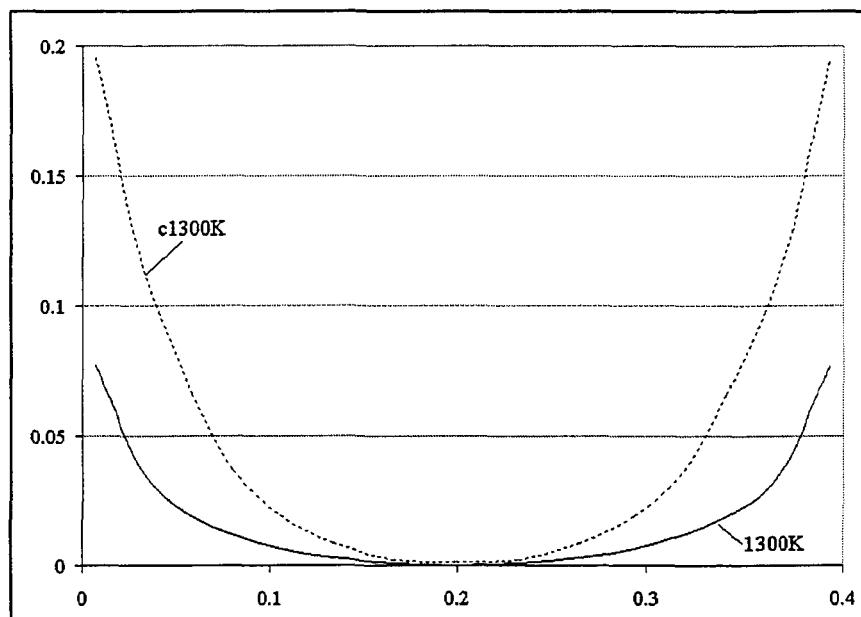


Figure 3.36: Variation des écarts relatifs au niveau des parois propre à la méthode CK pour deux milieux isothermes à 1 300K de même fraction molaire maximale de 10%, mais dont l'un est homogène (1300K) et dont l'autre est hétérogène (c1300 K).

L'influence de la fraction molaire du gaz est encore plus prononcée pour la méthode CK (Figure 3.36). En effet, pour le milieu hétérogène à 1 300 K avec d=0,4m (Planches 31b),

l'écart maximal, atteint au niveau des parois reste de l'ordre de 20% quelle que soit la fraction molaire maximale utilisée, alors qu'il varie de 12,4 à 2% lors d'une augmentation de la fraction de H₂O pour le cas homogène (Planches 27b). Cette plus grande sensibilité de la méthode CK vis-à-vis des faibles fractions molaires est aussi décelable pour le milieu isotherme à 1 000K avec d=0,4 m. L'écart maximal pour une fraction de 5% de H₂O atteint 32,6%, et il est nécessaire d'introduire 20% de H₂O avant que cet écart ne devienne inférieur à 10% (Planche 25b). Cependant, plus la température augmente, moins l'influence de la fraction molaire devient importante et, à 1 800K, les écarts sont toujours inférieurs à 5%. En outre, comme pour les méthodes hybrides, une augmentation des dimensions de l'enceinte permet de réduire les écarts relatifs.

Les résultats fournis par la méthode SLW pour la divergence du flux sont assez similaires à ceux trouvés pour les flux pariétaux en ce qui concerne l'influence de la température: plus le milieu est à haute température, plus la précision diminue. Ainsi, pour un milieu isotherme homogène composé de 10% de H₂O, l'écart relatif maximum varie de 10% à 24% pour une variation de la température de 1 000K à 1 800K (Planches 25b, 30b). D'autre part, l'évolution des écarts est aussi différente pour ces deux températures: alors qu'à 1 000K l'écart est maximal près des parois et peu élevé au centre de l'enceinte, à 1 800K l'écart est maximal au centre tout en restant important au niveau des parois (Figure 3.37). Les écarts pariétaux augmentent par ailleurs, pour les milieux hétérogènes, lors d'une hausse de la fraction molaire maximale (Planches 31b - 34b, Figure 3.38); l'amplitude des variations des écarts relatifs pour les cas hétérogènes est ainsi de 10% supérieure à celle ayant lieu pour le milieu homogène. Cette augmentation des écarts au niveau de la paroi

pourrait être une conséquence de l'utilisation pour les conditions limites de la fraction moyenne du mélange (x_{ref}).

Les résultats obtenus pour les milieux isothermes avec la vapeur d'eau sont par ailleurs de bien meilleure précision que ceux obtenus avec le dioxyde de carbone pour les températures intermédiaires: la variation des écarts en fonction de la distance et de la fraction molaire est beaucoup plus faible à 1 000K et 1 300K, et l'écart maximal est moins élevé (par exemple, planches 8b et 26b). Pour les milieux hétérogènes, les résultats sont assez semblables.

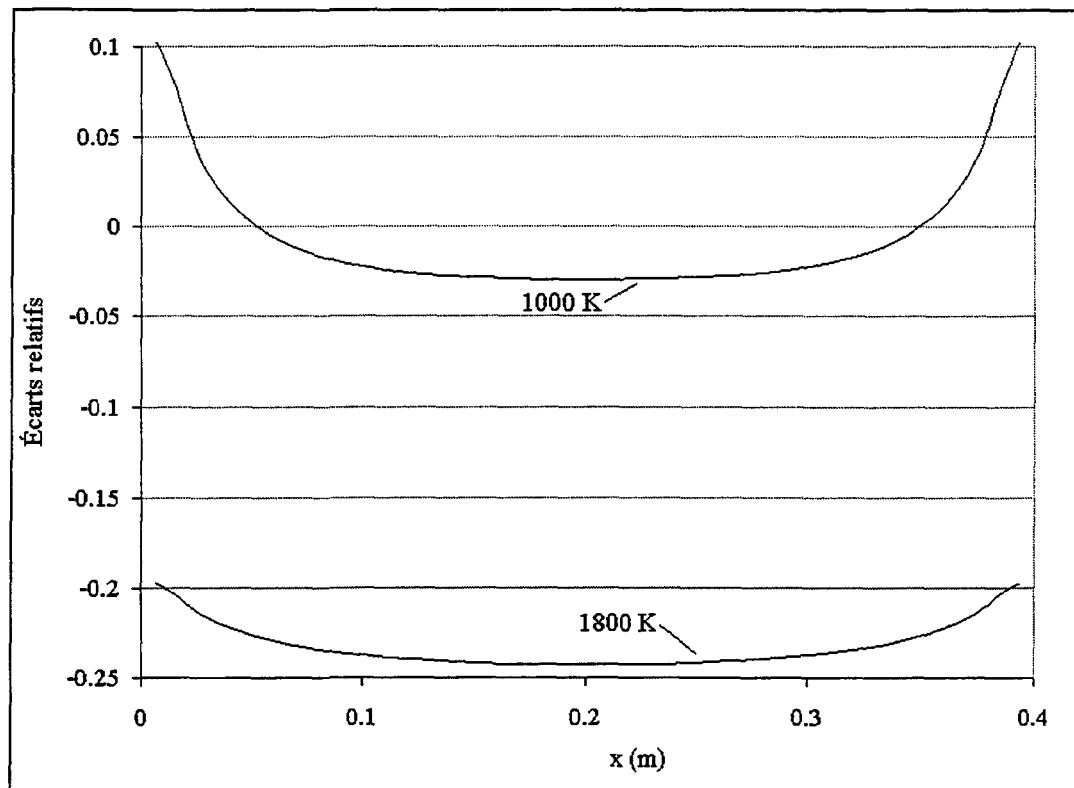


Figure 3.37: Variation des écarts relatifs (pour la divergence du flux) propres à la méthode SLW pour deux milieux homogènes (10% de CO₂) et isothermes, l'un à 1 000 K, et l'autre à 1 800 K.

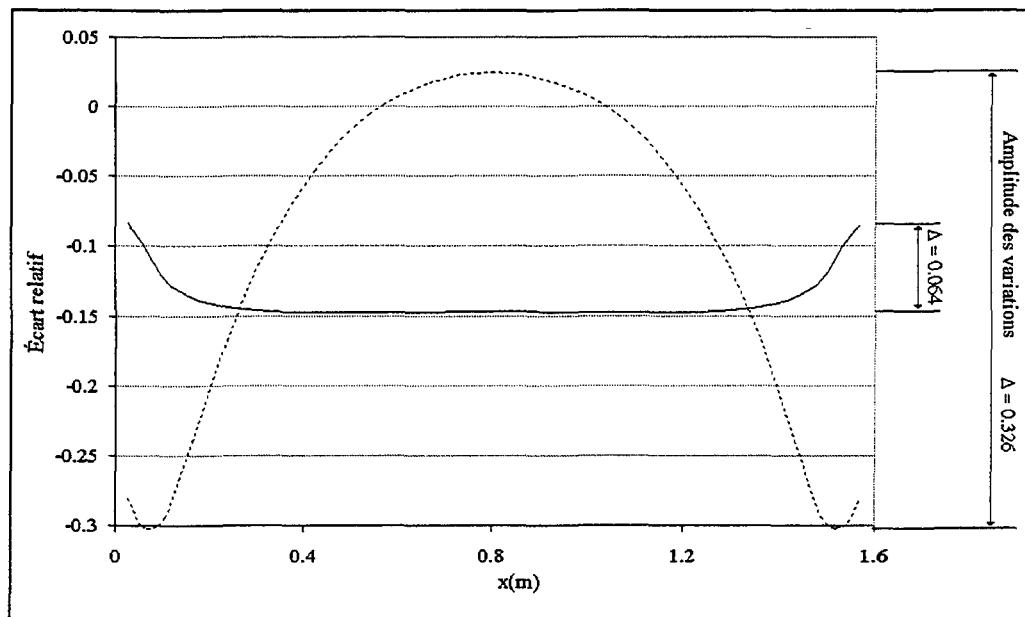


Figure 3.38: Influence de la distribution des fractions molaires (homogène ou parabolique) pour un milieu isotherme à 1 300K. La courbe en trait plein correspond au cas homogène avec une concentration de 5% (cas défavorable, Cf. planche 28b), celle en pointillée au cas hétérogène avec une concentration maximale de 50% (cas défavorable, Cf. planche 32b).

Comme pour les méthodes hybrides, la précision des résultats obtenus avec la méthode SPGG dépend de la température et de la fraction molaire utilisée: elle s'avère être la plus faible pour le milieu homogène à 1 000K et avec 5% de H₂O. Pour un tel milieu, les écarts relatifs atteignent 45% avec la base de données de Smith et al et à 55% avec celle de Pierrot et al (Planche 25b). Une augmentation de la température permet de diminuer ces écarts, mais l'intensité de ces réductions dépend de la base de données considérée. Ainsi, pour les coefficients de Smith, ils sont encore de 22% à 1 800K avec 5% de H₂O, pour seulement 7% en utilisant les coefficients de Pierrot (Planche 29b). Les variations des écarts relatifs en fonction de la fraction molaire ne sont pas à caractère monotone comme avec la température; les écarts commencent en effet à diminuer, puis ils augmentent. Cependant une observation peut être faite pour les fractions de 15 à 20%: quelle que soit la

température, les écarts sont toujours inférieurs à 20%, voire de 10% avec la base de données de Pierrot. Comme pour le flux pariétal, la base de données de Pierrot est la plus précise à haute température, et ne reproduit pas les erreurs de précision trouvées avec la base de données de Smith.

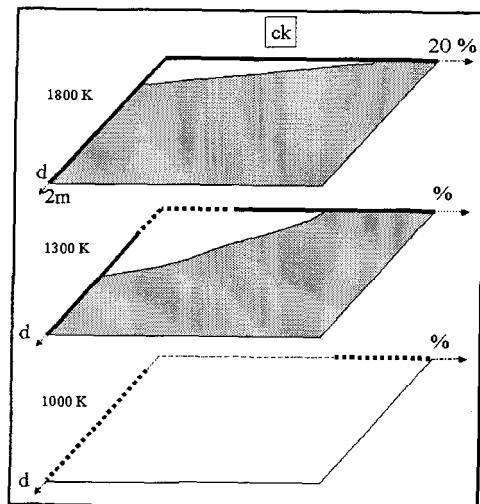
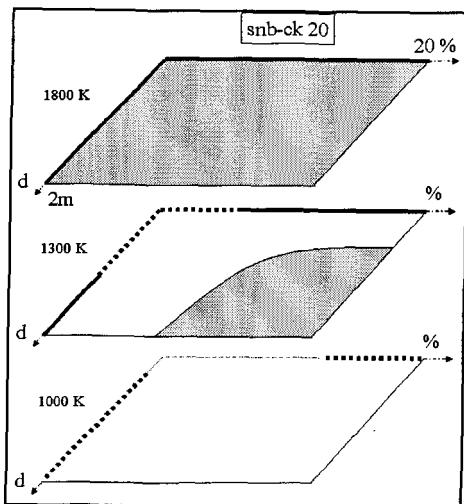
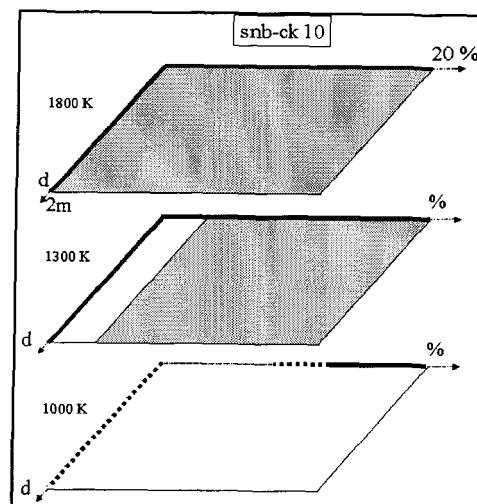
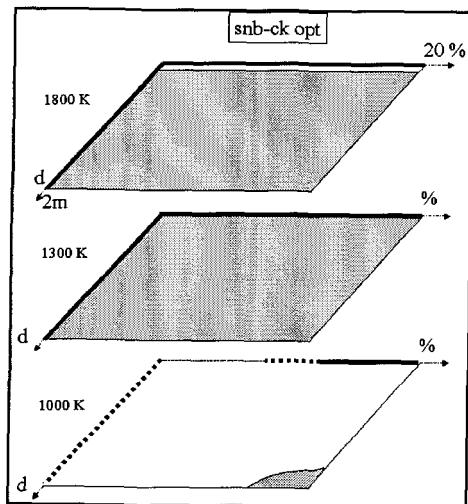
c. Conclusion

Les trois méthodes hybrides SNB-CK et la méthode CK permettent d'obtenir dans la quasi totalité des cas étudiés des résultats de très bonne précision. Les seules imprécisions importantes apparaissent pour ces quatre méthodes à faible température (1 000K) avec une faible fraction molaire de la vapeur d'eau (5%), ou pour la méthode CK lorsque les milieux sont de faibles dimensions (inférieure à 0,4 m). Pour tous les autres cas, les écarts relatifs sont, tant pour le flux pariétal que pour la divergence du flux, inférieurs à 10% et ne sont souvent que de quelques pour-cent. Il n'existe plus, en outre, de distinction très importante entre les résultats obtenus avec les différentes méthodes hybrides, même si la méthode SNB-CK 20, utilisant des regroupements plus importants, fournit des résultats de qualité légèrement inférieure. Par ailleurs, alors qu'avec le dioxyde de carbone, une augmentation de la fraction molaire n'avait pas d'incidence sur la précision des méthodes, elle permet dans le cas de la vapeur d'eau de l'améliorer de façon notable.

Pour les milieux à faible température et à faible fraction molaire, la méthode SLW paraît être une bonne alternative aux méthodes précédentes; cette méthode devient cependant vite imprécise pour des températures élevées (1 300K et plus). Par ailleurs, pour les milieux homogènes isothermes à des températures d'au moins 1 300K, la méthode

SPGG utilisant les bases de données de Pierrot et al permet d'obtenir de bons résultats qualitatifs pour le flux pariétal et la divergence du flux.

Les tableaux de synthèse qui ont été effectués à partir de ces tests sont présentées ci-dessous aux figures 3.39 et 3.40.



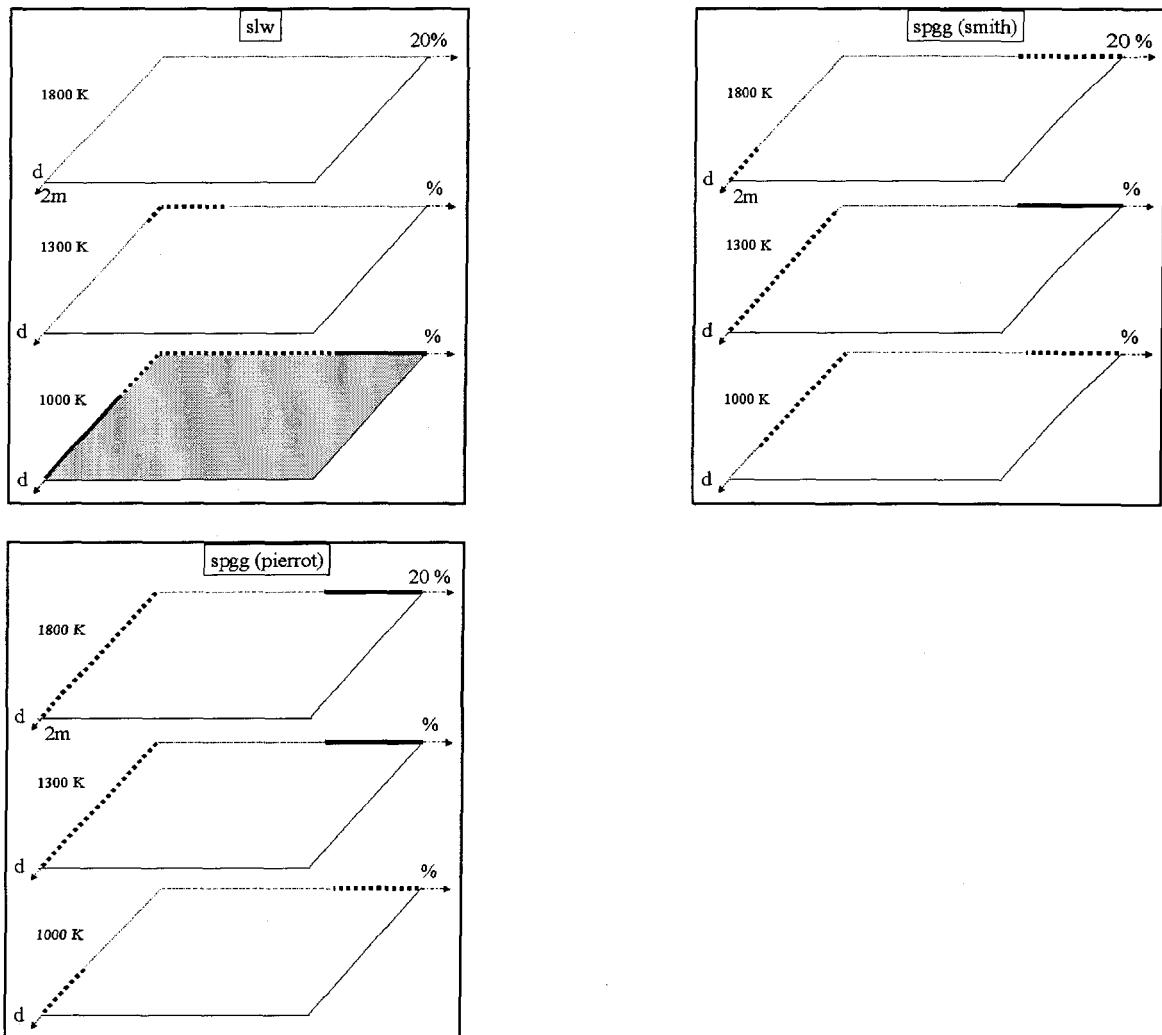
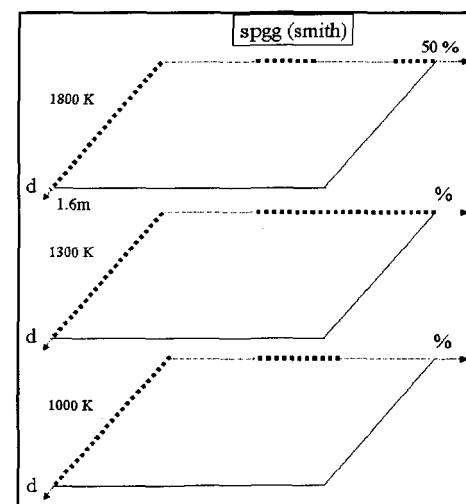
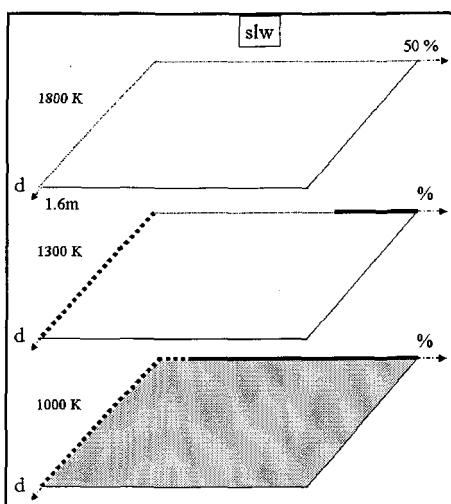
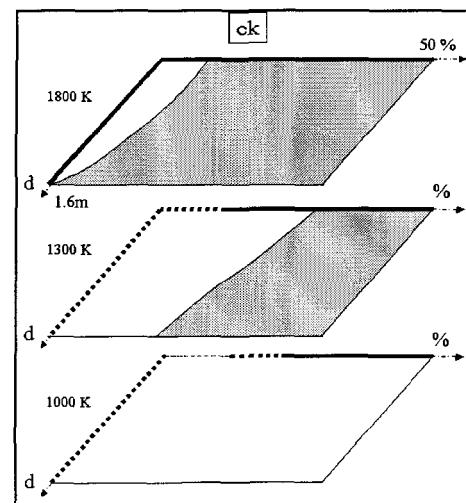
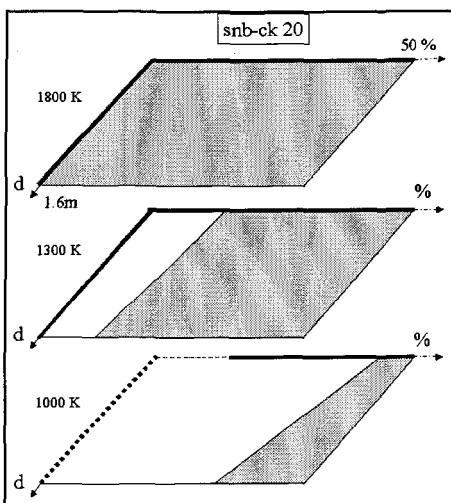
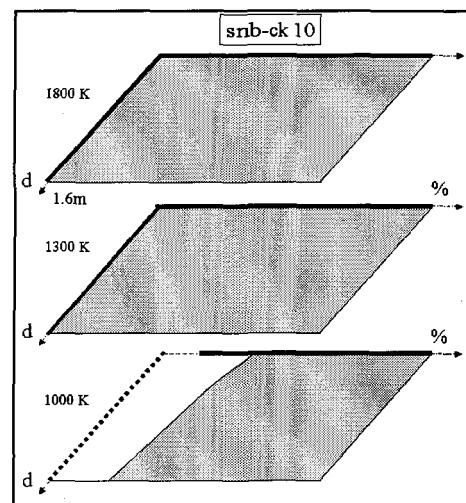
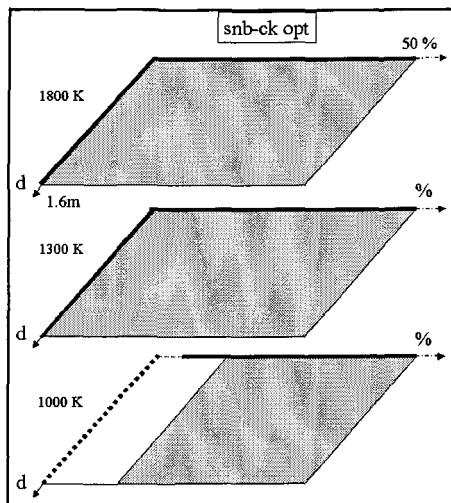


Figure 3.39: Schématisation, pour la vapeur d'eau et pour chacune des méthodes, des zones de précision et de préférences pour le calcul du flux pariétal. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.



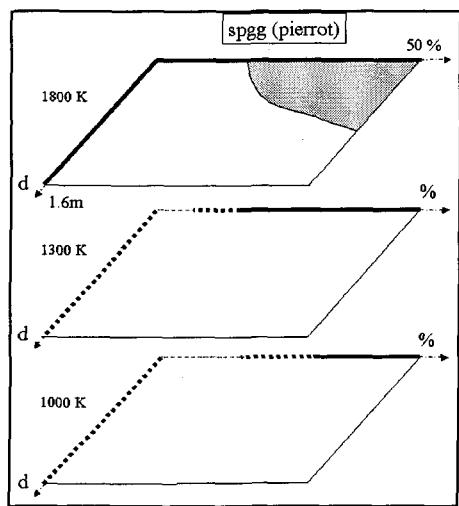


Figure 3.40: Schématisation , pour la vapeur d'eau et pour chacune des méthodes, des zones de bonne précision et de préférences pour le calcul de la divergence du flux. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.

3.4.3 Comparaisons monodimensionnelles avec un mélange

a. Les flux pariétaux

Comme pour le CO₂, les méthodes CK et SNB-CK OPT fournissent de meilleurs résultats. Cependant les écarts observés pour les flux pariétaux, avec les deux méthodes hybrides à regroupements uniformes, sont ici beaucoup moins prononcés; cette atténuation des écarts est une conséquence de la présence de la vapeur d'eau. Les écarts sont maximums pour ces quatre méthodes à basse température (1 000K) et pour les plus basses concentrations (Planche 37a). À 1 000K et avec un mélange de 5% de CO₂ et de 10% de H₂O, les écarts varient, selon la méthode considérée, entre 7,2% et 11,7%. Malgré tout, pour tous les autres cas avec les modèles SNB-CK OPT et CK, les écarts restent inférieurs à 4 ou 5%, et sont le plus souvent de l'ordre de 2 à 3 %; en moyenne sur tous les cas pour ces deux méthodes l'écart relatif est de 1,3%. A l'instar des évolutions observées avec la vapeur d'eau, une augmentation de la température ou de la concentration permet de diminuer sensiblement les écarts relatifs. Ainsi à 1 000K, avec 15% de CO₂ et 30% de H₂O, les écarts pour les deux méthodes ne sont plus au maximum que de 3% et sont inférieurs à 1% pour une épaisseur supérieure à 0,4m (Planche 37b - Figure 3.41). De même, en augmentant la température pour un milieu contenant 5% de CO₂ et de 10% de H₂O, les écarts maximums ne sont plus que de 4,3% à 1 300K pour le milieu hétérogène (Planche 40a) et de 2,6% à 1 800K pour le milieu hétérogène (Planche 41a). Le phénomène est analogue avec les milieux isothermes à 1 300K et à 1 800K et avec le milieu anisotherme (de valeur moyenne 1 233K). Cette diminution des écarts est illustrée sur la figure 3.42.

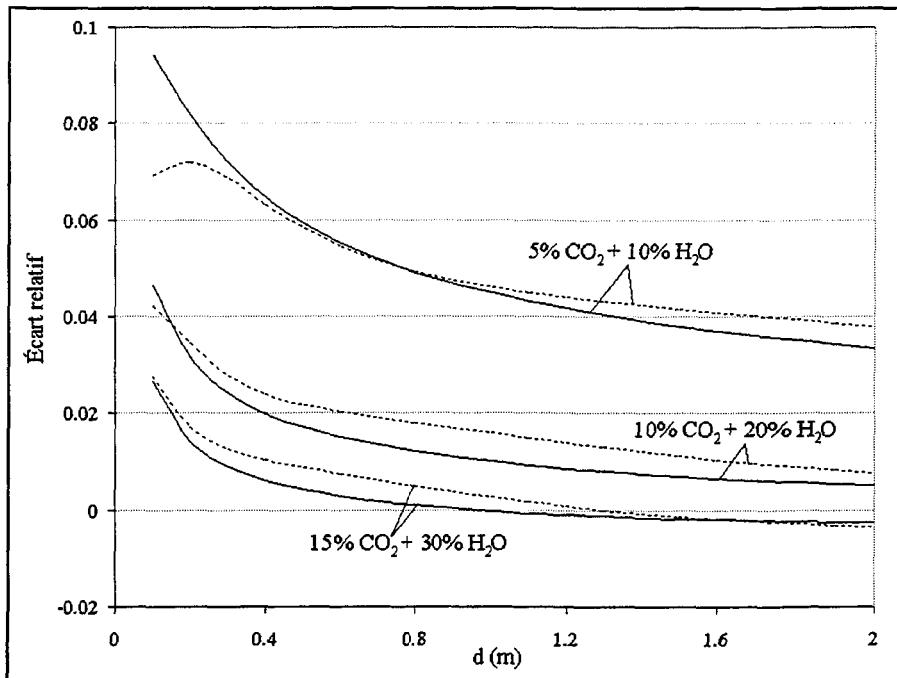
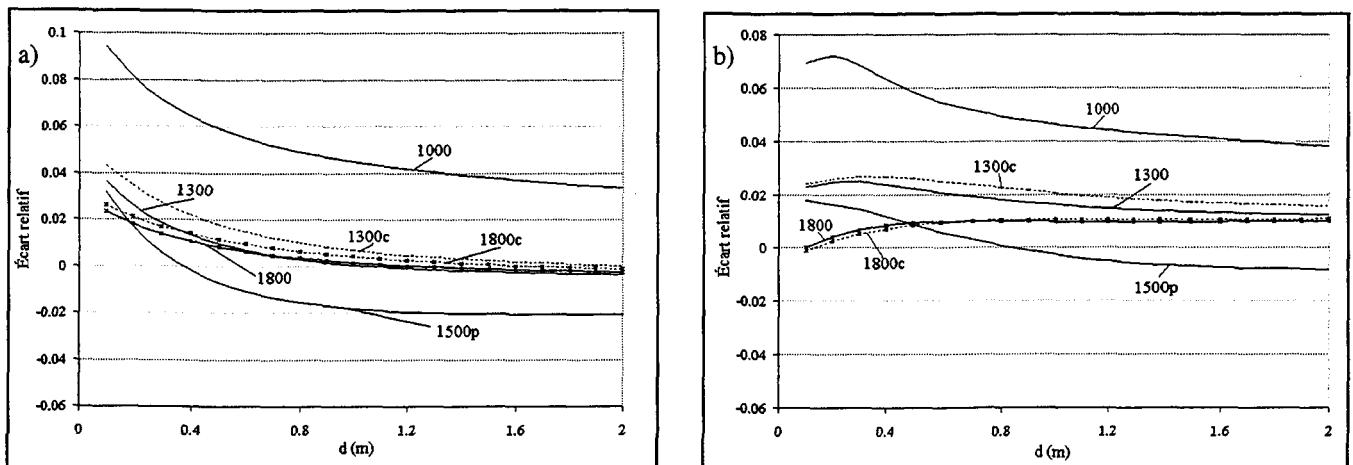


Figure 3.41: Influence de la fraction molaire sur la valeur des écarts relatifs pour les méthodes CK (trait plein) et SNB-CK OPT (trait pointillé) pour un mélange homogène et isotherme à 1 000 K.



Figures 3.42: Influence de la température sur la valeur des écarts relatifs maximums pour les méthodes a) CK et b) SNB-CK OPT, pour des milieux dont la concentration maximale est de 5% CO_2 et 10% H_2O . Les annotations 1000, 1300 et 1800 font référence aux milieux isothermes, 1300c et 1800c aux milieux hétérogènes et 1500p au milieu anisotherme (distribution parabolique de la température).

Avec la méthode CK, une augmentation de l'épaisseur entre les plaques permet toujours une diminution des écarts pour les plus faibles distances; ces derniers peuvent ensuite réaugmenter légèrement en valeur absolue pour les plus grandes distances, si les écarts deviennent négatifs (Planches 38 a, 39 a).

La méthode SNB-CK 10 conduit à de moins bons résultats que les méthodes CK et SNB-CK OPT pour les milieux isothermes mais conserve cependant une précision tout à fait acceptable. L'augmentation des écarts est surtout visible pour les températures de 1 000K et 1 300K, mais reste de l'ordre de 2 à 3% (Planches 37-38). Par ailleurs, l'évolution des écarts relatifs en fonction de l'épaisseur du milieu n'est pas monotone comme pour la méthode CK: deux phases distinctes (montée puis descente) peuvent être observées (figure 3.43); pour les faibles distances, cette méthode voit souvent ces écarts augmenter alors que ceux de la méthode CK diminuent (Planches 37 à 42). Ces deux phases sont aussi présentes avec la méthode SNB-CK OPT, mais la première phase est plus courte et est moins visible (Planches 37, 38, 40, 42) à moins d'être à haute température (Planches 39, 41).

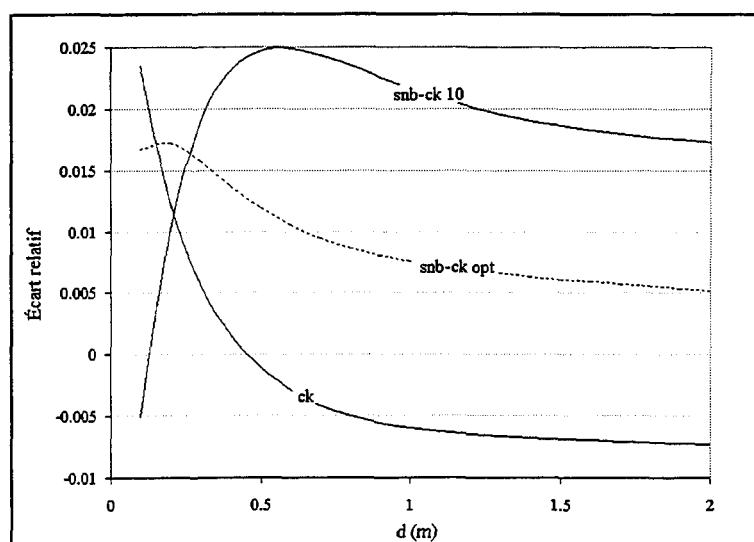


Figure 3.43: Évolutions des écarts pour un milieu hétérogène (10% CO₂ + 20% H₂O) isotherme (1 300K) pour les méthodes CK, SNB-CK OPT et SNB-CK 10.

Le même type de comportement est aussi observable avec la méthode SNB-CK 20. Ce type d'évolution est en fait totalement similaire à celui rencontré avec le CO₂; cependant alors qu'avec le CO₂, une augmentation de la fraction molaire ne permet pas de diminuer les écarts relatifs maximums, une atténuation est ici observée en présence du mélange (Planches 1 à 6, 37 à 42 - figure 3.44). Cette atténuation est cependant moins prononcée que celle ayant lieu avec la vapeur d'eau considérée comme gaz unique (Planches 19 à 25).

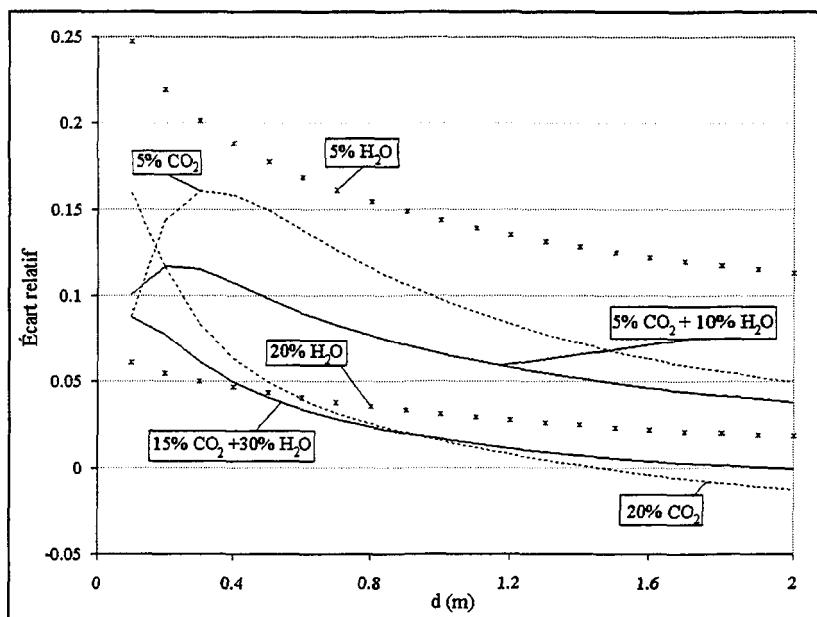


Figure 3.44: Influence de la fraction molaire sur la valeur des écarts relatifs pour la méthode SNB-CK 20 selon les trois types de gaz (CO₂, H₂O ou mélange) pour un mélange homogène et isotherme à 1 000K.

Les écarts avec la méthode SNB-CK 20 sont par ailleurs plus importants que ceux de la méthode SNB-CK 10 pour les faibles distances mais sont du même ordre de grandeur pour les plus grandes distances (Planches 37 à 42).

La méthode SLW, comme avec le CO₂, présente le désavantage de fournir des résultats dont la précision varie de façon très importante en fonction de l'épaisseur du milieu (Figure

3.45). L'amplitude Δ des variations est au minimum de 12% (Planche 37 a) pour les cas isothermes et peut atteindre 21% (Planche 39b). Pour la méthode SNB-CK OPT, ces amplitudes sont au maximum de 3,3% (Planche 37 a) et au minimum de 0,8% (Planche 39b). Par ailleurs, une augmentation de la température ou de la fraction molaire augmentent les erreurs.

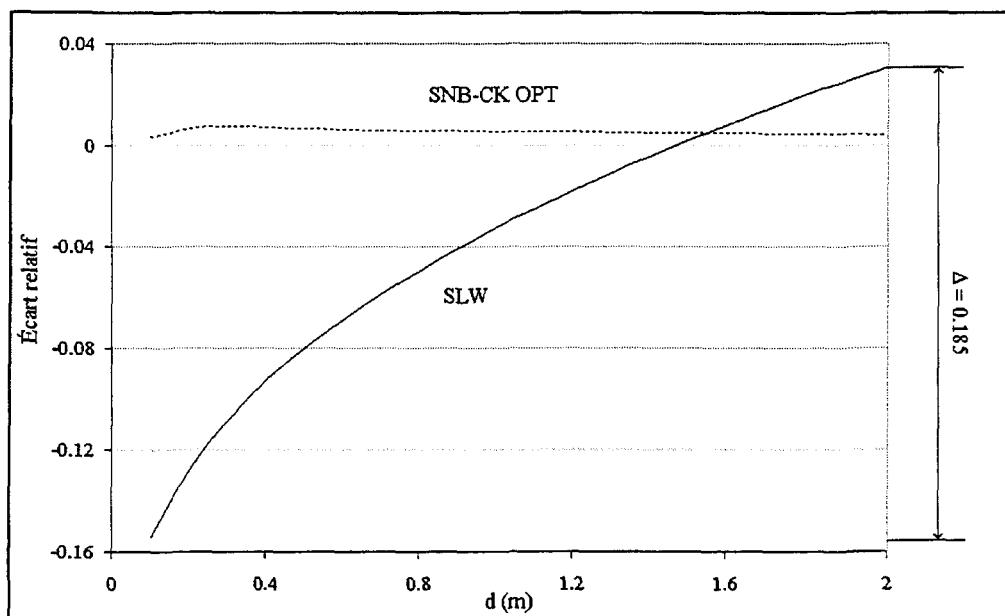


Figure 3.45: Influence de l'épaisseur de la couche gazeuse sur les écarts relatifs du flux pour deux méthodes, SLW et SNB-CK OPT, pour un milieu homogène (10% CO₂ et 20% H₂O) et isotherme (1 800K).

Le seul cas pour lequel cette méthode fournit des bons résultats est le cas homogène (5% CO₂+ 10% H₂O) isotherme à 1 000K; ce cas était aussi intéressant lorsque le milieu contenait de la vapeur d'eau comme gaz unique (Planches 37a, 19).

Deux bases de données ont été considérées pour la méthode SPGG, d'une part celle de

Smith et al qui ne peut s'appliquer que lorsque le ratio $\frac{P_{H_2O}}{P_{CO_2}} = 2$ avec $P_{CO_2} = 0,1$ et,

d'autre part celle de Soufiani et al qui peut s'appliquer pour le même ratio de 2 et pour n'importe quelle valeur de la fraction molaire. Pour ces deux bases de données, les résultats sont meilleurs aux basses températures; dans ces conditions, elles conduisent à des erreurs relativement faibles voire très faibles. Ainsi, à 1 000 K, pour 10% CO₂ et 20% H₂O (pourcentage correspondant à une combustion stoechiométrique) les écarts avec les données de Soufiani et al ne sont que de 2% (Planche 37a). Une augmentation de la température diminue cependant rapidement la précision et ne permet pas d'obtenir des résultats quantitatifs (Planches 38, 39). Ce problème de précision est aussi visible pour le milieu anisotherme: une forte variation des écarts relatifs apparaît en fonction de l'épaisseur (Planches 42) et elle atteint 25% avec celles de Smith et al.

b. La distribution de la divergence du flux

Pour le calcul de la divergence du flux, la méthode CK fournit des résultats de précision légèrement inférieure à la méthode SNB-CK OPT, de l'ordre de 3%, et est du même ordre de précision que la méthode SNB-CK 10. À l'exception du cas anisotherme, les écarts maximums rencontrés pour ces méthodes sont de 8,3% pour la méthode SNB-CK OPT et de 11,2% pour les deux autres (Planches 43, 44). A l'instar des observations faites pour le flux pariétal, ces écarts sont atteints pour le milieu isotherme à 1 000K et homogène avec la plus faible fraction molaire de mélange (4% CO₂ + 8% H₂O). Pour le cas anisotherme, des écarts relatifs supérieurs peuvent être observés au niveau des parois, mais ils ne correspondent pas à de réelles différences de la divergence du flux; ils ne sont qu'une conséquence des faibles valeurs de la divergence et de leur changement de signe au niveau de la paroi (Planches 53, 54, Figure 3.46). Par ailleurs, pour les cinq cas, autre que celui du

milieu homogène isotherme à 1 000K, les écarts restent toujours inférieurs à 3,9% pour la méthode SNB-CK OPT (Planche 50a), 5,8% pour la méthode SNB-CK 10 (Planche 45a) et 6,6% pour la méthode CK (Planche 49b). Une augmentation de la température permet, en effet, de diminuer les écarts relatifs. Cette influence est par ailleurs plus prononcée pour la méthode CK qui conduit à des résultats similaires à ceux de la méthode SNB-CK OPT pour des milieux à 1 800K (Planches 47, 48, 51, 52). L'influence de la fraction molaire est plus aléatoire, une augmentation de la fraction molaire pouvant entraîner selon le cas considéré soit une augmentation (ex: planches 43a avec SNB-CK 10) soit une diminution (ex: planches 49a avec SNB-CK 10) de la précision. Pour les méthodes CK et SNB-CK OPT, aucune réelle amélioration ne peut par ailleurs être observée lors d'une augmentation de l'épaisseur de la plaque: les écarts relatifs atteignent quasiment les mêmes valeurs pour une épaisseur de 0,4m et de 1,6m. Pour la méthode SNB-CK 10, une légère diminution apparaît pour les plus faibles températures (1 000 et 1 300K).

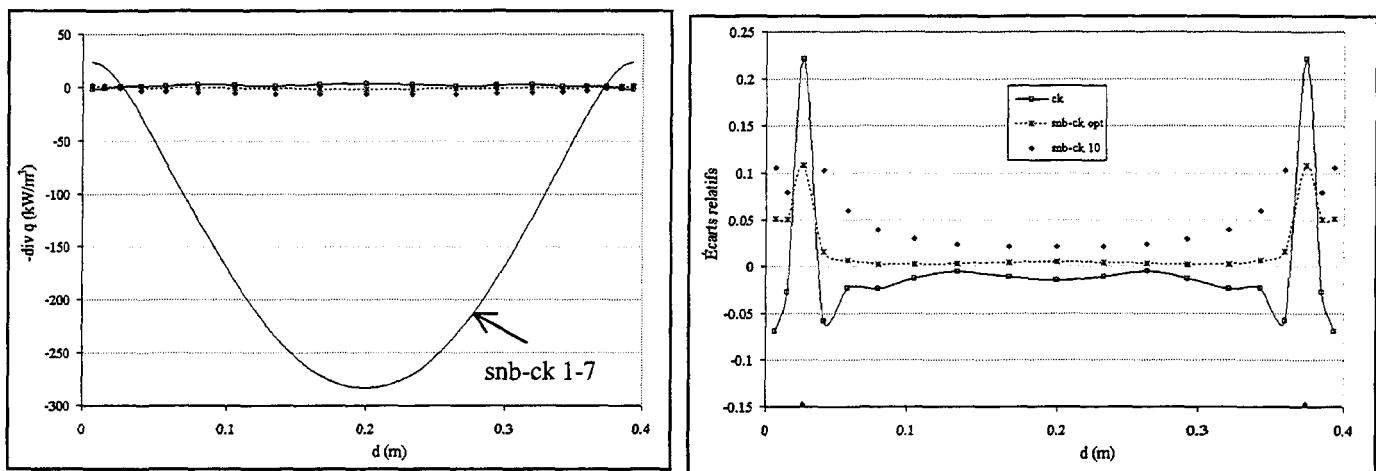


Figure 3.46: a) Variation de la divergence du flux pour la méthode SNB-CK 1-7 et des différences sur la divergence du flux trouvées entre les méthodes SNB-CK OPT, SNB-CK 10, CK et la méthode SNB-CK 1-7; le milieu considéré est anisotherme (parabolique). b) Variation des écarts relatifs correspondant.

Comme pour le calcul des flux pariétaux, la méthode SNB-CK 20 est plus sensible (moins précise) à la présence du CO₂ que la méthode SNB-CK 10, et conduit à des écarts relatifs de 15,2% à 1 000K (Planche 43); pour les autres cas ils peuvent encore atteindre 9% (Planche 45). De manière générale, les influences de la température ou de la fraction molaire sur la précision de cette méthode sont analogues à celles observées avec la méthode SNB-CK 10. La précision de la méthode SNB-CK 20 augmente cependant un peu plus rapidement en fonction de la température et est plus influencée par une augmentation de l'épaisseur: pour le milieu homogène isotherme à 1 800K et une distance de 1,6m, les deux méthodes à regroupements uniformes fournissent une qualité équivalente de résultats (Planche 48a).

Pour la méthode SLW, une augmentation de l'épaisseur a un effet contraire: non seulement l'écart relatif maximal augmente, mais en plus les variations des écarts sont plus importantes (Planches 43 à 54). Pour le milieu homogène isotherme à 1 300K, l'écart maximal pour une épaisseur de 0,4m est de 11,5% et la variation maximale pour une concentration donnée est de 15% (Figure 3.47); pour une épaisseur de 1,6m, l'écart maximal est de 16%, et la variation de 19%. Les meilleurs résultats pour cette méthode sont trouvés, d'une part, pour le milieu anisotherme et, d'autre part, pour le milieu homogène isotherme à 1 000K avec $d=0,4\text{m}$. Cependant, même pour ces cas, les écarts restent conséquents: ils atteignent 8% pour le cas à 1 000K et 13% pour le cas anisotherme (Planche 53b). Pour de nombreux cas, ces écarts sont, par ailleurs, de l'ordre de 20% (Planches 44b, 49b, 50b, 51b, 52b) et les variations des écarts atteignent des amplitudes de 38% pour le cas hétérogène isotherme à 1 800K (Planche 52b). De plus, comme pour le

CO_2 ou le H_2O , considéré comme gaz unique, une augmentation de la température occasionne une diminution de la précision des résultats.

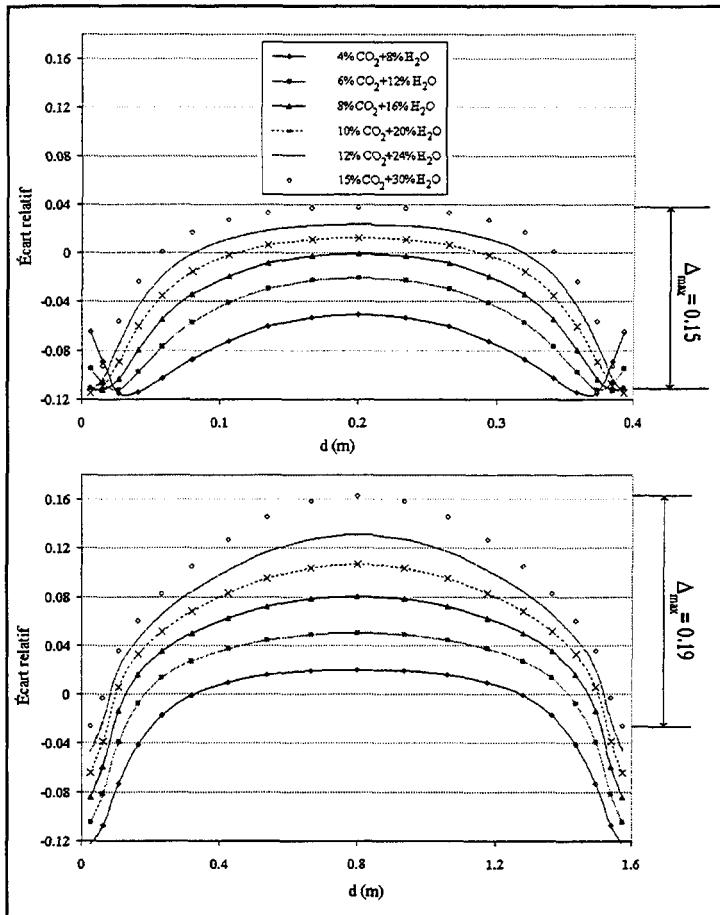


Figure 3.47: Augmentation des écarts relatifs et de l'amplitude de leur variation en fonction de l'épaisseur de la plaque, pour la méthode SLW et un milieu homogène isotherme à 1 300K.

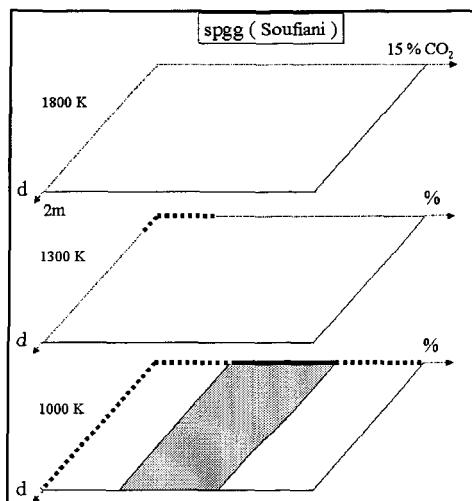
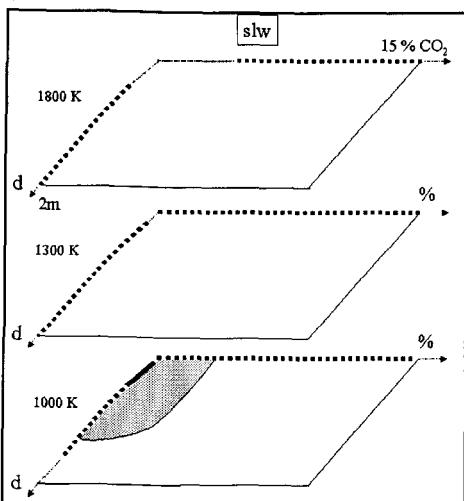
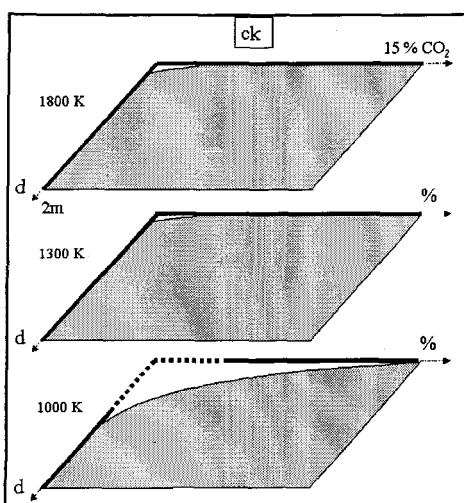
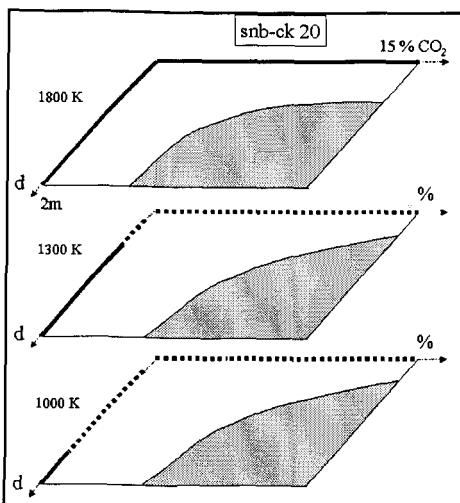
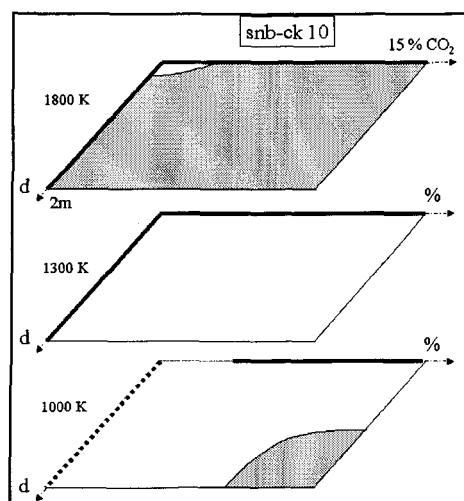
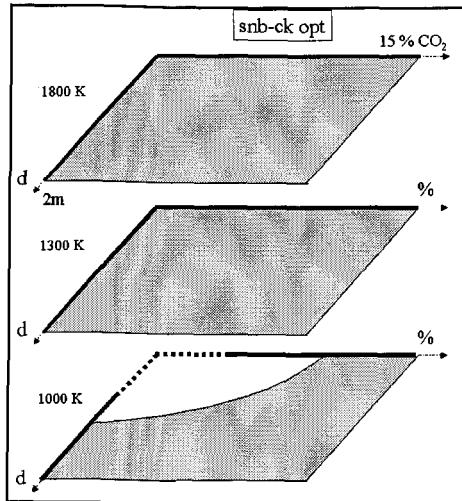
Les sommes pondérées de gaz gris permettent d'obtenir une qualité de précision assez similaire à la méthode SLW à 1 000K, mais deviennent encore plus imprécises lorsque la température est augmentée; à 1 800K, les écarts atteignent respectivement 27 et 31% avec les données de Smith et al et celles de Soufiani et al d'autre part. Les méthodes SPGG et SLW ne permettent pas d'obtenir une bonne qualité de résultats pour la divergence du flux.

c. Conclusion

Comme pour les milieux contenant du CO₂ ou du H₂O comme unique gaz participant, les méthodes SNB-CK OPT et CK permettent toujours, à l'exception du milieu isotherme à faible température (1 000 K) et à basse fraction molaire de gaz participant, d'obtenir d'excellents résultats pour le flux pariétal. Pour la divergence du flux et pour des milieux de moyenne température (1 000 et 1 300K pour nos cas), la méthode CK fournit cependant des résultats de précision légèrement inférieure, d'environ 2 à 3% par rapport à la méthode SNB-CK OPT. Une troisième méthode fournit de bons résultats bien que de qualité inférieure: la méthode SNB-CK 10. La présence de la vapeur d'eau permet de compenser l'imprécision de cette méthode en présence du dioxyde de carbone; la précision des résultats est inférieure de 2 à 3% par rapport aux deux autres méthodes pour le flux pariétal mais devient du même ordre de grandeur que celle de la méthode CK pour la divergence du flux. La méthode SNB-CK 20, plus imprécise que la méthode SNB-CK 10 en présence du CO₂, conduit à de plus grandes erreurs, mais qui sont là encore raisonnables (inférieures à 10% pour la quasi totalité des cas). L'influence de la vapeur d'eau est aussi décelable en observant l'influence d'une augmentation de la fraction molaire sur la précision des résultats pour ces quatre méthodes. Alors qu'en présence de CO₂, comme gaz unique, aucune diminution des écarts maximums n'est observée, en présence de H₂O une nette diminution apparaît et cette diminution est analogue pour le cas du mélange.

La méthode SNB-CK 20 permet d'obtenir de bons résultats qualitatifs. Ceci n'est plus le cas avec les méthodes SLW et SPGG; les résultats fournis par ces méthodes fluctuent conséquemment en fonction des conditions du milieu (température, fraction molaire et

épaisseur) et diffèrent le plus souvent de manière importante des résultats de référence. Les meilleurs résultats pour ces méthodes sont observés à 1 000 K.



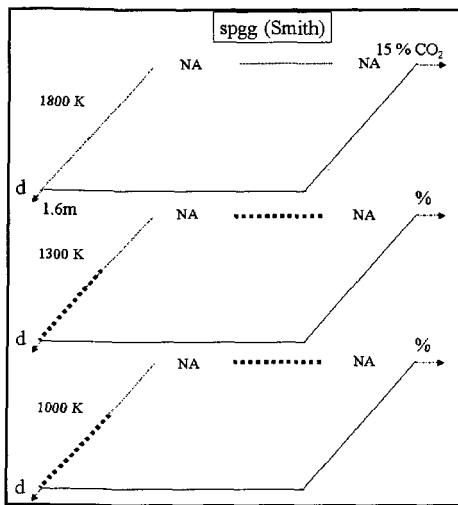
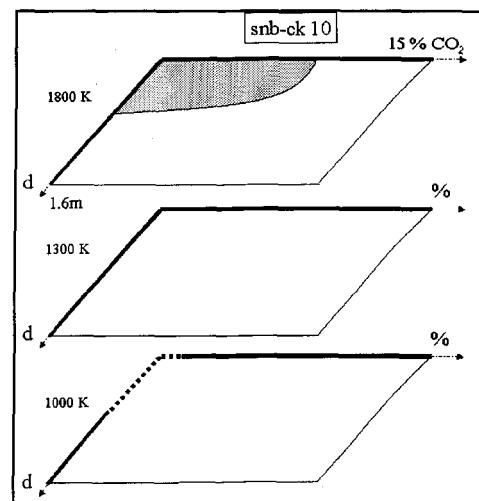
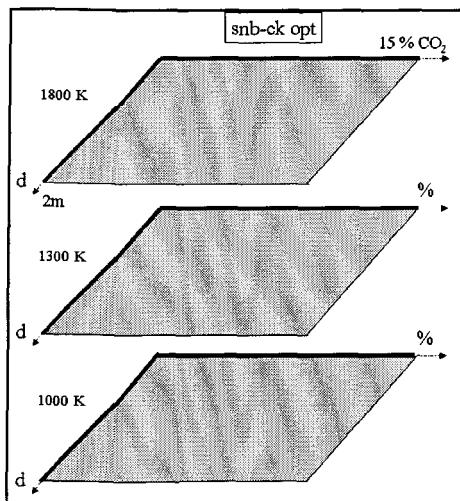


Figure 3.48: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne prédition et de préférences pour le calcul du flux pariétal. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées.
NA signifie Non Applicable.



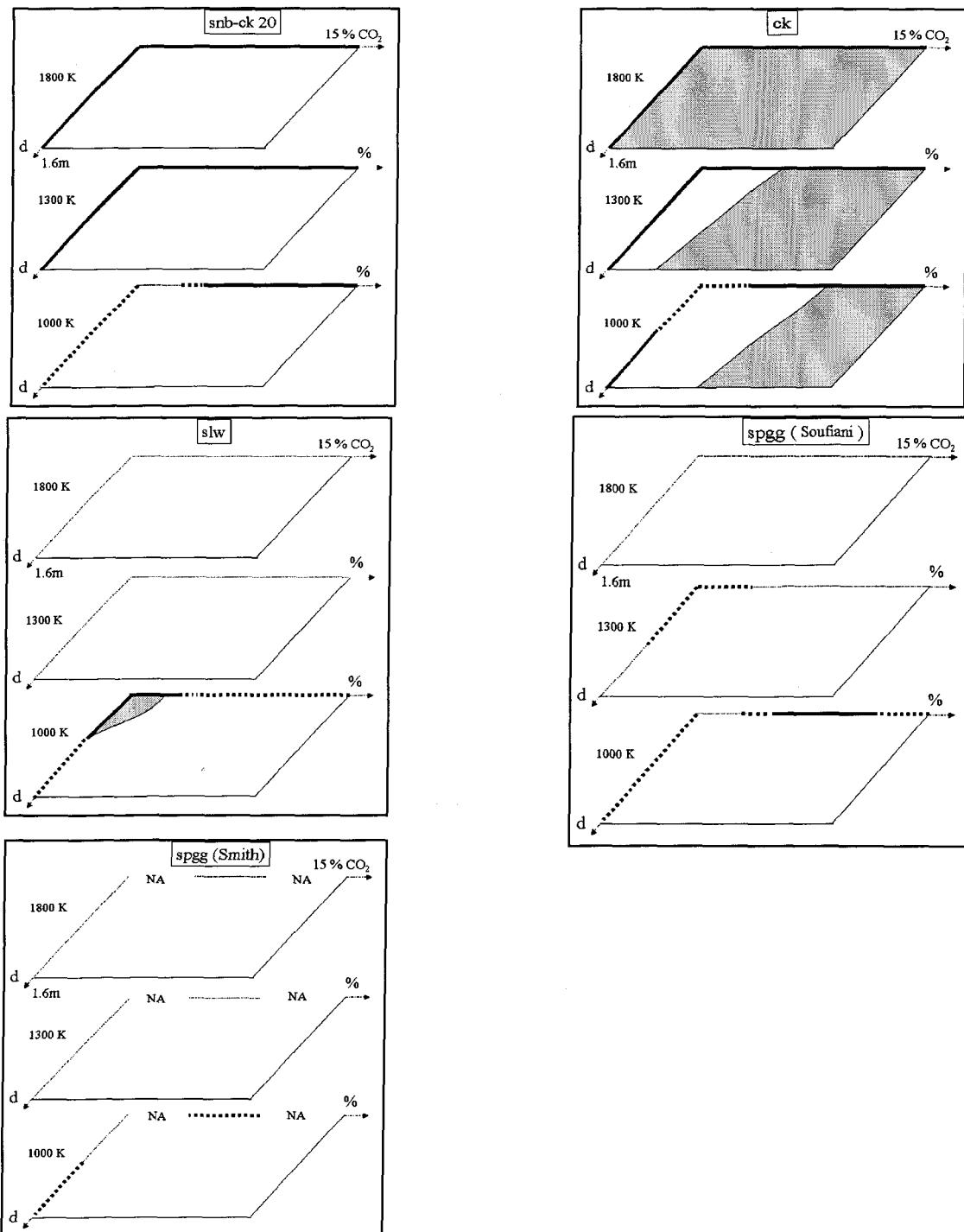


Figure 3.49: Schématisation pour chacune des méthodes, des zones de bonne prédition et de préférences pour le calcul de la divergence du flux. Un trait plein et gras pour un paramètre correspond à une zone pour laquelle la méthode est précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre, un trait pointillé et gras à une zone où la méthode peut être précise tout dépendant de la valeur du second paramètre, un trait pointillé et fin à une zone où la méthode n'est pas suffisamment précise quelle que soit la valeur de l'autre paramètre. Les zones ombrées indiquent les valeurs des paramètres pour lesquelles les méthodes doivent être préférentiellement utilisées. NA signifie Non Applicable.

3.4.4 Conclusions

La méthode SNB-CK OPT a permis pour la quasi totalité des cas envisagés d'obtenir de bons résultats voire d'excellents résultats. De manière générale, les écarts relatifs entre les résultats obtenus avec cette méthode et ceux obtenus avec la méthode SNB-CK 1 sont inférieurs à 5% pour le flux pariétal et à 10% pour la divergence du flux. Ces écarts ne sont supérieurs que lorsque l'enceinte possède des parois à faible température (1 000K), et ne contient qu'une faible fraction molaire de gaz participant dont de la vapeur d'eau.

Les résultats obtenus avec la méthode CK optimisée sont assez semblables en précision à ceux de la méthode SNB-CK OPT, même si, selon les cas, une méthode peut être utilisée préférentiellement à l'autre (Cf. Tableaux de préférences).

Les méthodes SNB-CK 10 et SNB-CK 20 fournissent des résultats plus mitigés. Ainsi, alors qu'elles sont toutes deux de bonnes méthodes quantitatives pour la vapeur d'eau (à l'exception des conditions d'enceintes évoquées avec la méthode SNB-CK OPT), elles sont moins performantes en présence de dioxyde de carbone. Pour une enceinte contenant du CO₂ comme gaz unique, la méthode SNB-CK 10 ne fournit ainsi de bons résultats qualitatifs que pour le flux pariétal, et la méthode SNB-CK 20 est à peine qualitative. En présence d'un mélange, l'influence de la vapeur d'eau permet de palier aux imprécisions dues au dioxyde de carbone, et ces méthodes même si elles restent moins précises que les méthodes SNB-CK OPT et CK permettent le plus souvent d'obtenir des résultats quantitatifs.

Ces quatre méthodes présentent par ailleurs la particularité d'améliorer leur précision de résultats lorsque le milieu contient de la vapeur d'eau et que la fraction molaire de ce gaz

est augmentée. Ce comportement ne s'observe pas lorsque le milieu ne contient que du dioxyde de carbone.

À l'exception du cas d'un milieu contenant de la vapeur d'eau à faible température, la méthode SLW fournit, quant à elle, des résultats de moins bonne qualité que les quatre autres méthodes. Pour le flux pariétal, la qualité des résultats varie de façon importante en fonction de la nature du milieu, de sa fraction molaire, de sa température et de l'épaisseur de la plaque. Pour le CO₂, ces résultats sont parfois quantitatifs mais le plus souvent qualitatifs, et ils ne sont même plus qualitatifs en présence de vapeur d'eau pour de relativement hautes températures (1 800K). De plus, pour la quasi totalité des cas, cette méthode fournit d'important écarts relatifs pour la divergence du flux, de l'ordre de 20%.

La qualité des résultats obtenus avec la méthode SPGG dépend non seulement de la nature du gaz considéré (CO₂, H₂O ou mélange) mais aussi des bases de données utilisées. Les bases de données de Smith et al fournissent ainsi de meilleurs résultats avec le CO₂, où ils sont qualitatifs pour le flux pariétal et avec les faibles températures et les faibles fractions molaires pour la divergence du flux. En présence de H₂O, les résultats ne sont intéressants qu'avec des fractions molaires de l'ordre de 20% et de grandes évolutions de la précision apparaissent pour la divergence du flux lors d'une modification de la fraction molaire. Pour le mélange avec 10% de dioxyde de carbone et 20% de vapeur d'eau, les résultats ne sont pas qualitatifs pour la divergence du flux ou aux hautes températures pour le flux pariétal. La base de données de Pierrot et al pour la vapeur d'eau est globalement plus précise que celle de Smith et al, et fournit de bons résultats qualitatifs voire quantitatifs (aux hautes températures) pour le flux pariétal ou pour la divergence du flux lorsque les fractions molaires de H₂O sont supérieures à 10%. Pour les mélanges, la base de données

de Soufiani et al permet de pouvoir considérer une plus large gamme de fraction molaire de gaz participant que celle de Smith et al, seul le rapport entre la fraction molaire du CO₂ et du H₂O étant imposée, mais la précision reste assez semblable.

CHAPITRE 4

LES COMPARAISONS BIDIMENSIONNELLES

4.1 Introduction

Une étude approfondie des résultats obtenus à l'aide des modèles monodimensionnels a été présentée dans le troisième chapitre et a permis de mettre en évidence les avantages ou les désavantages des différents modèles de gaz réels dans les cas 1D. Cependant, les modèles 1D ne sont guère adéquats pour modéliser les procédés industriels. En effet, même en utilisant des propriétés de symétries, les modélisations industrielles doivent être au minimum bidimensionnelles. Une poursuite des comparaisons en 2D (après validation des codes 2D) est alors nécessaire afin de vérifier si les résultats précédents sont valides pour des géométries de dimension supérieure. Ces comparaisons sont présentées dans la troisième partie de ce chapitre.

Par ailleurs, une contrainte importante des modélisations bidimensionnelles réside dans le temps de calcul. En effet, certaines méthodes qui sont utilisables en 1D, dimension pour laquelle les temps de calcul restent de l'ordre de la minute, deviennent très lentes en 2D. La quatrième partie de ce chapitre est dédiée à la quantification des temps de calcul propres à chaque méthode et à l'explication des différences obtenues.

Pour chacune de ces parties, diverses valeurs de l'émissivité des parois sont de plus introduites afin d'observer leur influence sur la précision des résultats et sur le temps de calcul. Ces émissivités restent cependant constantes en fonction de la longueur d'onde (paroi grise).

4.2 Validation du code 2D relatif à la méthode de référence (SNB-CK 1-7)

Avant de vérifier si les résultats monodimensionnels précédemment obtenus restent pertinents en 2D, une validation du code bidimensionnel relatif à la méthode de référence, la méthode CNB-CK 1-7, doit tout d'abord être effectuée. Cette validation va être réalisée à l'aide des calculs fournis par F. Liu, chercheur au CNRC à Ottawa. Les deux méthodes qu'il a utilisées sont d'une part la méthode SNB, souvent utilisée maintenant comme méthode de référence [30, 51-53], et couplée avec la technique de lancer de rayons et d'autre part la méthode SNB-CK 1, utilisant une quadrature de Gauss-Lobatto à 7 points et couplée avec la méthode des ordonnées discrètes de Carlson et Lathrop [12]; les bases de données sur les propriétés des gaz sont celles de Soufiani et al [27]. Ces résultats proviennent d'études comparatives sur des modèles de gaz réels en 2D effectuées en collaboration entre le GRIPS, groupe de recherche à l'UQAC, et le CNRC [34, 54].

L'enceinte considérée est rectangulaire ($1\text{m} \times 0,5\text{m}$) (Figure 4.1), à parois noires et froides (0K). Le maillage utilisé pour les calculs est uniforme et contient initialement 61×31 cellules rectangulaires; pour notre méthode, chaque cellule est ensuite scindée en deux triangles rectangles. La quadrature angulaire considérée est la quadrature T_7 . Deux milieux gazeux sont retenus, le premier est du dioxyde de carbone, et le second de la vapeur d'eau.

Ces deux milieux sont anisothermes et hétérogènes. Les distributions de températures et de fractions molaires vérifient les équations suivantes:

$$T(x, y) = 1200 [0.3333(1 - 2|x - 0.5|)(1 - 4|y - 0.25|) + 1] \quad (4.1)$$

$$X(x, y) = X_o [4(1 - 2|x - 0.5|)(1 - 4|y - 0.25|) + 1] \quad (4.2)$$

où X_o vaut 0,02 pour le CO₂ et 0,04 pour H₂O. La température varie ainsi entre 1 200K et 1 600K et la fraction molaire entre 2 et 10% pour le CO₂ et entre 4% et 20% pour H₂O. Le champ de température est illustré à la figure 4.2.

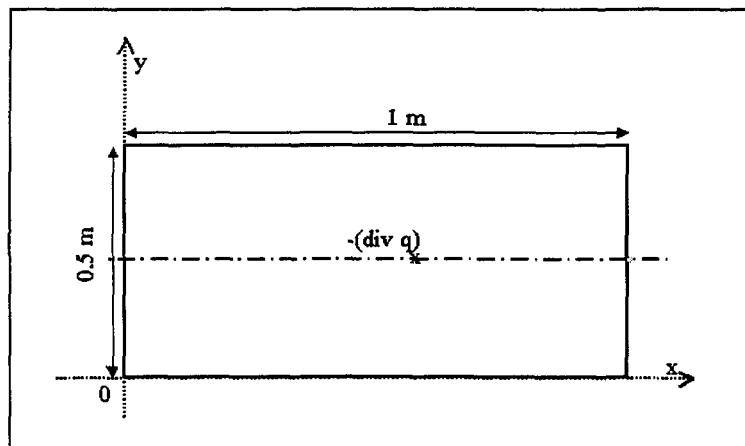


Figure 4.1: Enceinte bidimensionnelle utilisée pour les validations. Le trait discontinu correspond à l'axe sur lequel sera représentée la divergence du flux. Le flux pariétal sera explicité sur les parois horizontales.

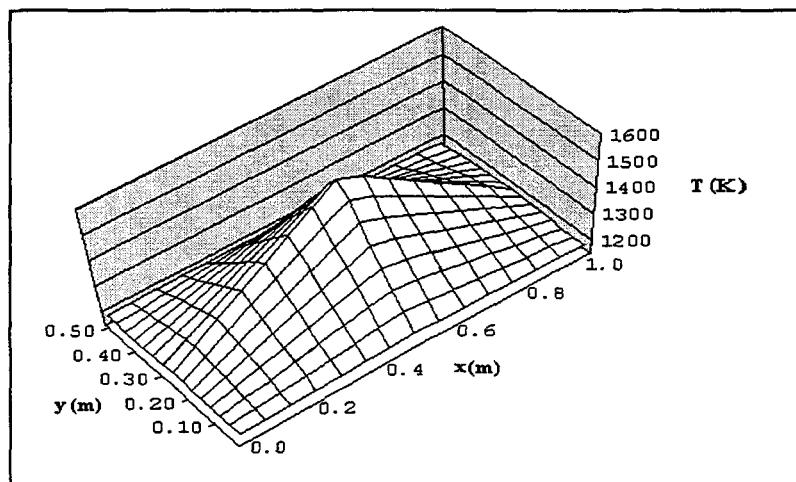


Figure 4.2: Champ de température anisotherme.

Une très bonne concordance entre les trois méthodes utilisées peut être observée sur les figures 4.3 à 4.6. En effet, même si les écarts relatifs entre les deux méthodes SNB-CK et la méthode SNB sont un peu plus importants (Figure 4.7) pour les cellules extrêmes (première et dernière cellules), ils varient globalement pour les autres cellules entre 0 et 2% tant pour le flux pariétal que pour la divergence du flux. Ces différences entre les résultats trouvés pour les trois méthodes s'expliquent en partie par le fait que les méthodes de résolution de l'ETR sont différentes ce qui entraîne de légers écarts même pour des cas de gaz gris (de l'ordre de 1%) [34].

La validation de notre modèle 2D de référence étant maintenant effectuée, des comparaisons bidimensionnelles entre les différentes modélisations peuvent être réalisées et sont présentées ci-après.

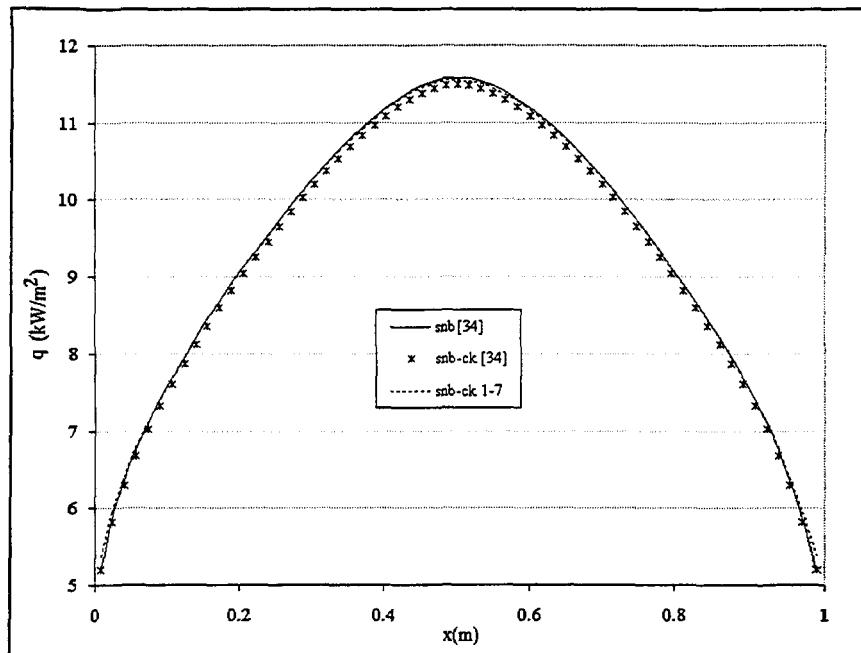


Figure 4.3: Évolution du flux pariétal sur les murs horizontaux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le CO₂.

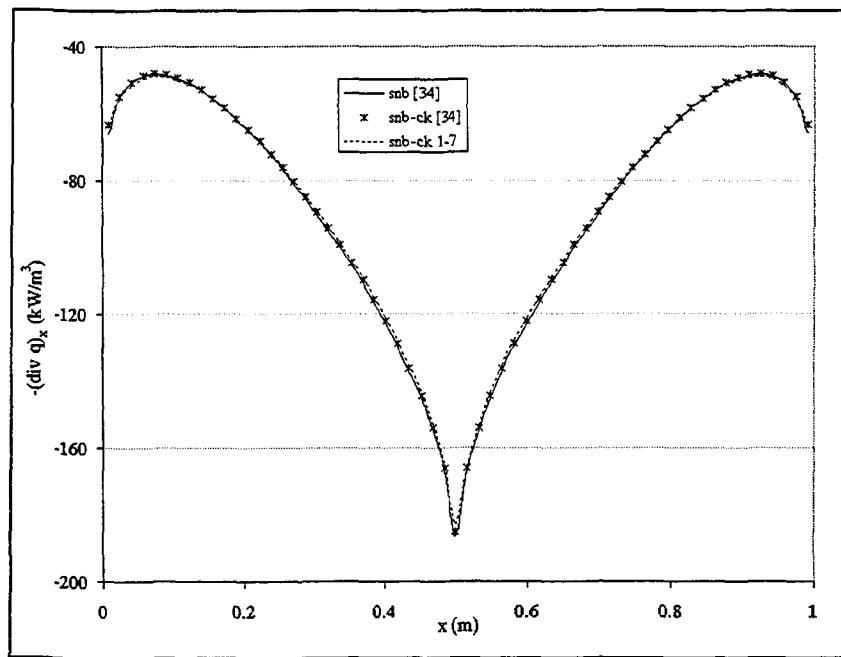


Figure 4.4: Évolution de la divergence du flux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le CO₂.

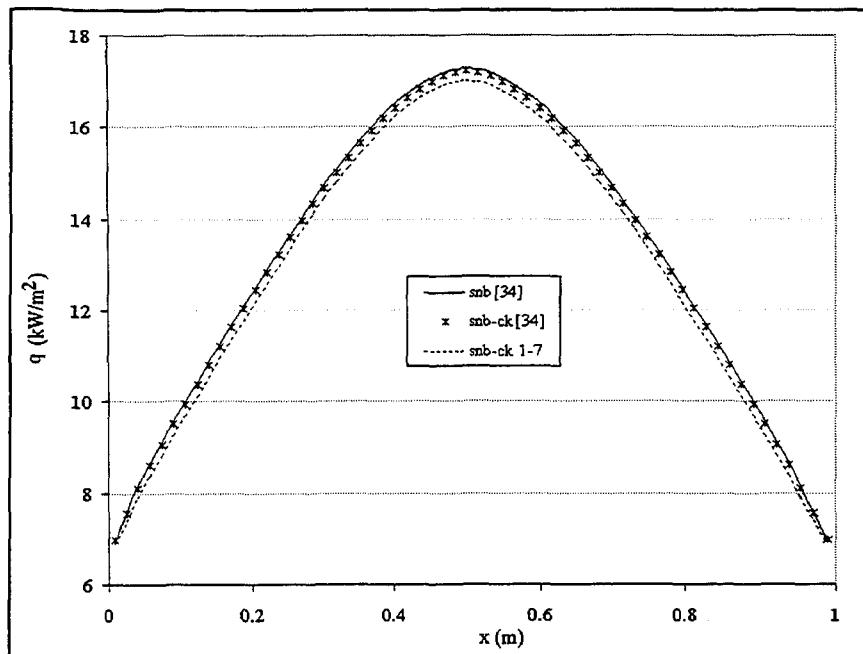


Figure 4.5: Évolution du flux pariétal sur les murs horizontaux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le H₂O.

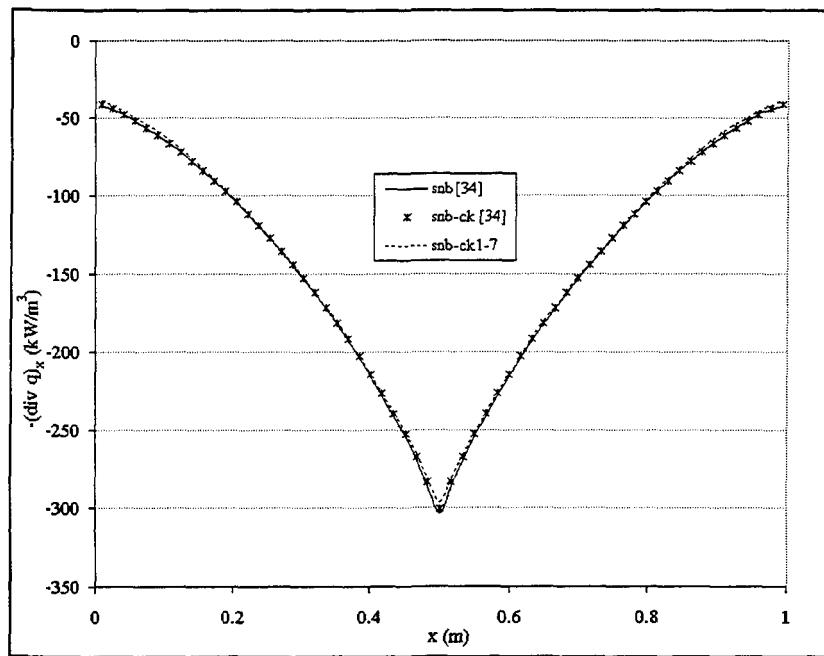


Figure 4.6: Évolution de la divergence du flux pour les méthodes SNB et SNB-CK utilisées par Liu et la méthode SNB-CK 1-7. Le gaz considéré est le H₂O.

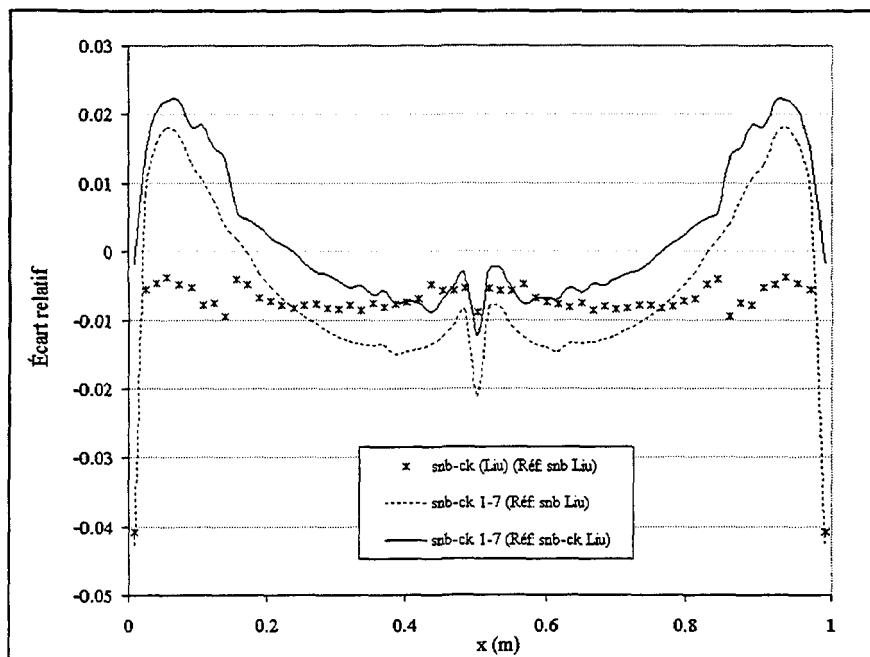


Figure 4.7: Évolution des écarts relatifs de la divergence du flux entre d'une part les méthodes SNB (Liu) et SNB-CK (Liu), d'autre part les méthodes SNB-CK 1-7 et SNB (Liu) et enfin les méthodes SNB-CK 1-7 et SNB-CK (Liu). Le gaz considéré est le CO₂.

4.3 Comparaisons bidimensionnelles

Les tests bidimensionnels nécessitant beaucoup plus de temps de calcul que les tests monodimensionnels, moins de cas sont étudiés dans cette partie. Ils permettront cependant de vérifier, d'une part, si les résultats trouvés en 1D sont toujours valides, et d'autre part, d'étudier les temps de calculs liés à chaque méthode, et enfin d'évaluer l'influence de l'émissivité des parois non seulement sur la précision des résultats mais aussi sur le temps de calcul. Afin d'utiliser au mieux les capacités de notre code bidimensionnel de résolution de l'ETR, l'enceinte considérée possède une géométrie complexe, illustrée à la figure 4.8; toutes les données géométriques nécessaires sont fournies à la droite de la figure.

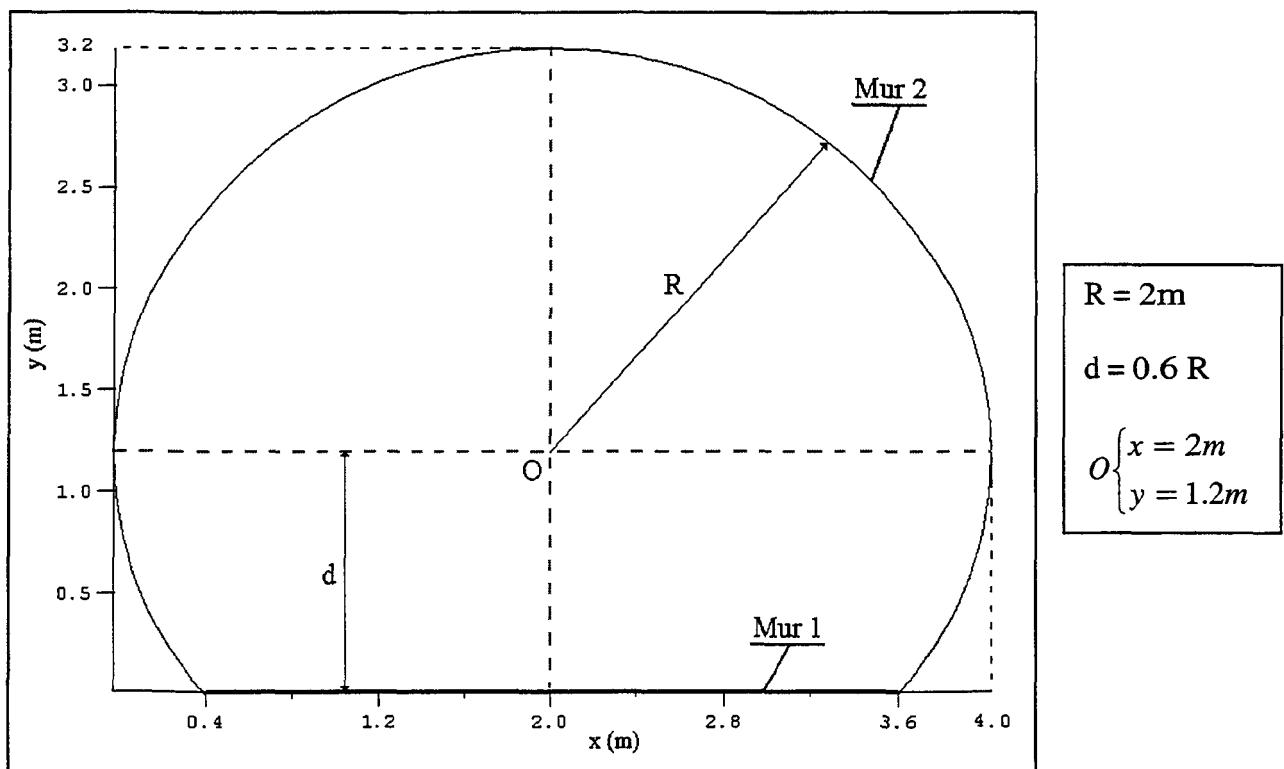


Figure 4.8: Géométrie de l'enceinte complexe.

4.3.1 Comparaison sur la précision des résultats

Comme pour les cas monodimensionnels, trois natures de gaz sont considérées, d'une part des gaz participants uniques (CO_2 ou H_2O) et d'autre part un mélange de ces deux gaz. Deux types de distribution de température sont de plus envisagées. La première, utilisée avec les trois types de gaz est anisotherme, et l'équation du champ de température est la suivante:

$$T(x, y) = 1000 \times (1 - 3r^2 + 2r^3) + 800. \quad (4.3)$$

$$\text{avec } r(x, y) = \sqrt{[(x - 2)/2]^2 + [(y - 1)/2.2]^2} \quad (4.4)$$

Ce champ de température est illustré à la figure 4.9a. La seconde est isotherme et n'est utilisée qu'avec le mélange de CO_2 et H_2O ; la température est alors de 1 800K.

La distribution des fractions molaires est quant à elle hétérogène et suit la loi suivante:

$$X(x, y) = x_0(1 - 3r^2 + 2r^3) + x_1 \quad (4.5)$$

pour lequel r est calculé à l'aide de l'équation 4.4. Les valeurs de x_0 sont respectivement 0.1, 0.075 et 0.15 pour un cas de gaz unique, pour le CO_2 lors d'un mélange et pour le H_2O lors d'un mélange. Les valeurs de x_1 sont quand à elles respectivement de 0.05, 0.025 et 0.05. Le champ de fractions molaires (Figure 4.9b, dans le cas d'un gaz unique) est similaire à celui de la température.

Pour les calculs, la quadrature S_8 est utilisée, et le maillage contient soit 1236 cellules triangulaires (Figure 4.10) pour le cas d'un gaz unique, soit 554 cellules pour le cas d'un mélange. À l'exception du nombre de cellules, les deux maillages sont tout à fait semblables. Cette diminution du nombre de cellules dans le cas du mélange permet de

réduire le temps de calcul qui devient vite prohibitif pour la méthode de référence SNB-CK 1-7; les temps de calculs seront présentés ultérieurement au cours de la partie 4.3.2. Par ailleurs, les cellules grisées, observables sur la figure 4.10 correspondent aux deux axes pour lesquels seront comparées les évolutions de la divergence du flux. Le flux pariétal sera quant à lui analysé, pour des raisons de facilité de représentation, sur le mur horizontal inférieur (Figure 4.9).

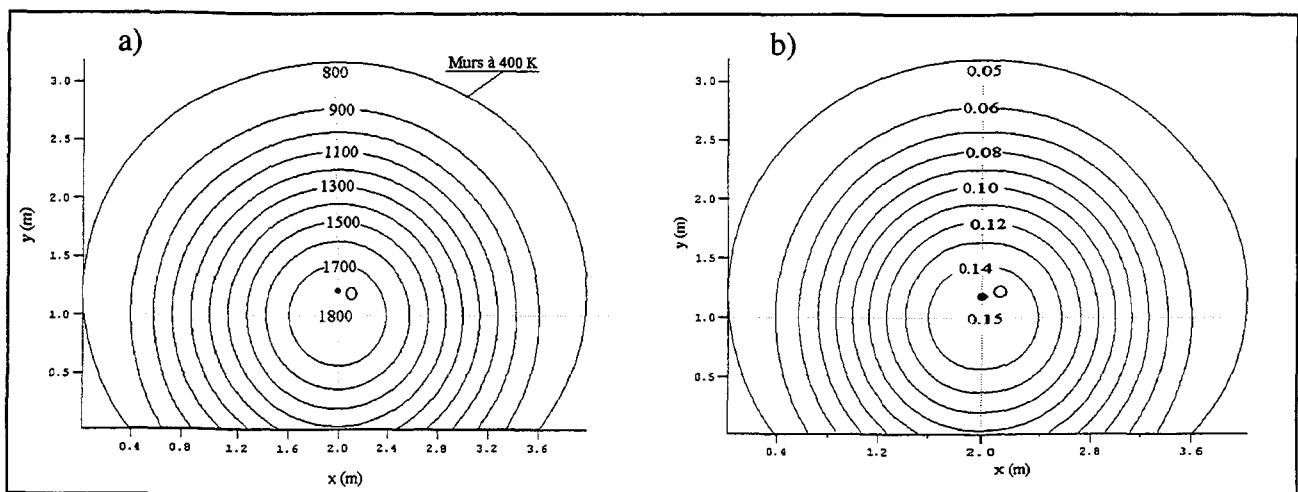


Figure 4.9. a) Champ de températures utilisé pour les cas anisothermes. b) Champ de fractions molaires pour le cas hétérogènes.

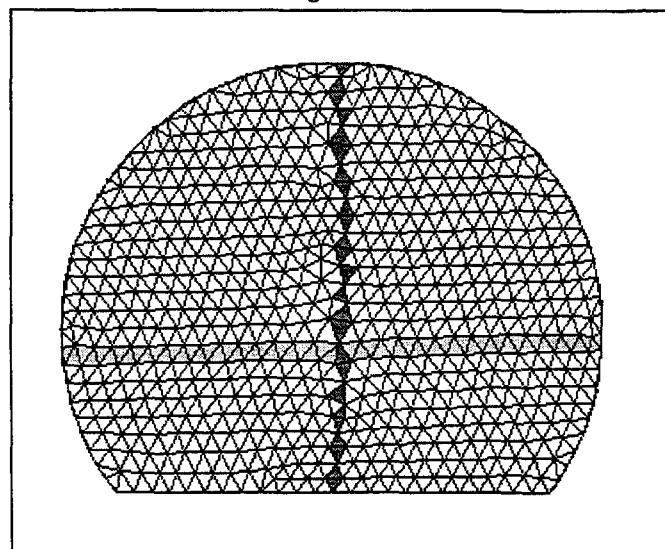


Figure 4.10: Maillage utilisé lors des tests effectués en 2D avec le CO₂ ou le H₂O (1236 cellules). Les cellules grisées désignent les axes considérés pour les comparaisons de la divergence du flux.

4.3.1.1 Comparaison des résultats avec des parois noires

La première série de comparaisons est effectuée avec des parois noires, afin de vérifier si les résultats obtenus en 2D confirment ceux trouvés en 1D. Une seconde série de tests pour lesquels l'émissivité aux parois varie de 0,5 à 1 est ensuite présentée afin d'observer l'influence de l'émissivité sur la précision des méthodes.

a. Comparaison avec le CO₂

La méthode SNB-CK OPT permet d'obtenir d'excellents résultats (Figures 4.11, 4.13, 4.15): les écarts relatifs (en prenant toujours comme référence la méthode SNB-CK 1-7) pour le flux pariétal et la divergence du flux, dans le cas où cette dernière n'atteint pas des valeurs trop faibles, n'excèdent pas 1% et sont souvent de l'ordre de 0% (Figures 4.12, 4.14, 4.16). La méthode CK fournit des résultats tout à fait similaires pour le flux pariétal: les écarts sont de l'ordre de 1%. Cette méthode est cependant un peu moins précise pour la divergence du flux pour laquelle les écarts sont de l'ordre de 4%. Les deux méthodes SNB-CK utilisant les regroupements uniformes fournissent, quant à elles, des résultats moins intéressants et surestiment les échanges radiatifs. Les écarts relatifs maximums pour le flux pariétal sont respectivement de 5% et 7% pour les méthodes SNB-CK 10 et SNB-CK 20. Pour la divergence du flux, les écarts maximum atteignent 6%. Les écarts les plus importants sont cependant ceux obtenus avec la méthode SLW. Le flux pariétal est ainsi surestimé de 7% au centre et 9% au niveau des parois, et la divergence du flux de 4% au niveau des parois à 15% au centre.

Ces résultats sont assez similaires à ceux trouvés pour les cas monodimensionnels pour lesquels la température moyenne est d'environ 1 300K (cas isothermes à 1 300K ou cas parabolique), et la concentration moyenne de 10%. Ces caractéristiques sont assez proches de celles de la zone située près du mur 1, les propriétés moyennes de l'enceinte étant une température de 1 150K et une fraction molaire de 8%. En observant les planches 2a, 4a et 6a pour les grandes épaisseurs, les écarts relatifs pour le flux pariétal varient entre 1 et 3,5% pour les méthodes SNB-CK OPT et CK tout en restant légèrement supérieurs pour la méthode CK. Ils varient de 4 à 9% pour les méthodes SNB-CK 10 et SNB-CK 20 et entre 8 et 10% pour la méthode SLW. Toutes ces tendances sont bien retrouvées dans ce cas bidimensionnel, même si les valeurs des écarts sont un peu moins importantes pour certaines des méthodes. Pour la divergence du flux, les tendances observées en 1D (Planches 10, 14, 18) sont aussi retrouvées pour ce cas, même si, là encore, les valeurs des écarts pour les variantes SNB-CK sont plus faibles en 2D.

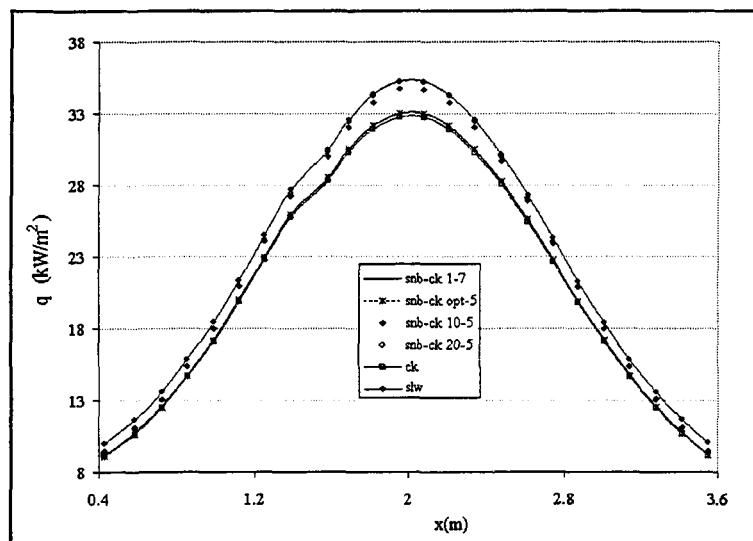


Figure 4.11: Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO₂.

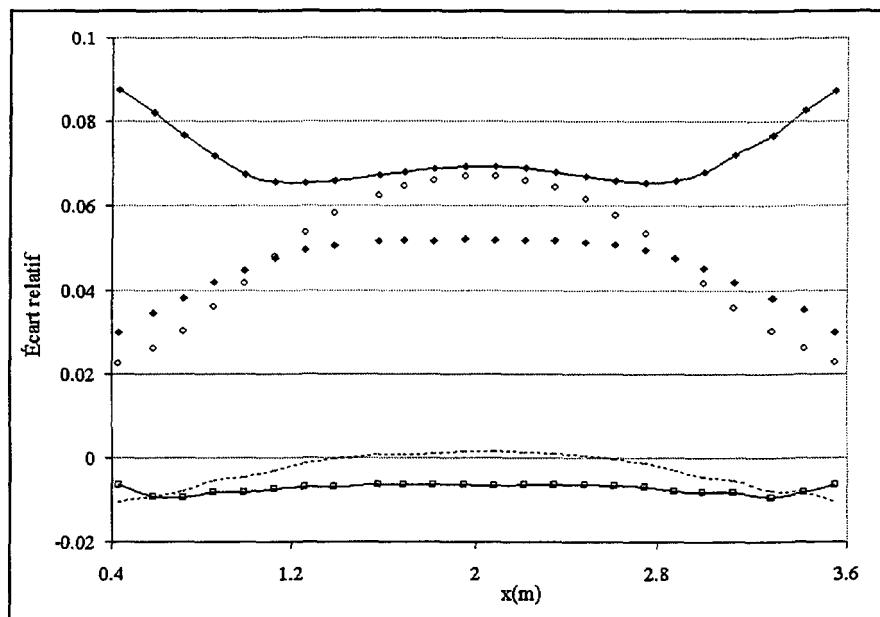


Figure 4.12: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO₂.

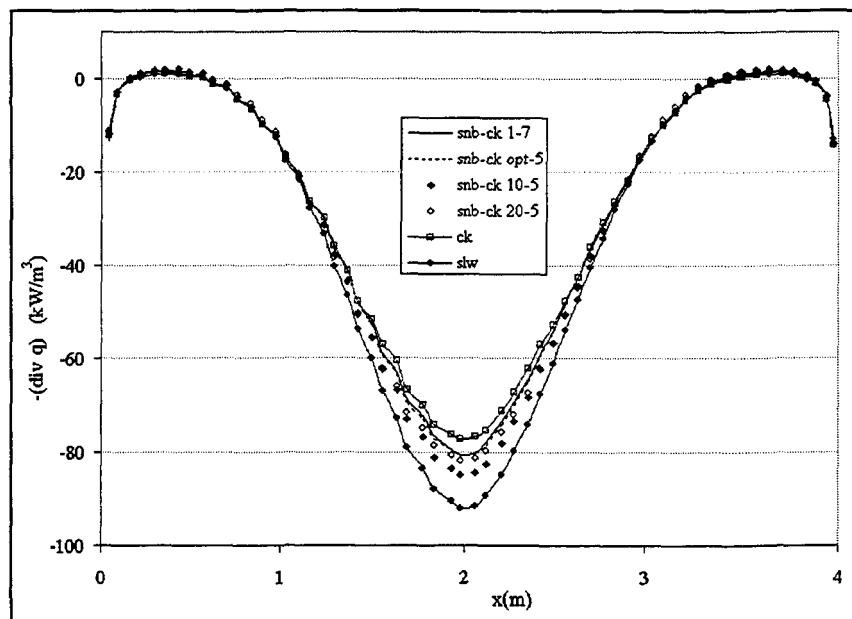


Figure 4.13: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO₂.

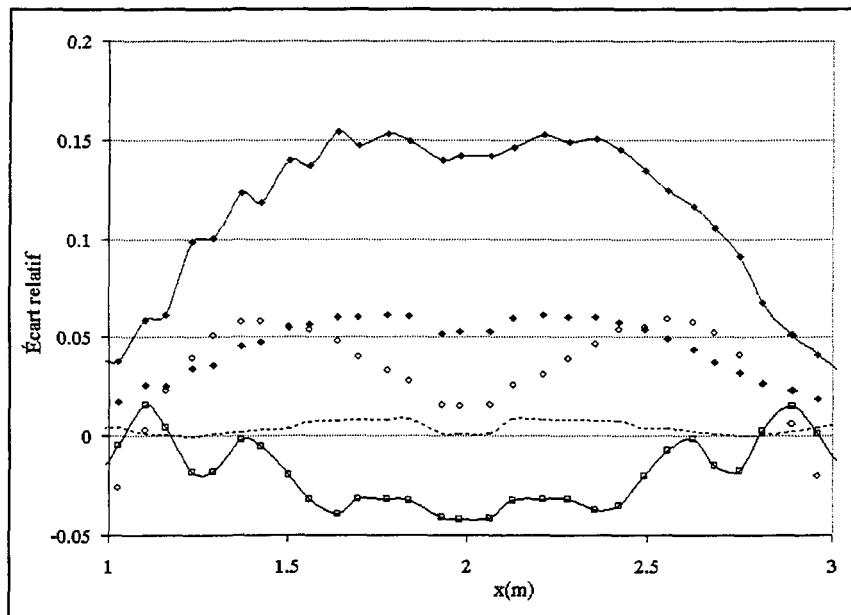


Figure 4.14: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO₂.

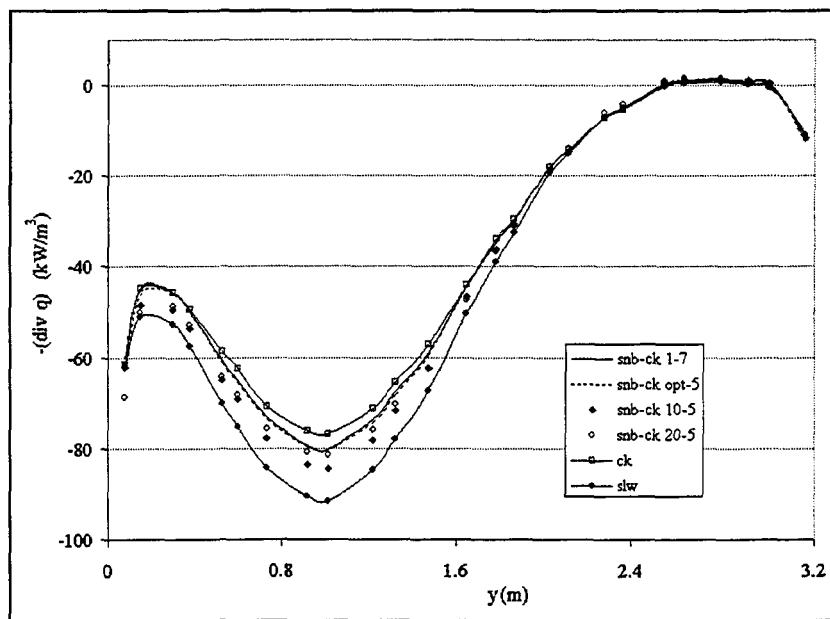


Figure 4.15: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO₂.

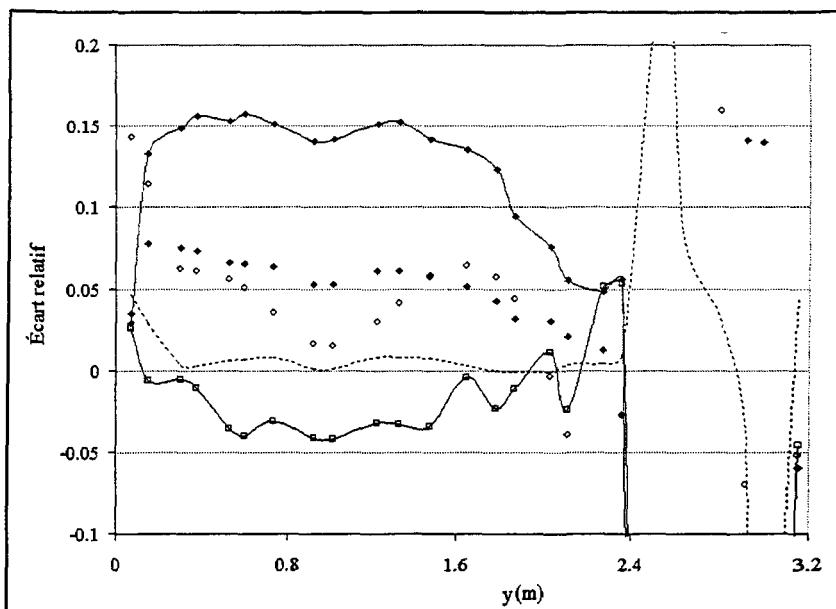


Figure 4.16: Evolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du CO₂.

b. Comparaison avec H₂O

Comme pour les cas monodimensionnels, les trois variantes de la méthode SNB-CK et la méthode CK fournissent des résultats similaires entre eux et vis à vis de la méthode de référence SNB-CK 1 (Figures 4.17, 4.19, 4.21). Autant pour la divergence du flux que pour le flux pariétal, les écarts sont au maximum de 2%, et sont pour les méthodes SNB-CK OPT et SNB-CK 10 de l'ordre de 0% (Figures 4.18, 4.20, 4.22). Ces écarts maximums variaient pour les cas monodimensionnels, pour des températures et des fractions molaires assez semblables (Cf. a), entre 1 et 4% pour le flux pariétal (Planches 20a - 22a - 24a) et entre 1 et 2% pour la divergence du flux au niveau du centre de la plaque (Planches 28 - 32 - 36). Pour la méthode SLW, les résultats 2D coïncident aussi avec les résultats 1D. La méthode n'étant précise avec la vapeur d'eau que pour les faibles températures, d'importants écarts sont constatés entre ses résultats et ceux de référence: elle sous-estime ainsi les flux

de 15% et la divergence du flux de 15 à 20% (Planches 20, 22, 24, 28, 32, 39 et Figures 4.18, 4.20, 4.22).

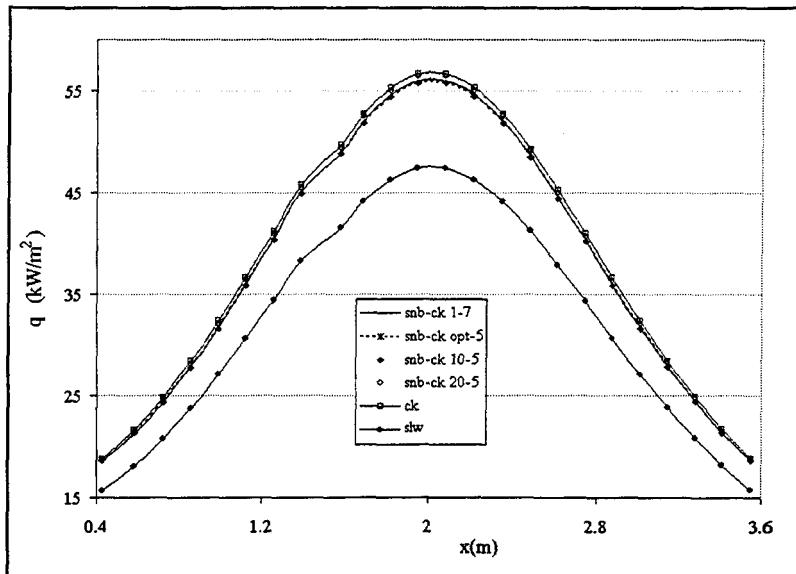


Figure 4.17: Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O.

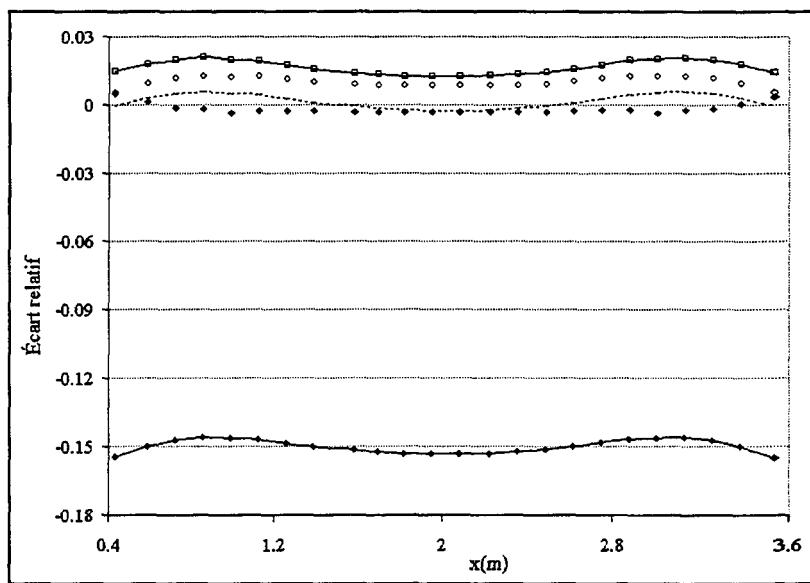


Figure 4.18: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O.

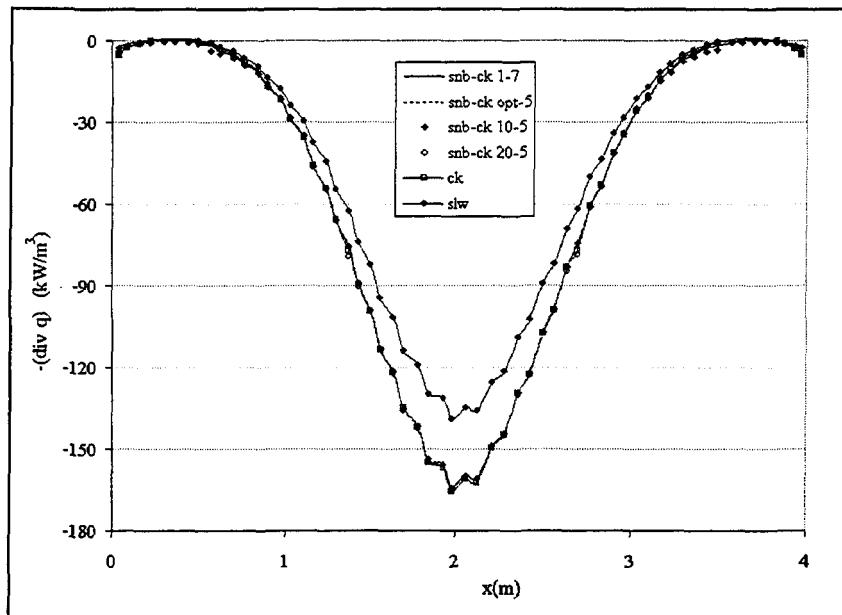


Figure 4.19: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O.

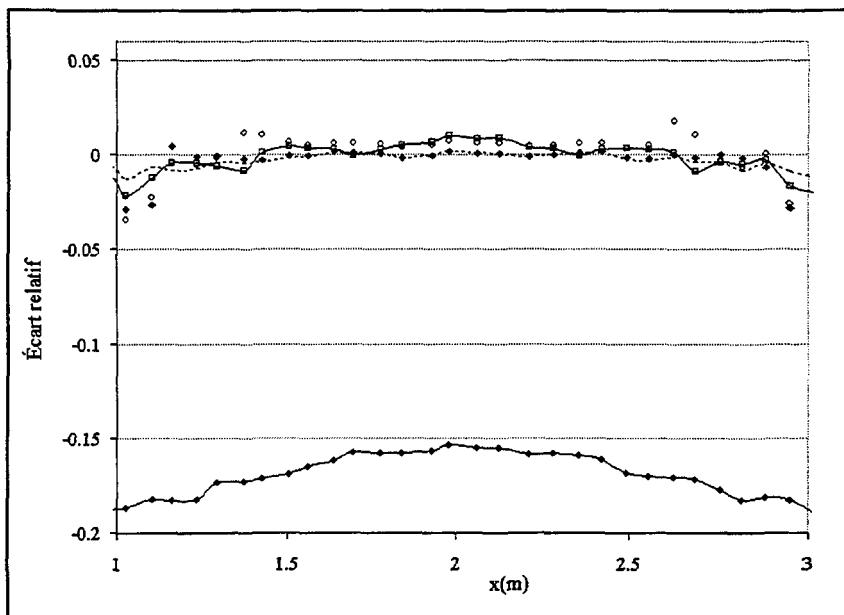


Figure 4.20: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O.

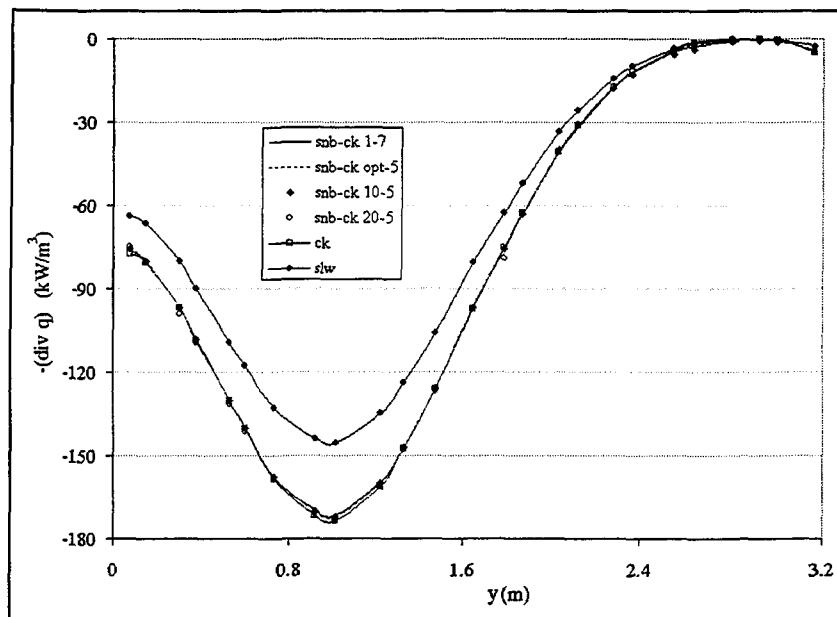


Figure 4.21: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O.

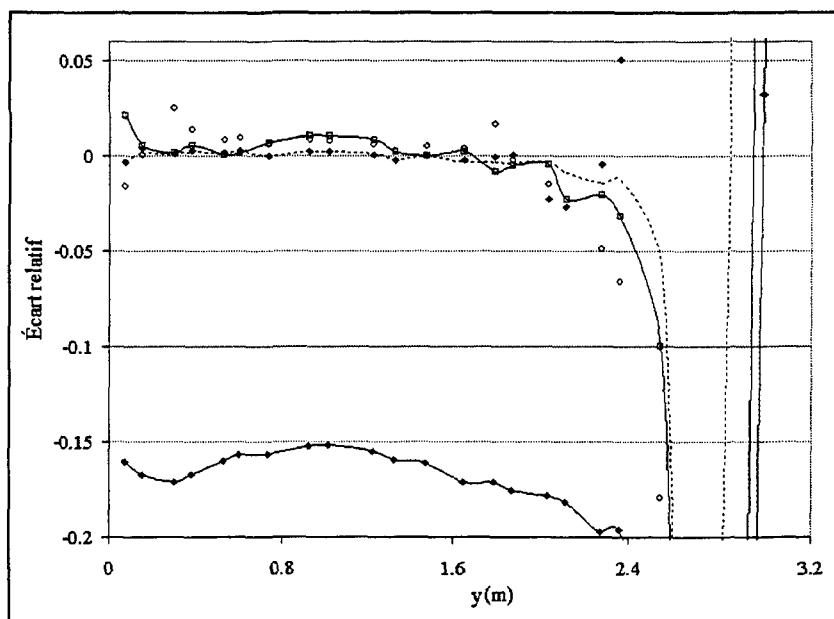


Figure 4.22: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant du H₂O.

c. Comparaison avec le mélange CO₂ + H₂O

Comme pour les cas précédents, pour lesquels les gaz ont été considérés séparément, les résultats 2D corroborent bien les résultats 1D pour de grandes distances et des températures intermédiaires (Planches 38a, 40a, 42a, 46, 50 et 54). Ainsi, la méthode CK et les méthodes hybrides fournissent pour les deux cas (isotherme et anisotherme) des résultats de bonne précision; les écarts ne sont souvent que de l'ordre de 2% et n'excèdent pas 4%. Les écarts sont par ailleurs légèrement plus importants pour les deux méthodes hybrides utilisant des regroupements uniformes (Figures 24, 26, 28, 30, 32, 34). La précision des résultats obtenus avec la méthode SLW dépend, quant à elle, du cas étudié. Ainsi, les résultats sont relativement bons pour le cas anisotherme hétérogène (Figures 23 à 28); les écarts ne sont que de 4% pour le flux pariétal et restent le plus souvent inférieurs à 10% pour la divergence du flux. Tandis que pour le cas isotherme et hétérogène (Figures 29 à 34), une nette dégradation des résultats peut être observée et les écarts atteignent des valeurs maximales beaucoup plus conséquentes; les écarts atteignent ainsi 14% pour le calcul du flux pariétal (Figure 4.30) et 24% pour la divergence du flux (Figure 4.34). L'explication des bons résultats pour le cas anisotherme semble provenir du fait que pour ce cas particulier les erreurs obtenues avec le CO₂ (sur-estimation) et avec le H₂O (sous-estimation) se compensent (Figures 4.12, 4.14, 4.16, 4.18, 4.20, 4.22). En 1D, le caractère plus aléatoire de cette méthode sur la qualité des résultats avait déjà pu être observé (Planches 41, 42).

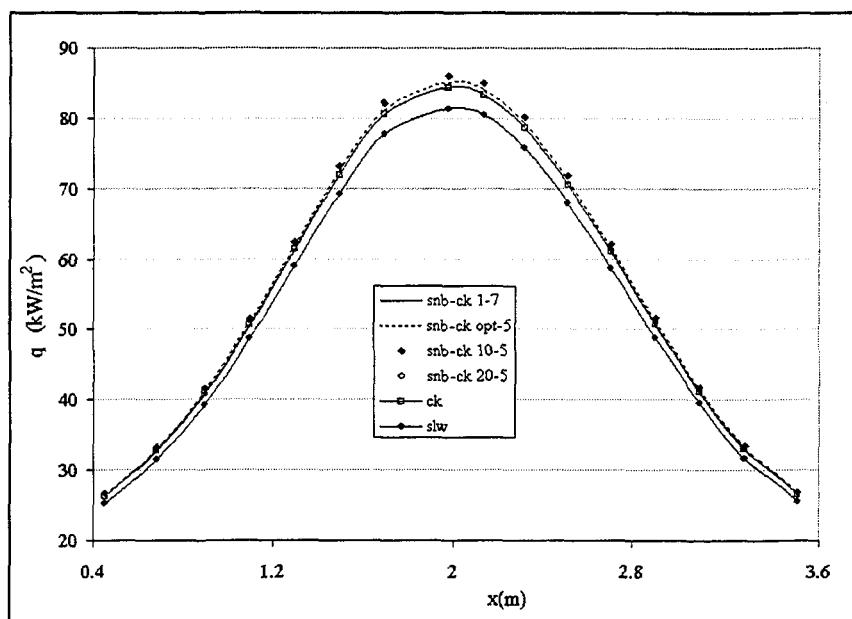


Figure 4.23: Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

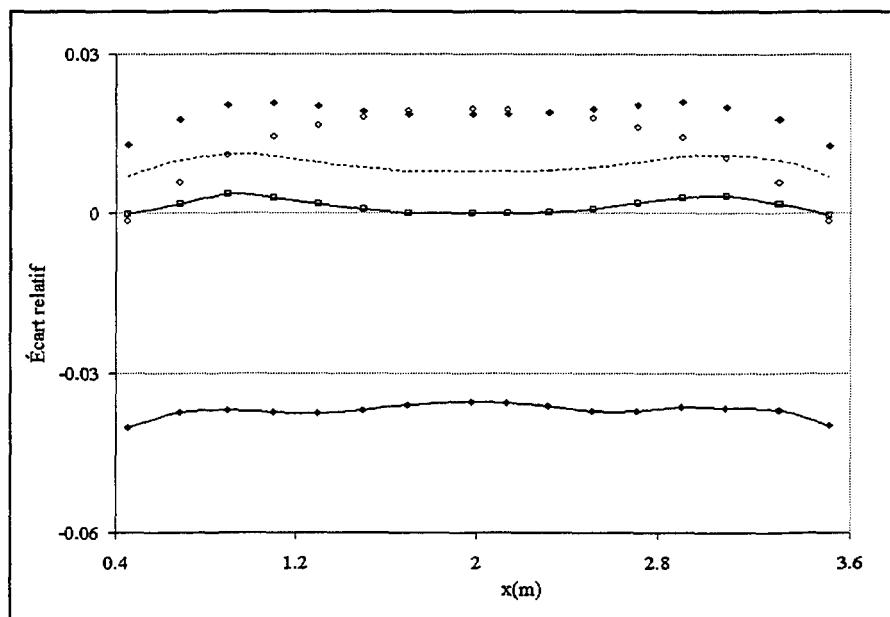


Figure 4.24: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

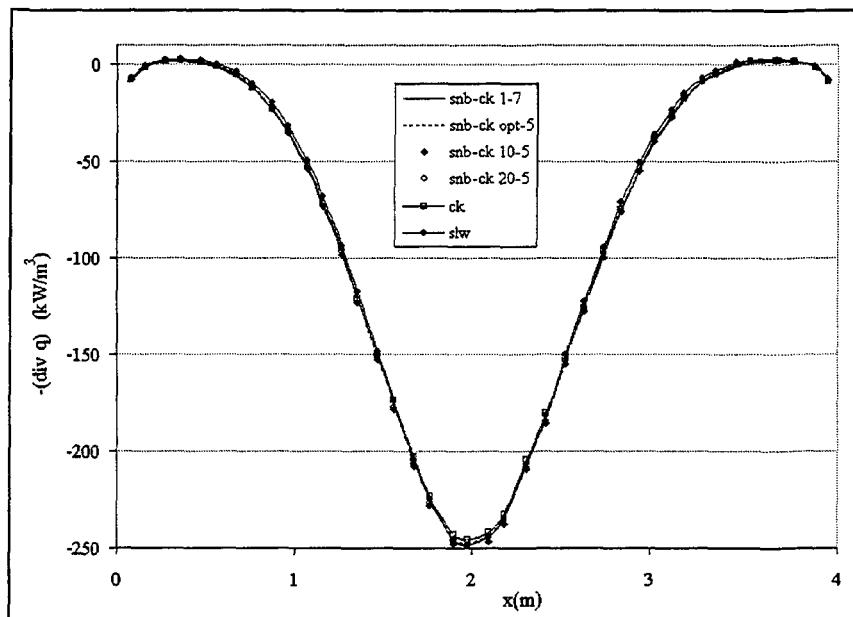


Figure 4.25: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

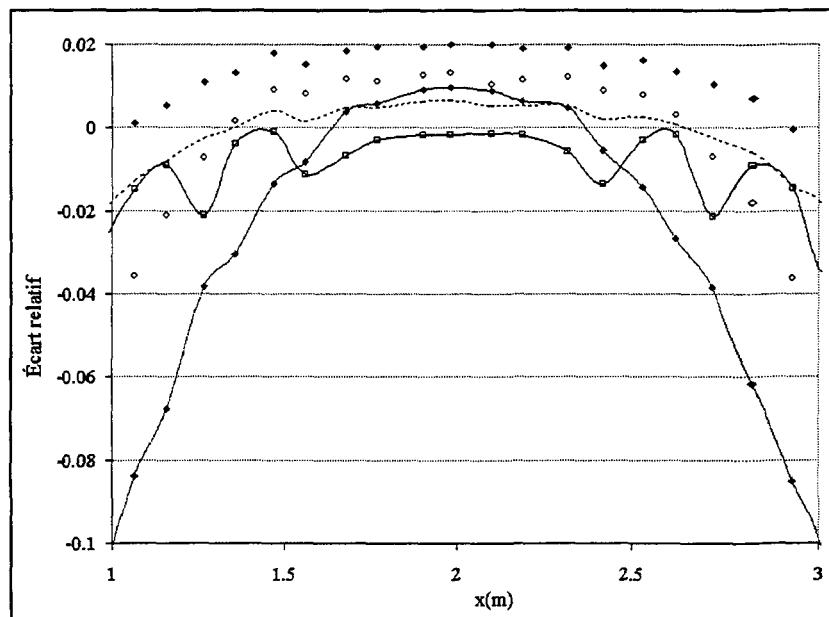


Figure 4.26: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux sur le mur 1 pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

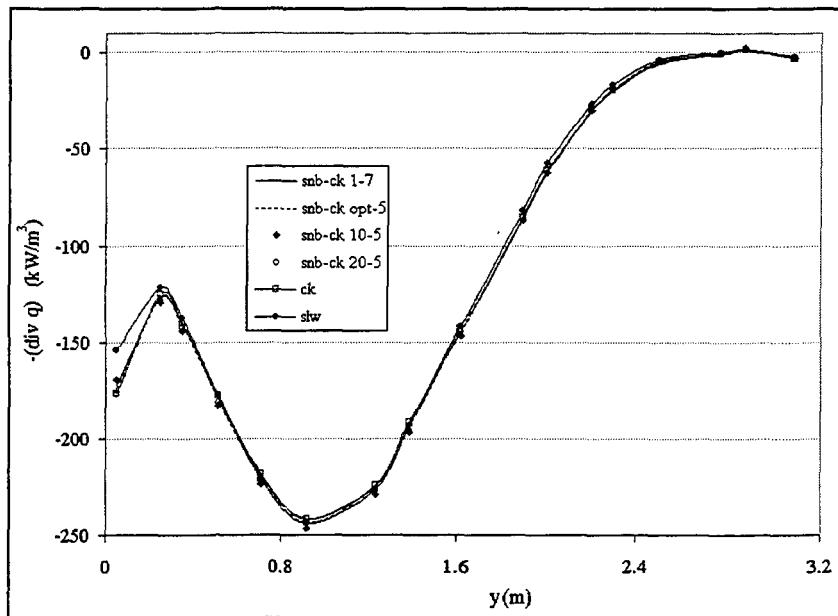


Figure 4.27: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

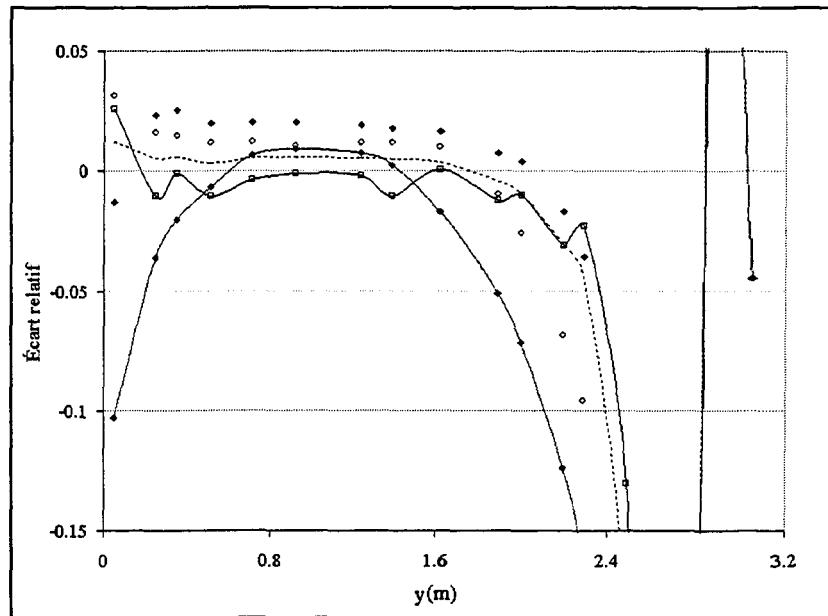


Figure 4.28: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène non isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

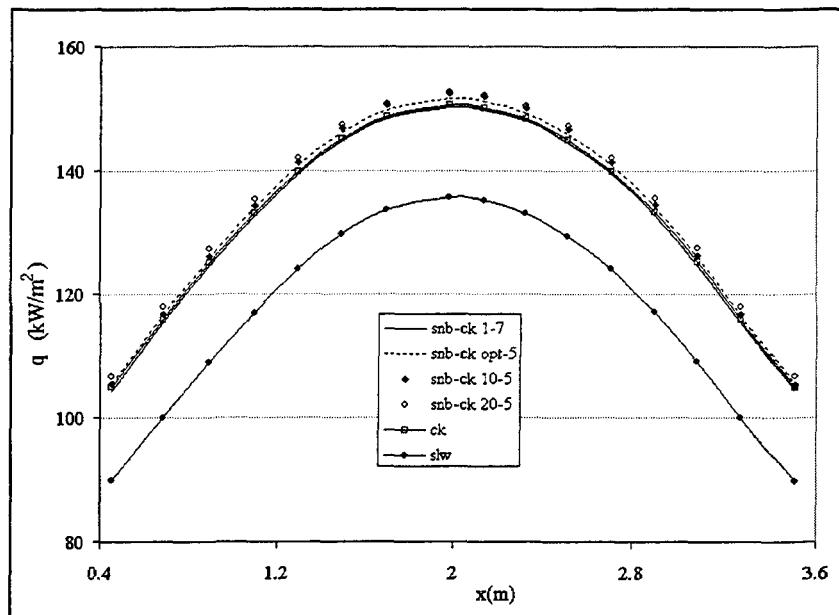


Figure 4.29: Évolution du flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

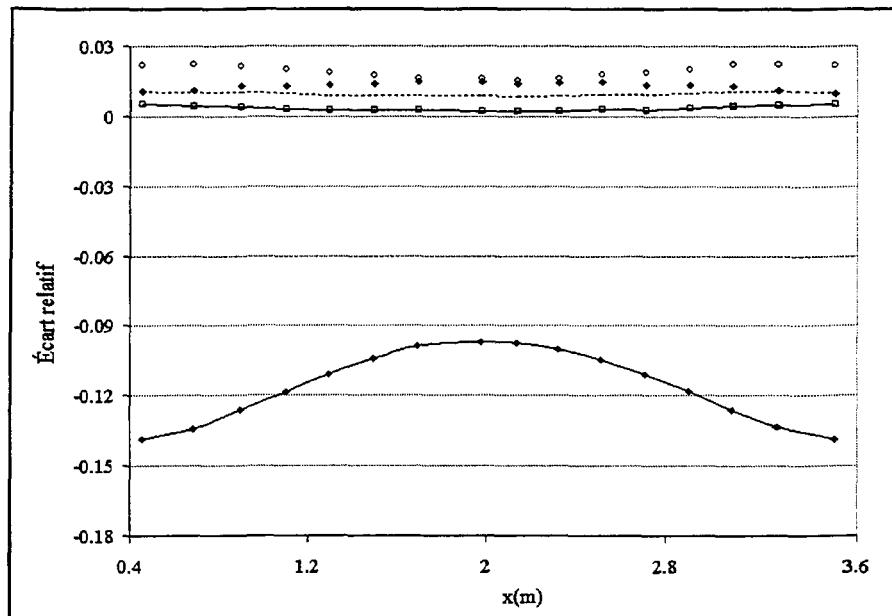


Figure 4.30: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour le flux pariétal sur le mur 1 pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

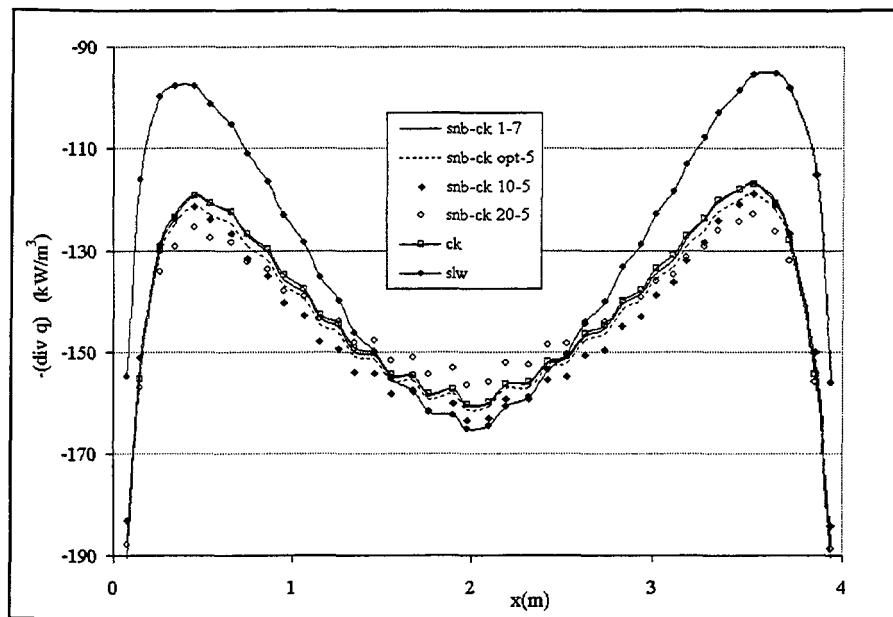


Figure 4.31: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

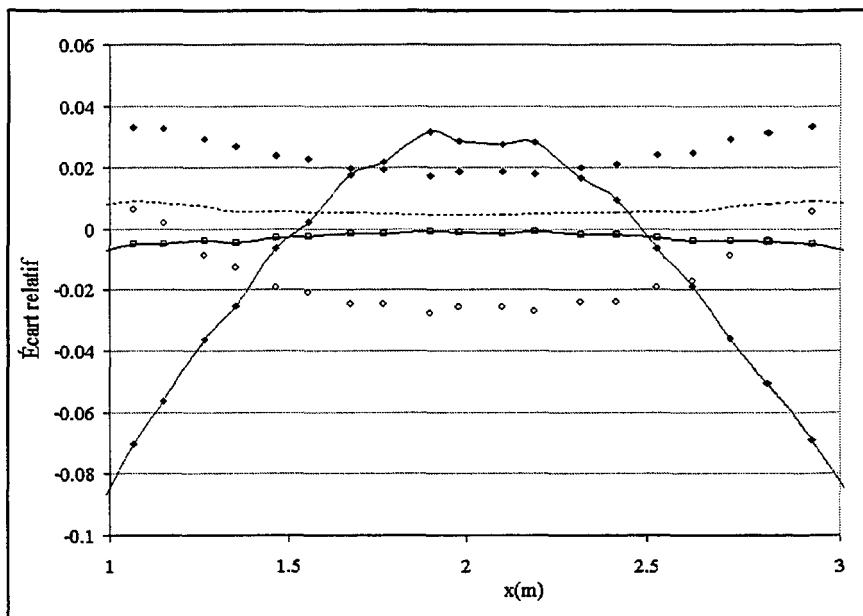


Figure 4.32: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés avec la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux suivant l'axe horizontal pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

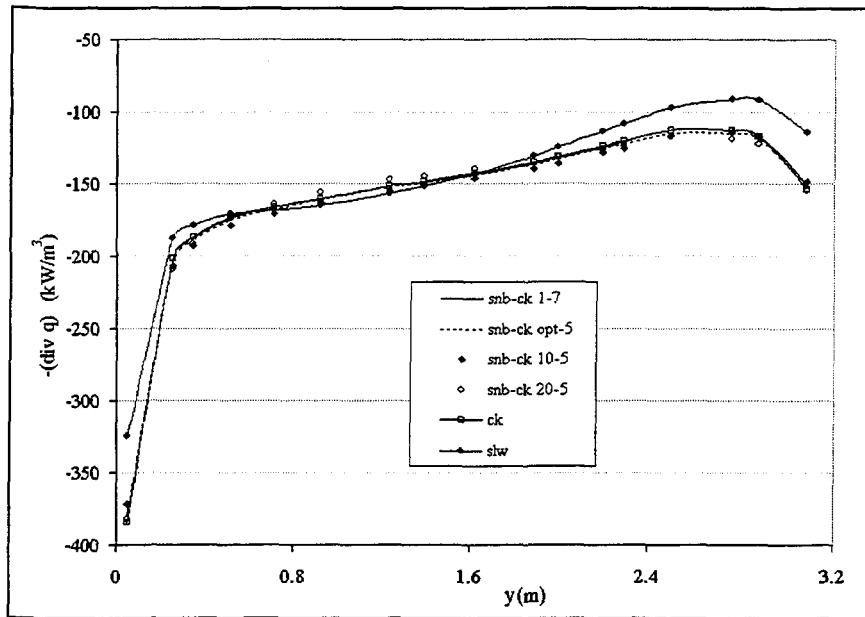


Figure 4.33: Évolution de la divergence du flux suivant l'axe vertical pour le milieu non homogène isotherme contenant le mélange de CO_2 et de H_2O .

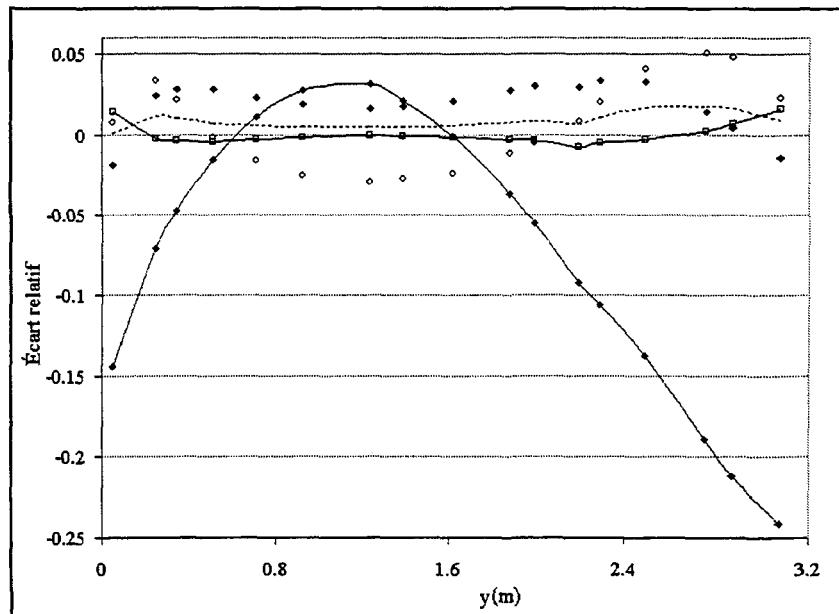


Figure 4.34: Évolution des écarts relatifs entre les résultats trouvés la méthode SNB-CK 1 et ceux trouvés avec les autres méthodes pour la divergence du flux sur le mur 1 pour le milieu non homogène isotherme le mélange de CO_2 et de H_2O .

4.3.1.2 Influence de l'émissivité des parois sur la précision des résultats

Afin d'étudier l'influence de l'émissivité des murs, trois valeurs de l'émissivité sont considérées, deux correspondant à des cas de parois grises de 0,5 et 0,7 et une troisième correspondant au cas de parois noires. Une valeur de 0,5 correspond par exemple à l'ordre de grandeur de l'émissivité d'une surface d'aluminium liquide en fusion dans un four, et celle de 1 à l'émissivité des réfractaires ($\varepsilon \sim 0,95$).

Le fait de diminuer l'émissivité des parois augmente les réflexions du rayonnement provenant du milieu gazeux, plus chaud. Ceci a comme incidence de réduire les pertes de chaleur au niveau des parois et de conserver plus d'énergie au sein du milieu; les flux pariétaux et la divergence du flux doivent être ainsi moins importants en présence de parois grises ayant une émissivité de 0,5 qu'en présence de parois noires. Ce phénomène peut être effectivement observé en comparant, par exemple, d'une part les figures 4.11 et 4.35a, et d'autre part les figures 4.13 et 4.36a.

Par ailleurs, en observant l'évolution de la précision des écarts relatifs en fonction de l'émissivité, il peut être noté que, pour les méthodes SNB-CK OPT, SNB-CK 10 et CK, les écarts relatifs restent constants au centre de l'enceinte. Des variations plus importantes des écarts relatifs pour la divergence du flux peuvent être observées pour des abscisses de l'ordre de 1m ou de 3m, mais ces variations sont en fait une conséquence des très faibles valeurs de la divergence du flux et ne correspondent pas à des écarts réels conséquents. Les méthodes SNB-CK 20 et SLW sont quant à elles un peu plus sensibles aux variations de la valeur de l'émissivité. Les variations les plus importantes ont lieu avec le CO₂, les valeurs des écarts relatifs au centre de l'enceinte varient ainsi pour ces deux méthodes de 2 à 3%

alors qu'elles restaient inchangées pour les trois autres méthodes. Cependant, comme lors des comparaisons sur la précision des méthodes, une amélioration des résultats apparaît en présence de H₂O; la méthode SNB-CK 20 fournit ainsi pour les deux autres cas des résultats similaires aux autres méthodes hybrides, et la méthode SLW ne présente que de légères variations en présence d'un mélange.

4.3.1.3 Conclusion

Les résultats bidimensionnels corroborent assez fidèlement les résultats monodimensionnels trouvés précédemment et ce quelles que soient la nature du gaz et la modélisation de gaz réel considérées. En outre, aucune réelle influence de la valeur de l'émissivité n'a pu être observée pour les méthodes SNB-CK OPT, SNB-CK 10 et CK, seules la méthode SNB-CK 20 (lorsque le gaz est du CO₂) et la méthode SLW semblent plus sensibles.

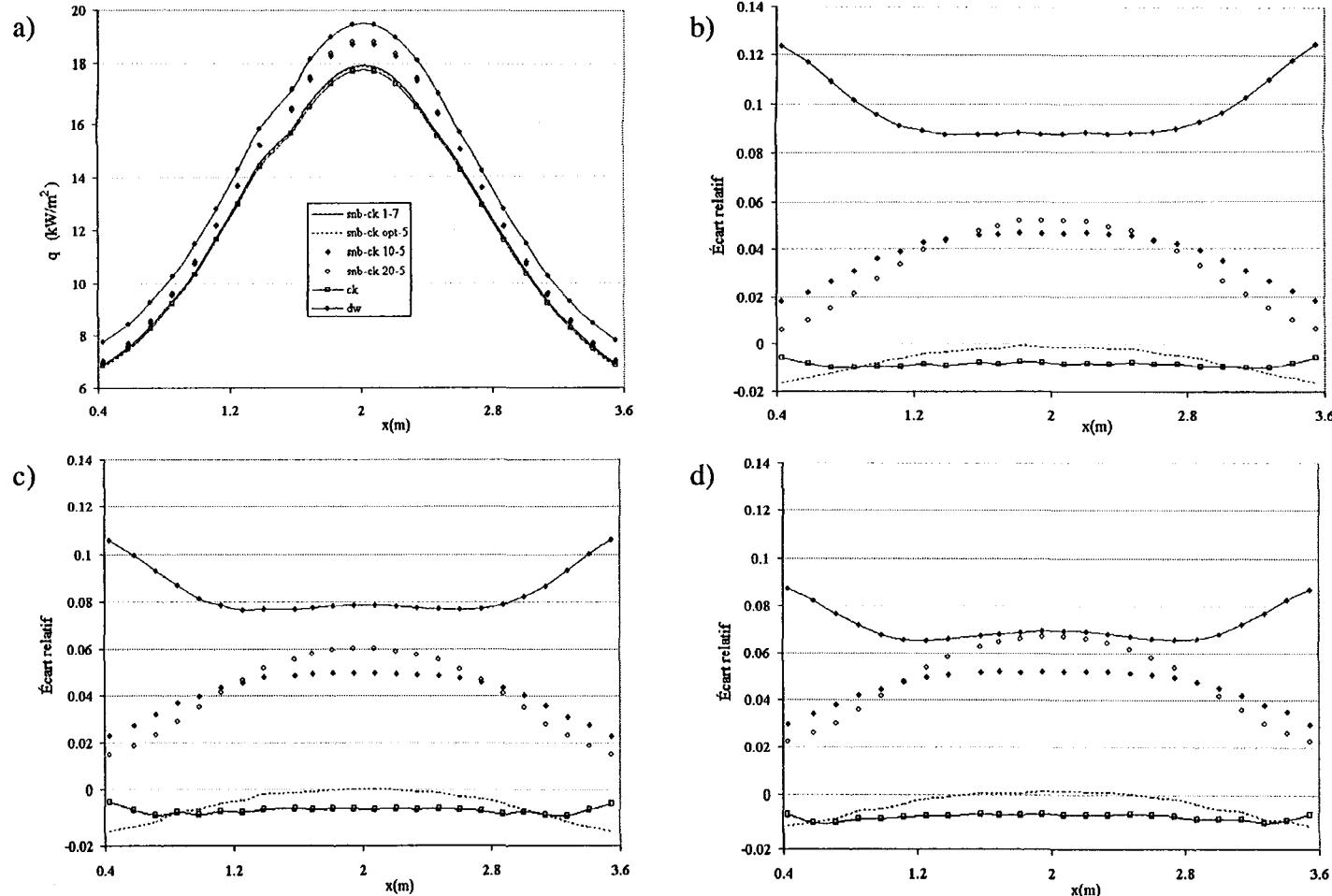


Figure 4.35: a) Évolution du flux pariétal avec le CO_2 et pour une émissivité $\epsilon=0.5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0.5$, $\epsilon=0.7$ et $\epsilon=1$.

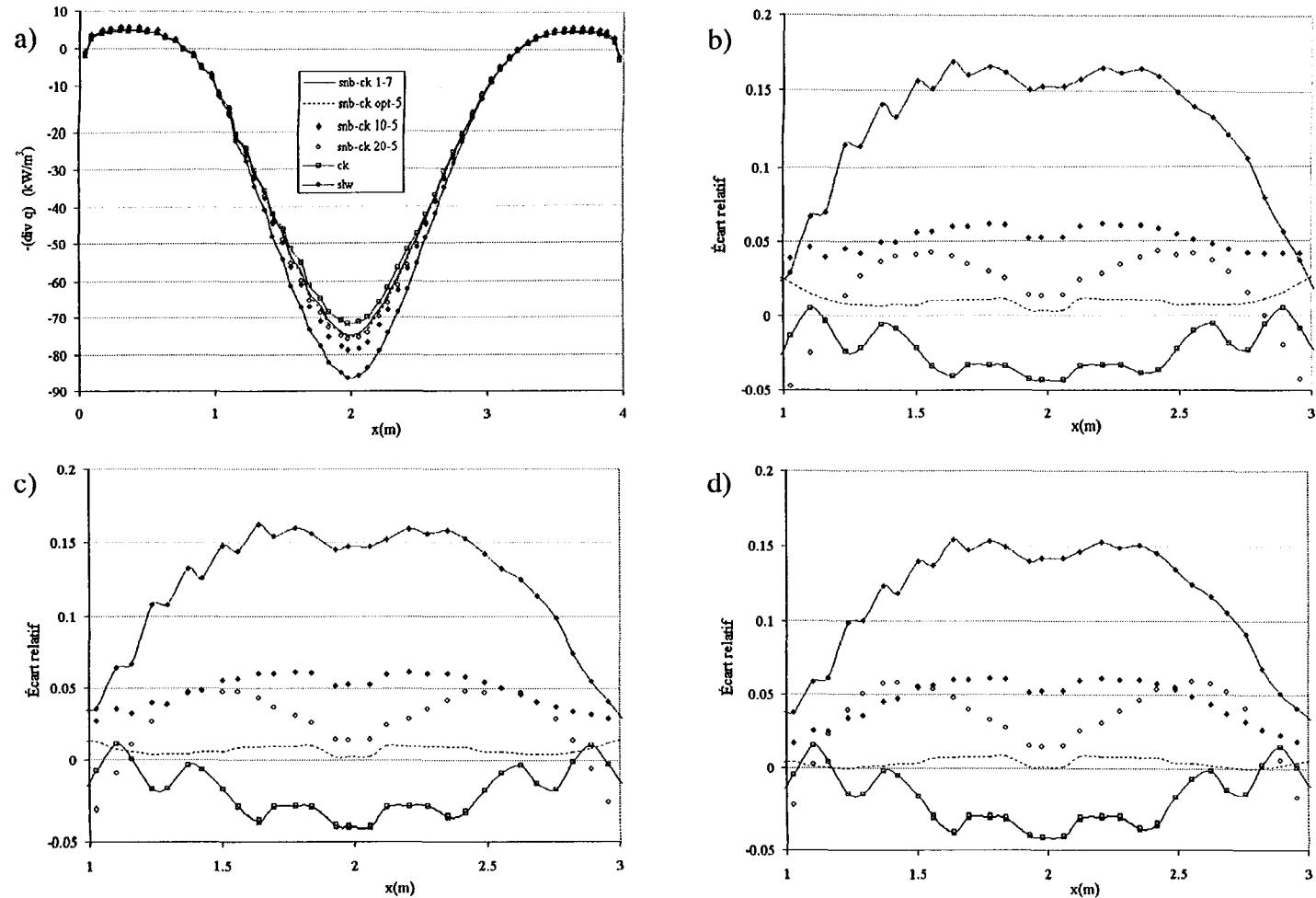


Figure 4.36: a) Évolution de la divergence du flux avec le CO₂ et pour une émissivité $\epsilon=0.5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0.5$, $\epsilon=0.7$ et $\epsilon=1$.

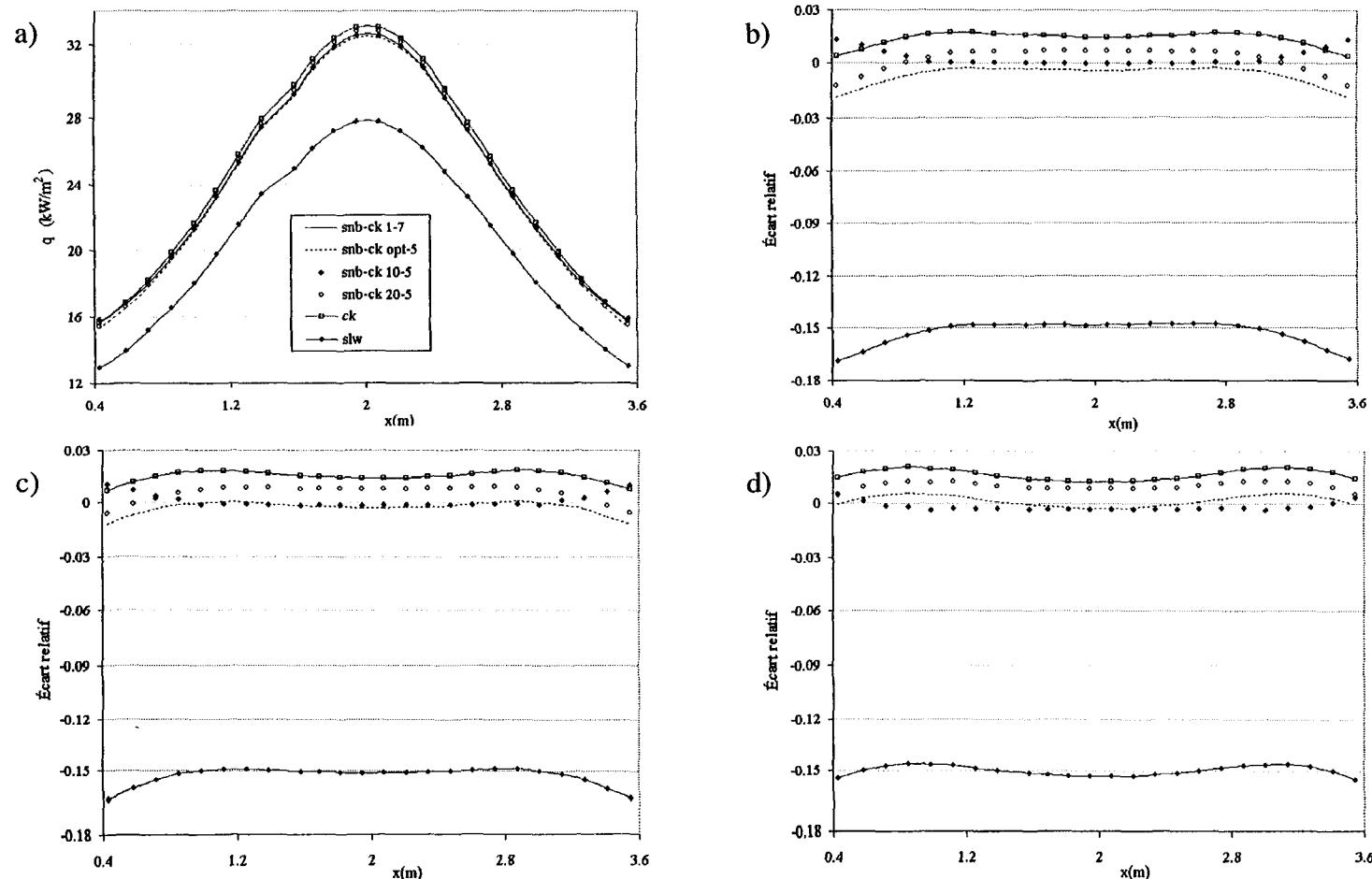


Figure 4.37: a) Évolution du flux pariétal avec le H_2O et pour une émissivité $\epsilon=0.5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0.5$, $\epsilon=0.7$ et $\epsilon=1$.

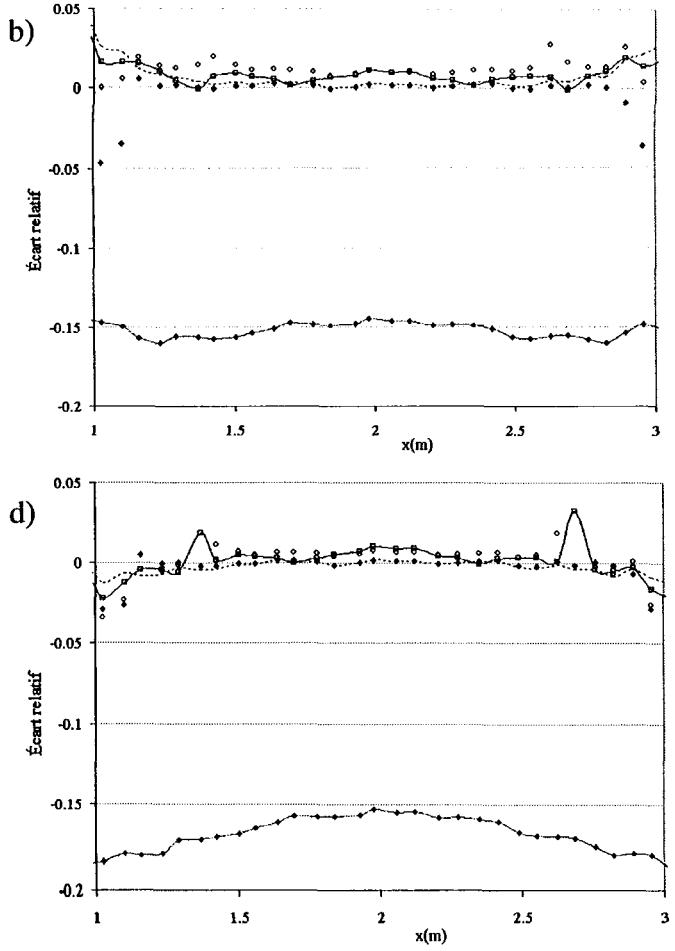
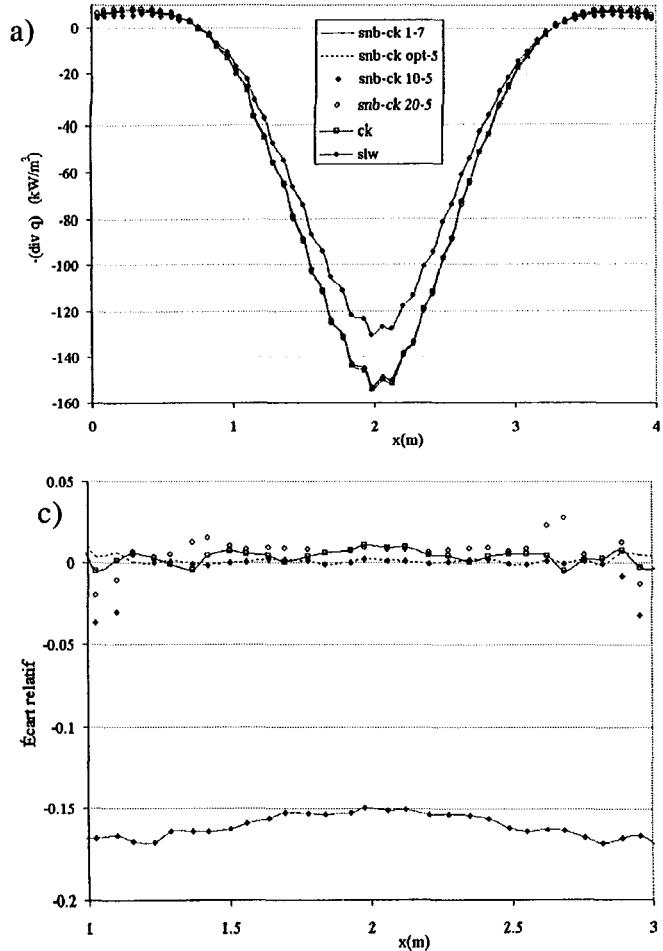


Figure 4.38: a) Évolution de la divergence du flux avec le H_2O et pour une émissivité $\epsilon=0.5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0.5$, $\epsilon=0.7$ et $\epsilon=1$.

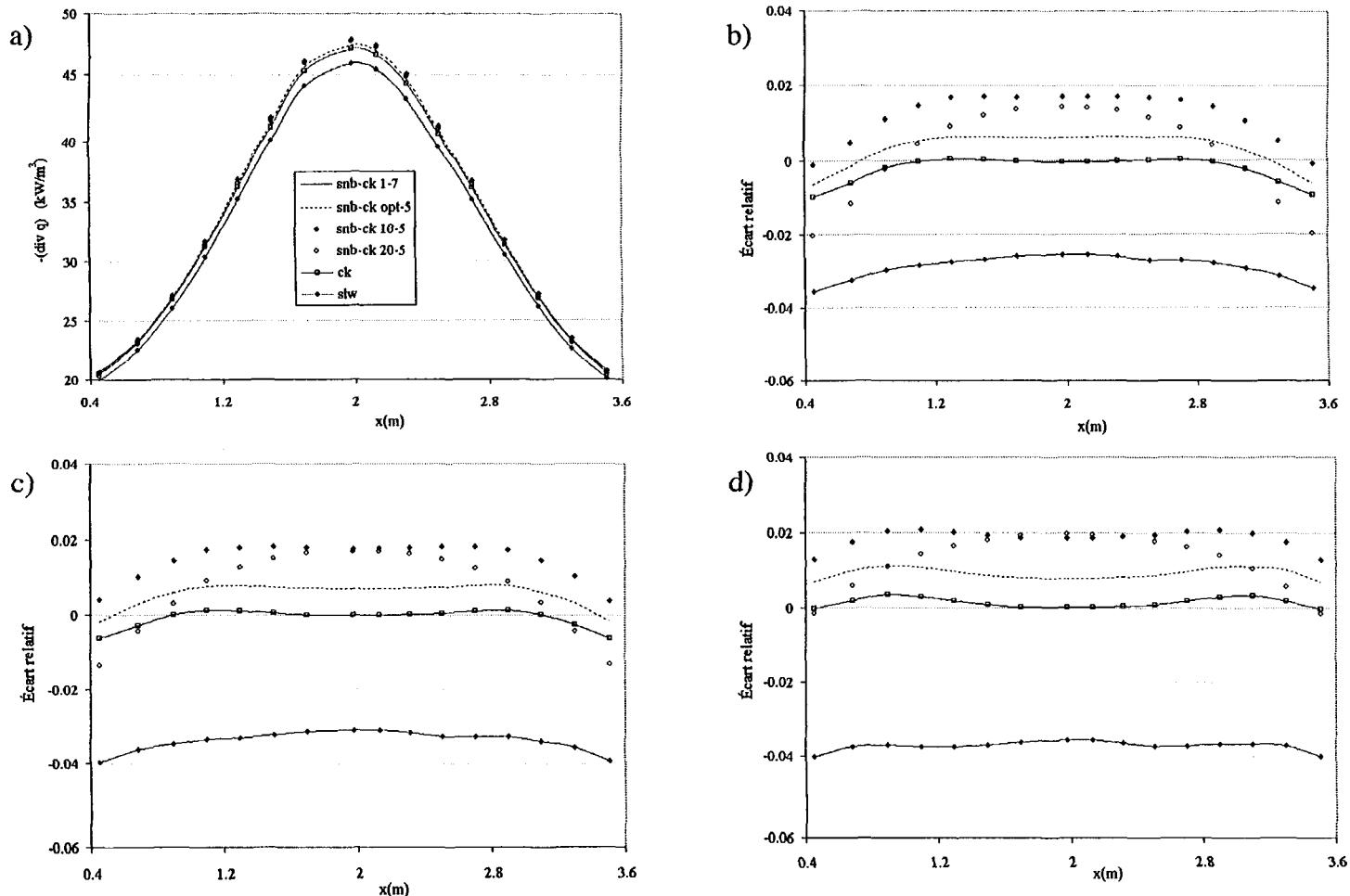


Figure 4.39: a) Évolution du flux pariétal avec le mélange et pour une émissivité $\epsilon=0.5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0.5$, $\epsilon=0.7$ et $\epsilon=1$.

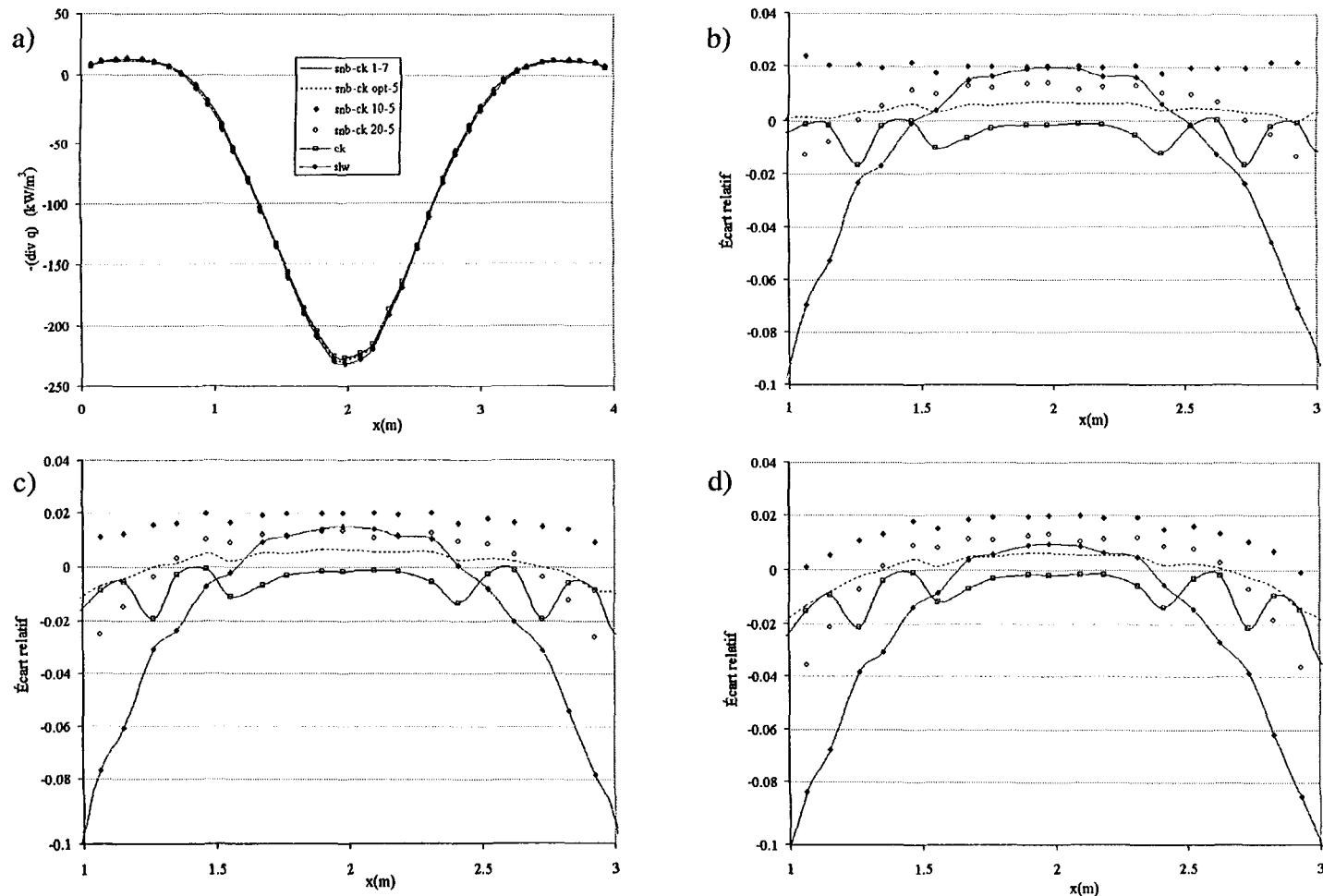


Figure 4.40: a) Évolution de la divergence du flux avec le mélange et pour une émissivité $\epsilon=0.5$. b) c) d) Évolution des écarts relatifs entre la méthode SNB-CK 1 et les autres méthodes avec respectivement $\epsilon=0.5$, $\epsilon=0.7$ et $\epsilon=1$.

4.3.2 Comparaison des temps de calculs

Deux séries de comparaisons pour les temps de calculs sont effectuées, d'une part en considérant les murs de l'enceinte comme des parois noires, d'autre part en faisant varier l'émissivité de 1 à 0,5. Pour la première série de tests, deux types de distribution de température et de fraction molaire sont considérés pour le CO₂ ou H₂O, ces cas sont décrits au tableau 4.1; pour le mélange, une seule distribution sera conservée, celle non-homogène non-isotherme.

Tableau 4.1: Cas considérés pour les comparaisons de temps de calcul.

Cas	Gaz	Température	Concentration
1	CO ₂	Isotherme (1 500 K)	Homogène (10%)
2	CO ₂	Non-isotherme (Eq. 4.3)	Non-homogène (Eq. 4.5)
3	H ₂ O	Isotherme (1 500 K)	Homogène (20%)
4	H ₂ O	Non-isotherme (Eq. 4.3)	Non-homogène (Eq. 4.5)
5	H ₂ O+CO ₂	Non-isotherme (Eq. 4.3)	Non-homogène (Eq. 4.5)

Les maillages utilisés sont d'une part le maillage à 1226 cellules pour les cas 1 à 4 (gaz unique) et d'autre part le maillage simplifié à 552 cellules pour le cas du mélange. Tous ces calculs ont été réalisés sur une station SUN ULTRA 1 de 170 MHz. Pour l'analyse de l'influence de l'émissivité aux parois sur le temps de calcul, seuls les cas 2 et 4 seront conservés.

4.3.2.1 Comparaison des temps de calculs pour une enceinte à parois noires

Les résultats trouvés pour les cinq cas décrits au tableau 4.1 sont explicités dans le tableau ci-dessous. Pour chaque cas, ce tableau fournit le temps de calcul qui a été nécessaire (en

secondes) ainsi que le rapport $\left(\frac{T_{SNB-CK\ 1}}{T} \right)$ entre le temps de calcul T de la méthode de

référence SNB-CK 1 et celui de la méthode utilisée; ce rapport correspond au facteur de réduction du temps de calcul de chacune des méthodes.

Tableau 4.2: Temps de calcul (en seconde) et facteurs de réduction obtenus pour les cinq cas avec les différentes méthodes. Une cellule grisée indique que pour le cas considéré, la méthode correspondante n'est pas applicable.

	CO ₂				H ₂ O				Mélange	
	Cas 1		Cas 2		Cas 3		Cas 4		Cas 5	
	T	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$	T	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$	T	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$	T	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$	T	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$
SNB-CK 1	40029	1	37104	1	41758	1	45771	1	118900	1
CK	2390	16.8	2325	16.0	4643	9.0	4547	10.1	10441	11.4
SNB-CK 10	2951	13.6	2732	13.6	3450	12.1	3206	14.3	5722	20.8
SNB-CK 20	1532	26.1	1424	26.1	1893	22.1	1736	26.4	3036	39.2
SNB-CK OPT	1182	33.9	1169	31.7	2019	20.7	1888	24.2	2475	48.0
SLW	206	195	276	134.4	222	188.1	375	122.0	1583	75.1
SPGG	66	606.5			67	623.3				

À la vue de ce tableau, deux méthodes permettent de diminuer de manière très conséquente les temps de calcul; la méthode SPGG est ainsi en moyenne 615 fois plus rapide que la méthode SNB-CK 1, et la méthode SLW 160 fois pour un gaz unique et 75 fois pour un mélange. Le comportement de la méthode SLW diffère par ailleurs légèrement de celui des autres méthodes: pour un même gaz, le facteur de réduction est toujours plus important pour le cas isotherme homogène que pour le cas anisotherme hétérogène. Cette variation s'explique par le fait que lorsqu'il existe une inhomogénéité en fraction molaire ou en température dans l'enceinte de nombreux termes correctifs supplémentaires doivent être calculés en utilisant une méthode itérative de Newton-Raphson.

Les méthodes SNB-CK OPT et SNB-CK 20 bien que moins rapides, permettent elles aussi un important gain du temps de calcul; leur facteur de réduction varie pour ces cinq études entre 20 et 48. Selon le cas envisagé, la méthode SNB-CK OPT peut être soit plus rapide soit plus lente que la méthode SNB-CK 20. Ce comportement peut paraître aléatoire mais s'explique en fait en analysant le nombre de résolutions de l'équation de transfert qui doit être effectué pour chaque cas avec chacune des deux méthodes. Avec le CO₂ ou le mélange (Cf. Tableaux 3.3, 3.5 et 4.3), la méthode SNB-CK OPT doit résoudre moins de fois l'ETR que la méthode SNB-CK 20, 73 au lieu de 95 pour le CO₂ et 365 au lieu de 475 pour le mélange, et elle est pour ces natures de gaz 1.25 fois plus rapide que la méthode SNB-CK 20 (Tableau 4.2). Avec H₂O comme gaz unique, le phénomène s'inverse, la méthode SNB-CK 20 ayant moins de résolutions à effectuer, 95 au lieu de 105, devient plus rapide. Le phénomène est tout à fait similaire entre les méthodes CK et SNB-CK 10; le facteur de réduction pour ces deux méthodes ne varie par ailleurs qu'entre 9.0 et 20.8.

La correspondance entre le temps de calcul et le nombre de résolutions de l'ETR à effectuer est aussi décelable en observant la constance des facteurs de réductions trouvés avec les méthodes SNB-CK 10 et SNB-CK 20 pour les cas de gaz unique, ou avec les méthodes CK et SNB-CK OPT pour chaque gaz considéré séparément. Ainsi, avec la méthode SNB-CK 20, les facteurs de réduction avec un gaz unique restent assez similaires et valent 22.1, 26.1, 26.1 et 26.4. Afin d'illustrer cette correspondance, le facteur de réduction moyen du temps de calcul $\left(\frac{T_{SNB-CK1}}{T} \right)$ et le facteur de réduction du nombre de résolutions $\left(\frac{N_{SNB-CK1}}{N} \right)$ sont explicités au tableau 4.3 et une très bonne correspondance des résultats peut être observée.

Tableau 4.3: Comparaison entre les facteurs de réduction du temps de calculs (moyenne) et du nombre de résolutions à effectuer

	CO ₂			H ₂ O			Mélange		
	Nb ETR	$\frac{N_{snb-ck1}}{N}$	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$	Nb ETR	$\frac{N_{snb-ck1}}{N}$	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$	Nb ETR	$\frac{N_{snb-ck1}}{N}$	$\frac{T_{snb-ck1}}{T}$
SNB-CK 1-7	2555	1	1	2555	1	1	1788 5	1	1
CK	154	16.6	16.4	322	7.9	9.6	2205	8.1	11.4
SNB-CK 10-5	185	13.8	13.6	185	13.8	13.2	925	19.3	20.8
SNB-CK 20-5	95	26.7	26.1	95	26.9	24.2	475	37.5	39.2
SNB-CK OPT-5	73	35	32.8	105	24.3	22.5	365	49	48.0
SLW	15	170.3	164.7	15	170.3	155.1	225	79.5	75.1
SPGG	4	638.8	606.5	4	638.8	623.3	4	4471.2	

Pour la méthode SLW, il est par ailleurs possible de réduire le temps de calcul en réduisant le nombre de sections d'absorption considérés (Cf. § 2.3.2.2.3), soit logarithmiquement espacées, soit optimisées.

4.3.2.2 Influence de l'émissivité des parois sur le temps de calcul

Afin de connaître l'influence de l'émissivité aux parois sur le temps de calcul, les deux cas de gaz unique utilisés pour les comparaisons en précision sont repris: les champs de températures et de fractions molaires sont anisothermes (Eq. 4.3) et hétérogènes (Eq. 4.5), et les valeurs des émissivités, identiques pour toutes les parois, varient entre 0,5 et 1. Les temps de calcul obtenus pour chacun des cas sont présentés aux tableaux 4.4 et 4.5.

Tableau 4.4: Influence de l'émissivité des parois sur le temps de calcul (en secondes) pour le dioxyde de carbone.

	SNB-CK 1	CK	SNB-CK 20	SNB-CK 10	SNB-CK OPT	SLW
$\varepsilon=1$	37 104	2 325	1 424	2 732	1 169	275
$\varepsilon=0.9$	66 223	3 705	2 500	4 851	1 870	439
$\varepsilon=0.8$	75 384	4 111	2 806	5 457	2 100	490
$\varepsilon=0.7$	82 658	4 580	3 088	6 030	2 278	549
$\varepsilon=0.6$	92 846	5 000	3 444	6 669	2 500	615
$\varepsilon=0.5$	106 107	5 610	3 928	7 636	2 786	694

Tableau 4.5: Influence de l'émissivité des parois sur le temps de calcul (en secondes) pour la vapeur d'eau.

	SNB-CK 1	CK	SNB-CK 20	SNB-CK 10	SNB-CK OPT	SLW
$\epsilon=1$	45 771	4 547	1 736	3 009	1 888	375
$\epsilon=0.9$	70 397	7 533	2 969	5 357	3 062	534
$\epsilon=0.8$	94 812	8 356	3 282	5 996	3 353	606
$\epsilon=0.7$	103 225	9 131	3 582	6 521	3 669	677
$\epsilon=0.6$	113 913	9 974	3 924	7 177	4 017	750
$\epsilon=0.5$	129 470	11 135	4 384	8 075	4 465	841

Pour les deux gaz, une nette augmentation du temps de calcul est observable lors du passage d'une paroi noire à une paroi grise; les codes numériques, devant tenir compte des réflexions au niveau des parois, convergent beaucoup plus lentement. Une discontinuité apparaît ainsi lors du passage d'une émissivité de 1 à 0,9; le temps de calcul est multiplié par un facteur variant de 1,43 à 1,78 pour cette variation de l'émissivité. Par la suite, l'augmentation du temps de calcul est assez linéaire en fonction de la valeur de l'émissivité. Les figures 4.41 et 4.42 montrent, pour chaque méthode, les évolutions des rapports $\frac{T_\epsilon}{T_{\epsilon=1}}$ entre le temps de calcul T_ϵ trouvé pour une émissivité ϵ et celui obtenu pour la paroi noire $T_{\epsilon=1}$, en fonction de la valeur de l'émissivité. La première figure correspond au cas du dioxyde de carbone, la seconde à celui de la vapeur d'eau. Le caractère quasi linéaire de ces évolutions en fonction de l'émissivité pour les parois grises peut, quant à lui, être observé à la figure 4.43. Pour une émissivité de 0,5, le temps de calcul est par ailleurs multiplié par

un facteur variant entre 2,24 et 2,86. Les méthodes SNB-CK 10 et SNB-CK 1 semblent être, en outre, les plus perturbées par la présence des parois grises, leur temps de calcul ayant été multiplié au minimum par un facteur 2,7.

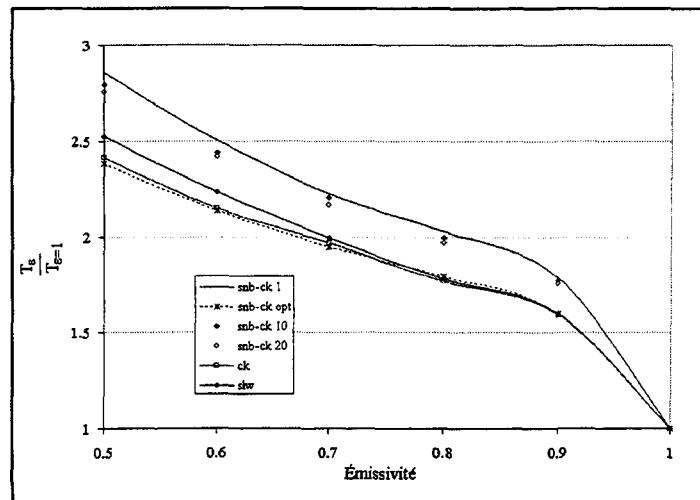


Figure 4.41: Évolution du rapport des temps de calcul $\frac{T_\epsilon}{T_{\epsilon=1}}$ en fonction de l'émissivité et des méthodes considérées avec le dioxyde de carbone.

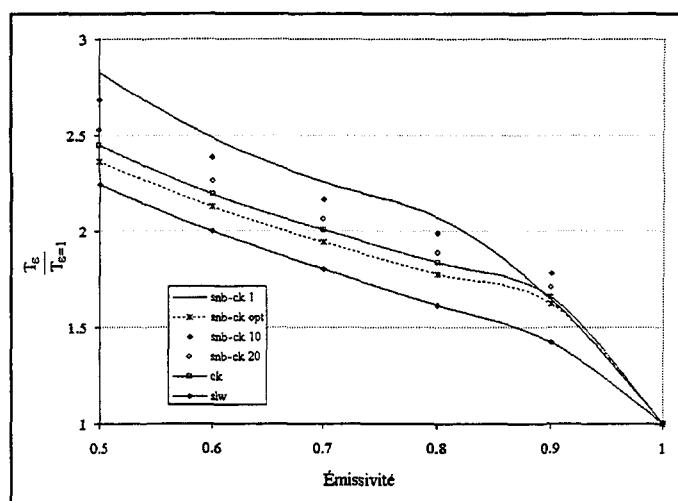


Figure 4.42: Évolution du rapport des temps de calcul $\frac{T_\epsilon}{T_{\epsilon=1}}$ en fonction de l'émissivité et des méthodes considérées avec la vapeur d'eau.

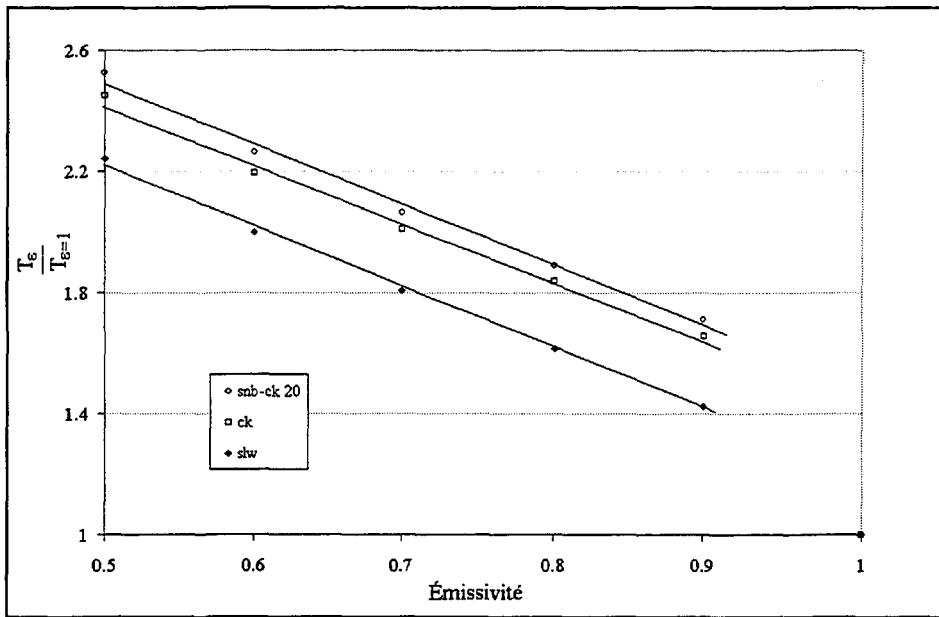


Figure 4.43: Variation quasi-linéaire du rapport des temps de calcul $\frac{T_\varepsilon}{T_{\varepsilon=1}}$ en fonction de l'émissivité pour les méthodes SNB-CK 20, CK et SLW avec la vapeur d'eau.

4.3.2.3 Conclusion

La méthode de gaz réel choisie et la valeur de l'émissivité de l'enceinte sont deux paramètres qui influencent le temps de calcul nécessaire pour quantifier le transfert radiatif dans une enceinte contenant un gaz réel. Le choix de la méthode a cependant un impact plus conséquent. En effet, alors qu'une diminution de l'émissivité de 1 à 0,5 n'entraîne une augmentation du temps de calcul que d'un facteur d'environ 2,5, le fait d'utiliser une méthode plutôt qu'une autre peut faire varier le temps de calcul d'un facteur 4000. Le temps de calcul propre à chaque méthode est en fait proportionnel au nombre de résolutions de l'équation de transfert radiatif qui doivent être effectuées, si bien que les méthodes globales SPGG ou SLW, nécessitant moins de résolutions que les méthodes à bandes étroites ou

relativement étroites telles que les méthodes SNB-CK 1, SNB-CK 10 ou CK, sont beaucoup plus rapides. Les gains en temps de calcul varient ainsi, tout dépendant de la nature du gaz utilisé, entre 600 et 4 000 pour la méthode SPGG, entre 75 et 170 pour la méthode SLW (utilisant 15 bandes étroites), entre 22 et 40 pour les méthodes SNB-CK 20 et SNB-CK OPT et entre 9 et 17 avec les méthodes SNB-CK 10 et CK.

CONCLUSIONS

L'objectif de cette thèse est de présenter une comparaison détaillée de plusieurs modèles de gaz réels formulés en coefficients d'absorption, afin de pouvoir choisir pour l'étude numérique d'un procédé industriel donné, tel que des fours de combustion, la méthode la plus performante. Le choix de cette méthode s'articule sur plusieurs paramètres qui sont la nature du gaz participant (CO_2 , H_2O ou $\text{CO}_2+\text{H}_2\text{O}$), les distributions en température et en fraction molaire des gaz participants, la dimension de l'enceinte, le degré de précision souhaité sur le flux pariétal et sur la divergence du flux, les valeurs des émissivités aux parois et le temps de calcul. Ces comparaisons sont effectués à partir de codes mono et bidimensionnels qui ont été développés au cours de cette étude.

Plusieurs étapes ont été suivies afin de pouvoir réaliser ces comparaisons. Tout d'abord, les mécanismes du transfert de chaleur par rayonnement ont été brièvement décrits, ainsi que l'établissement de la relation de transfert radiatif formulée en coefficient d'absorption. Grâce à cette formulation, l'ETR peut être résolue à l'aide d'une méthode aux ordonnées discrètes, méthode qui allie rapidité et précision des résultats. La variante utilisée pour cette thèse est celle développée par Sakami et al [16-17]; elle utilise des maillages triangulaires et est ainsi apte aux études de géométries complexes.

Par la suite, différentes méthodes, formulées en coefficient d'absorption et permettant de modéliser les gaz réels ont été décrites. Certaines proviennent de la littérature, ce sont les méthodes CK, SNB-CK, SLW et SPGG, d'autres ont été développées au cours de ce projet et sont des variantes de la méthode hybride SNB-CK. Ces variantes sont basées sur deux concepts. Le premier consiste à introduire des regroupements de bandes étroites et de former ainsi des bandes larges. Ces regroupements peuvent être de deux types, uniforme ou sélectif. Le second consiste à pouvoir utiliser des quadratures numériques de Gauss-Legendre dont l'ordre peut être inférieur à celui, de 7, préconisé habituellement dans la littérature et imposé dans la méthode CK optimisée fournie par Soufiani et al et al [27]. Ces deux modifications présentent l'avantage de diminuer de façon conséquente le nombre de résolutions de l'ETR nécessaires avec la méthode SNB-CK originelle.

Les différentes méthodes ont ensuite été couplées avec le modèle aux ordonnées discrètes et implantées dans des codes de calcul monodimensionnels qui ont été validés en utilisant des résultats de référence provenant des thèses de Denison et al [20] et Pierot et al [28]. Puis, des comparaisons approfondies sur leur précision respective pour le flux pariétal et la divergence du flux ont été réalisées en fonction des distributions en température et en fraction molaire, et de l'épaisseur de la couche gazeuse. Elles ont permis de mettre en exergue deux méthodes, la méthode CK optimisée et surtout la méthode SNB-CK OPT (variante de la méthode SNB-CK utilisant un regroupement sélectif), dont les résultats sont dans presque tous les cas envisagés de bonne voire de très bonne qualité. Les méthodes SNB-CK utilisant des regroupements uniformes sont de précision équivalentes lorsque le gaz envisagé ne contient que de la vapeur d'eau comme gaz participant, mais deviennent

moins précises en présence de dioxyde de carbone. Les précisions inhérentes aux deux méthodes globales SLW et SPGG sont quant à elles beaucoup plus influencées par les caractéristiques du milieu considéré et peuvent subir de fortes variations lors d'un changement d'un des paramètres (température, fraction molaire...), en particulier pour la divergence du flux. Pour chaque nature de gaz, des tableaux récapitulatifs, permettant d'illustrer le degré de précision respectif des méthodes pour des conditions homogènes et isothermes, ont par ailleurs été fournies. Ces tableaux peuvent servir de base pour le choix d'une méthode lorsque les paramètres de l'enceinte ont été bien définis.

Par la suite, des codes bidimensionnels de résolution de l'ETR ont été développés et le code utilisant la méthode de référence - la méthode SNB-CK 1-7 - a été validé à l'aide de résultats obtenus avec la méthode SNB couplée à une méthode de lancer de rayons [34]. Ces codes bidimensionnels ont ensuite permis, d'une part, de vérifier si les résultats 2D corroborent les résultats 1D, et d'autre part, de connaître les temps de calcul alloués à chaque modèle de gaz gris. Il s'avère que le temps de calcul est quasi proportionnel aux nombres de résolutions de l'ETR à effectuer, les calculs annexes devenant en comparaison relativement peu importants. Les méthodes globales (SLW et SPGG) nécessitant beaucoup moins de résolutions de l'ETR sont ainsi beaucoup plus rapides et peuvent aisément servir à obtenir un ordre de grandeur des transferts radiatifs. Cependant, pour des calculs plus rigoureux, un compromis doit être effectué entre le temps de calcul et la qualité des résultats. Le meilleur compromis réside dans la méthode SNB-CK OPT qui permet non seulement d'obtenir de très bon résultats mais qui est aussi 2 à 3 fois plus rapide que la méthode SNB-CK 10 et 2 à 9 fois plus rapide que la méthode CK optimisée. L'influence du

temps de calcul devient par ailleurs d'autant plus important que l'émissivité aux parois diminue. En effet, les réflexions augmentent le nombre d'itérations nécessaire avant d'atteindre la convergence et le temps de calcul est multiplié par un facteur 2,5 à 2,9 entre des parois noires et des parois grises d'émissivité de 0,5.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] J. Taine et A. Soufiani "Éléments de physique du rayonnement des gaz", Ecole de printemps de rayonnement thermique organisée par le C.N.R.S et la S.F.T, (1996) Vol. 2.
- [2] C. Tien "Thermal radiation properties of gases" Advances in heat transfer, Academic press, NY. London (1968), Vol. 5, p. 273-303.
- [3] R. Vaillon "Etude de l'interaction rayonnement-chimie dans un plasma réactif d'hydrogène-hélium à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes en coordonnées curvilignes" Thèse à l'université de Poitiers (France) (1996).
- [4] A. Lacis et V. Oinas "A description of the correlated k distribution method for modeling non gray gaseous absorption, thermal emission and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres" Journal of Geophysical Research (1991) Vol. 96, p. 9 027-9 063.
- [5] J. André, A. Vannes "Techniques d'utilisation des photons. Principes et applications" Electricté de France, Ed. Electra (1992).
- [5b] V. Goutière, A. Charette et L. Kiss, "Non-gray gas modeling in complex enclosures: application of the hybrid SNB-CK method", Third International Symposium on Radiative Transfer (Antalya, Turquie) (juin 2001).
- [5c] H. C. van de Hulst, "Light scattering by small particles", John Wiley & Sons, New York, (1957)

- [6] A. Bejan "Heat transfer", Ed. John Wiley & Sons, Inc. (1993)
- [7] R. Siegel et J. R. Howell "Thermal Heat Transfer", Ed. McGraw-Hill, Inc (1972).
- [8] H. Hottel, A. Sarofim "Radiative transfer" McGraw-Hill, New York (1967).
- [9] M. Modest "Radiative heat transfer" Ed. McGraw-Hill, Inc (1993).
- [10] D. Lemonnier "Méthodes de résolutions de l'équation de transfert ", Ecole de printemps de rayonnement thermique organisée par le C.N.R.S et la S.F.T, (1996).
- [11] S. Chandrasekhar "Radiative transfer", Dover Publications Inc., NY (1960).
- [12] B. G. Carlson et K. D. Lathrop "Transport theory. The method of discret ordinates. Computing method in reactor physics" London. Gordon and Breach (1968).
- [13] W. A. Fiveland "Three-Dimensioal Radiative Heat Transfer Solutions by the Discrete-Ordinates Method", Journal of thermophysics (1988), Vol. 2, No. 4, p. 309-316.
- [14] W. Fiveland, A. Jamaluddin "Three-dimensionnal spectral radiative heat transfer solutions by the discrete-ordinates method", Journal of thermophysics (1991), Vol. 5, No. 3, p. 335-339.
- [15] J. S. Truelove "Three dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering media using the discrete ordinates approximation", JQSRT (1988), Vol. 39, No. 1, p. 27-31.
- [16] M. Sakami, A. Charette et V. Le Dez "Application of the discrete ordinates method to combined conductive and radiative heat transfer in a two-dimensional complex geometry" JQSRT (1996).

- [17] M. Sakami, A. Charette et V. Le Dez "Application de la méthode des ordonnées discrètes au transfert radiatif dans un milieu bidimensionnel gris à géométrie complexe", Revue Générale de Thermique (1996), Vol. 35, p. 83-94.
- [18] M. Sakami, A. Charette et V. Le Dez "Radiative heat transfer in 3-dimensional enclosures of complex geometry by using the discrete-ordinates method", JQSRT (1998), Vol. 59, No. 1, p 117-136.
- [19] C. P. Thurgood "A critical evaluation of the discrete ordinates method using Hart and TN quadrature" Thèse à l'Université de Queen, Dépt de Génie Chimique, Kingston (Canada) (1992).
- [20] M. Denison "A spectral line-based WSSG model for arbitrary RTE solvers" Thèse à Brigham Young University, Dépt de Génie Mécanique (U.S.A) (1994).
- [21] F. Liu, Ö. L. Gülder et G. J. Smallwood "Non-grey gas radiative transfer analyses using the statistical narrow-band model", Int. J. Heat Mass Transfer (1998), Vol. 41, No. 14, p. 2227-2236.
- [22] A. Borges de Miranda "Étude des échanges radiatifs dans des gaz non gris diffusants par la méthode des ordonnées discrètes associée à un modèle statistique à bandes étroites", Thèse de doctorat à l'INSA, Lyon (France) (1995).
- [22b] D. R. Rousse. "Numerical predictions of multidimensional conduction, convection and radiation heat transfer in participating media", Thèse de doctorat à l'Université McGill (Canada) (1994)

- [23] P. Riviere "Modélisation des propriétés radiatives de la vapeur d'eau à haute température. Applications à la signature infrarouge" Thèse à l'École Centrale de Paris (France) (1994).
- [24] J. Taine et A. Soufiani "Modèles approchés de rayonnement des gaz", Ecole de printemps de rayonnement thermique organisée par le C.N.R.S et la S.F.T, (1996) Vol. 2.
- [25] W. Malkmus "Random Lorentz band model with exponential-tailed S^{-1} line-intensity distribution function" Journal of the Optical Society of America (1967) Vol. 57, p. 323-329.
- [26] S. Young "Nonisothermal band model theory" JQSRT (1977) Vol. 18, p. 1-28.
- [27] A. Soufiani, J. Taine et al "High temperature gas radiative parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO and correlated K model for H₂O and CO₂", Int. Journal of Heat and Mass Transfer (1997), Vol. 40, No. 4, p 987-
- [28] L. Pierrot "Développement, étude critique et validation de modèles de propriétés radiatives infrarouges de CO₂ et H₂O à haute température. Applications au calcul des transferts dans des chambres aéronautiques à la télédétection" Thèse à l'École Centrale de Paris, Paris (1997).
- [29] L. Pierrot, A. Soufiani et J. Taine "Accuracy of various gas IR radiative property models applied to radiative transfer in planar media", Proceedings of the First International Symposium on Radiation Transfer. P. Mengüç, editor. Begell House (1995) p. 209-227.
- [30] A. Soufiani, E. Djavdan "A comparison between WSGG and statistical narrow-band radiation models for combustion applications" Combustion and Flame (1994), Vol. 97, p. 240-250.

- [31] J. F. Sacadura, A. Borges de Miranda "Radiative transfer modelling: A survey of the current capabilities for non-gray participating media", Eurotherm Seminar No. 37, Vol. 2 Heat Transfer in Radiating and Combusting Systems, Italie (1994), p. 13-33.
- [32] L. Rothman et al "The Hitran molecular database" JQSRT (1991-1992a), Vol. 48, No. 5/6, p..469-507.
- [33] L. Rothman "AFLG atmospheric absorption line parameters compilation, 1980 version" Applied Optics (1981) Vol. 20, p. 791-795.
- [34] V. Goutiere, F. Liu et A. Charette "An assessment of real-gas modelling in 2D enclosures", JQSRT (2000), Vol. 64, No 3, p. 299-326.
- [35] V. Goutiere, A. Charette et L. Kiss "Real gas modeling: improvement of the hybrid SNB-CK model", The Combustion Institute - Canadian section, 2000 Spring Technical Meeting (Ottawa), paper 27.
- [36] F. Liu, G. J. Smallwood et Ö. L. Gülder "Radiation heat transfer calculations using the SNBCK method" American Institute of Aeronautics and Astronautics, 33rd Thermophysics Conference (1999), Norfolk (USA).
- [37] F. Liu, G. J. Smallwood et Ö. L. Gülder "Application of the statistical narrow-band correlated-k method to low-resolution spectral intensity and radiative heat transfer calculations - Effects of the quadrature scheme", Int. Journal of Heat and Mass Transfer (2000), Vol. 43, p. 3119-3135.
- [38] G. Domoto "Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : the inverse transmission function" JQSRT (1974), Vol. 14, p. 935-942.

- [39] I. Farag, T. Allam "A mixed gray-gas model to calculate water vapor standard emissivities" ASME 81-HT-63, p. 1-6.
- [40] I. Farag, T. Allam "Gray gas approximation of carbon dioxide standard emissivity" Journal of Heat Transfer (1981), Vol.103, p. 403-404.
- [41] I. Farag "Non luminous gas radiation : approximate emissivity models" 7th Int. Heat Transfer Conference (1982), Vol. 2, p. 487-492.
- [42] T. Smith, Z. Shen, J. Friedman "Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model" ASME Journal of Heat Transfer (1982) Vol. 104, p. 602-608.
- [43] A. Copalle, P. Vervisch "The total emissivities of high temperature flames" Combustion and Flame (1983), Vol. 49, p. 101-108.
- [44] M. F. Modest "The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer", Journal of Heat Transfer (1991), Vol. 113, p. 650-656.
- [45] J. D. Felske, T. T. Charalampopoulos "Gray gas weighting coefficients for arbitrary gas-soot mixtures", Int. J. Heat Mass Transfer (1982), Vol. 25, No. 12, p. 1849-1855.
- [46] A. M. Al Turki, T. F. Smith "Radiative and convective transfer in a cylindrical enclosure for a gas/soot mixture", Journal of heat Transfer (1987), Vol. 109, p. 259-261.
- [47] N. W. Bressloff "The influence of soot loading on weighted sum of grey gases solutions to the radiative transfer equation across mixtures of gases and soot", Int. J. Heat Mass Transfer (1999), Vol. 42, p. 3469-3480.

- [48] M. Denison, B. Webb "The spectral line-based WSSG. Model in nonisothermal nonhomogeneous media" Journal of Heat Transfer (1995), Vol. 117, p. 359-365.
- [49] M. Denison, B. Webb "The spectral line weighted-sum-of-gray-gases model - A review ", Proceedings of the First International Symposium on Radiation Transfer (Kusadasi). P. Mengüç, editor. Begell House (1995) p. 193-208.
- [50] T. K. Kim, J. A. Menart et H. S. Lee "Nongray radiative gas analyses using the S-N discrete ordinates method" ASME Journal of Heat Transfer (1991), Vol. 113, p. 946-952.
- [51] M. Denison, B. Webb "The absorption-line blackbody distribution function at elevated pressure", Proceedings of the First International Symposium on Radiation Transfer (Kusadasi). P. Mengüç, editor. Begell House (1995) p. 228-238.
- [52] O. Marin, R. O. Buckius "Wide band correlated-k approach to thermal radiative transport in nonhomogeneous media", Journal of heat transfer (1997), Vol. 119, p. 719-729.
- [53] O. J. Kim, T. Song "An improved spectral WSGGM of water vapor using a narrow band model", Proceedings of the Second International Symposium on Radiation Transfer. P. Mengüç, editor. Begell House (1997) p. 445-459.
- [54] P. Docherty, M. Fairweather "Predictions of radiative transfer from nonhomogeneous combustion products using the discrete transfer method", Combustion and Flame (1988), Vol. 71, p. 79-87.
- [55] V. Goutière, A. Charette et F. Liu "Modelling radiative transfer in real gases: an assessment of existing methods in 2D enclosures", Proceedings of the 1999 ASME NHTC, 33rd National Heat Transfer Conference, Albuquerque, (U.S.A), NHTC99-53.

APPENDICE A

PROPRIÉTÉS DES COEFFICIENTS D'EINSTEIN ÉTABLISSEMENT DE L'ETR POUR UNE TRANSITION

A.1 PROPRIÉTÉS DES COEFFICIENTS D'EINSTEIN

Une transition entre deux états quantiques 1 et 2 n'a pas lieu pour une valeur discrète de nombre d'onde, mais pour un étalement spectral centré sur ν_r . On peut alors selon les conditions thermophysiques du milieu (température, pression, concentration molaire) définir un profil de raie normalisé $F(\nu - \nu_r)$ caractérisant l'évolution de la transition en fonction de l'étalement spectral $\Delta\nu$.

Les lois régissant les émissions induites, spontanées et l'absorption induite entre les deux états quantiques sont [2]:

$$1) \quad \left. \frac{\partial N_1}{\partial t} \right|_{sp} = - \left. \frac{\partial N_2}{\partial t} \right|_{sp} = N_2 A_{21} F(\nu - \nu_{12}) \Delta \nu \quad \text{émission spontanée} \quad (\text{A.1})$$

$$2) \quad \left. \frac{\partial N_1}{\partial t} \right|_i = - \left. \frac{\partial N_2}{\partial t} \right|_i = N_2 B_{21} u_\nu F(\nu - \nu_{12}) \Delta \nu \quad \text{émission induite} \quad (\text{A.2})$$

$$3) \quad \left. \frac{\partial N_1}{\partial t} \right|_a = - \left. \frac{\partial N_2}{\partial t} \right|_a = -N_1 B_{12} u_\nu F(\nu - \nu_{12}) \Delta \nu \quad \text{absorption induite} \quad (\text{A.3})$$

u_ν est la densité volumique d'énergie radiative: $u_\nu = \int \frac{I_\nu}{c} d\Omega$ où I_ν est le rayonnement se

propageant dans l'angle solide $d\Omega$ et dans l'intervalle spectral $[\nu; \nu + d\nu]$. Lorsque l'intensité et la célérité sont isotropes, on a par ailleurs, $u_\nu = \frac{4\pi I_\nu}{c}$.

A l'équilibre thermodynamique, les populations des niveaux 1 et 2 restent constantes, et

$$\text{l'on a: } \frac{\partial N_1}{\partial t} \Big|_{12} = \frac{\partial N_2}{\partial t} \Big|_{12} = 0 \quad (\text{A.4})$$

L'équation suivante peut alors être déduite des relations (A.1 à A.3):

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} \Big|_{12} = -\frac{\partial N_2}{\partial t} \Big|_{12} = [A_{21}N_2 + u_\nu(B_{21}N_2 - B_{12}N_1)]F(\nu - \nu_{12})\Delta\nu = 0 \quad (\text{A.5})$$

En utilisant les lois probabilistes des populations des deux niveaux d'une transition

$$\text{énergétique à l'équilibre thermodynamique, on a: } \frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \quad (\text{A.6})$$

où g_1 et g_2 sont les dégénérescences de ces deux niveaux énergétiques, l'équation (A.5) permet d'écrire la relation suivante:

$$u_\nu(T) = \frac{A_{21}}{B_{21}} \left[\frac{B_{12}g_1}{B_{21}g_2} \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (\text{A.7})$$

Par ailleurs, on peut écrire, en se référant à la loi de Planck, $L_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1}$,

l'équation suivante pour la densité volumique radiative:

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (\text{A.8})$$

Les deux relations suivantes peuvent alors être déduites:

$$-\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad (\text{A.9})$$

$$-g_1B_{12} = g_2B_{21} \quad (\text{A.10})$$

A.2 Établissement de l'équation de transfert pour une transition

Afin d'établir cette équation, deux expressions de la puissance radiative créée dans un élément de volume dV , dans un angle solide $d\Omega$ et dans l'intervalle spectral dv , propre à une raie de transition ν_{12} , sont utilisées. D'une part, en se servant de la définition de la puissance radiative, on obtient:

$$dP_\nu = dI_\nu d\Omega dS \cos \theta dv \quad (\text{A.11})$$

D'autre part, en considérant le nombre de particules variant de l'état 1 à l'état 2, l'expression de la puissance radiative peut aussi se formulée comme suit:

$$\begin{aligned} dP_\nu &= dV \frac{d\Omega}{4\pi} \left(\frac{\partial N_1}{\partial t} \right) \\ &= dV \frac{d\Omega}{4\pi} \left[A_{21}N_2 + \frac{4\pi I_\nu}{c} (B_{21}N_2 - B_{12}N_1) \right] h\nu F(\nu - \nu_{12}) dv \\ &= d\Omega dV \left[\frac{A_{21}}{4\pi} N_2 + B_{21} \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) \frac{I_\nu}{c} \right] h\nu F(\nu - \nu_{12}) dv \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Or $dV = dS dz = dS ds \cos \theta$

$$\text{D'où } dP_\nu = d\Omega dS ds \cos \theta \left[\frac{A_{21}}{4\pi} N_2 + B_{21} \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) \frac{I_\nu}{c} \right] h\nu F(\nu - \nu_{12}) dv \quad (\text{A.13})$$

En se référant aux équations (A.11) et (A.13), l'équation de transfert radiatif pour une transition peut alors se formulée comme suit:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = h\nu F(\nu - \nu_{12}) \left[\frac{A_{21}}{4\pi} N_2 + B_{21} \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) \frac{I_\nu}{c} \right] \quad (\text{A.14})$$

APPENDICE B

QUADRATURES DE GAUSS-LEGENDRE

Tableau B.1: Quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 20.

$\tilde{\omega}_i$	g_i
0.00881	0.00344
0.02030	0.01801
0.03134	0.04388
0.04164	0.08044
0.05097	0.12683
0.05910	0.18197
0.06584	0.24457
0.07105	0.31315
0.07459	0.38611
0.07638	0.46174
0.07638	0.53826
0.07459	0.61389
0.07105	0.68685
0.06584	0.75543
0.05910	0.81803
0.05097	0.87317
0.04164	0.91956
0.03134	0.95612
0.02030	0.98199
0.00881	0.99656

Tableau B.2: Quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 15.

$\tilde{\omega}_i$	g_i
0.01538	0.00600
0.03518	0.03136
0.05358	0.07590
0.06979	0.13779
0.08313	0.21451
0.09308	0.30292
0.09922	0.39940
0.10129	0.50000
0.09922	0.60060
0.09308	0.69708
0.08313	0.78549
0.06979	0.86221
0.05358	0.92410
0.03518	0.96864
0.01538	0.99400

Tableau B.3: Quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 7.

$\tilde{\omega}_i$	g_i
0.06474	0.02545
0.13985	0.12923
0.19092	0.29708
0.20898	0.50000
0.19092	0.70292
0.13985	0.87077
0.06474	0.97455

Tableau B.4: Quadrature de Gauss-Legendre d'ordre 5.

$\tilde{\omega}_i$	g_i
0.11846	0.04691
0.23931	0.23077
0.28444	0.50000
0.23931	0.76924
0.11846	0.95309

APPENDICE C

MAILLAGE NON UNIFORME 1D À 20 et 30 CELLULES

Tableau C.1: Maillage de 20 (a) et 30 (a) cellules pour deux plaques parallèles espacées de 1m.

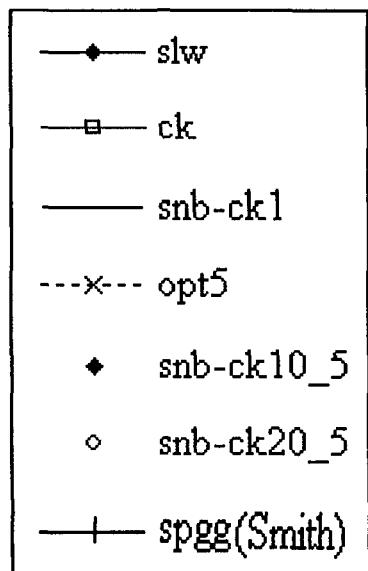
a)	0.01671	b)	0.01063
	0.03855		0.02337
	0.06671		0.03855
	0.10249		0.05654
	0.14704		0.07773
	0.20115		0.10249
	0.26494		0.13116
	0.33754		0.16399
	0.41692		0.20115
	0.50000		0.24264
	0.58308		0.28824
	0.66246		0.33754
	0.73506		0.38988
	0.79885		0.44437
	0.85296		0.50000
	0.89751		0.55563
	0.93329		0.61012
	0.96145		0.66246
	0.98329		0.71176
			0.75736
			0.79885
			0.83601
			0.86884
			0.89751
			0.92227
			0.94346
			0.96145
			0.97663
			0.98937

APPENDICE D

COMPARAISONS MONODIMENSIONNELLES

Planches 1 à 18: Comparaisons avec le CO₂

Légende utilisée pour les résultats des flux pariétaux



Légende utilisée pour les résultats de la divergence du flux

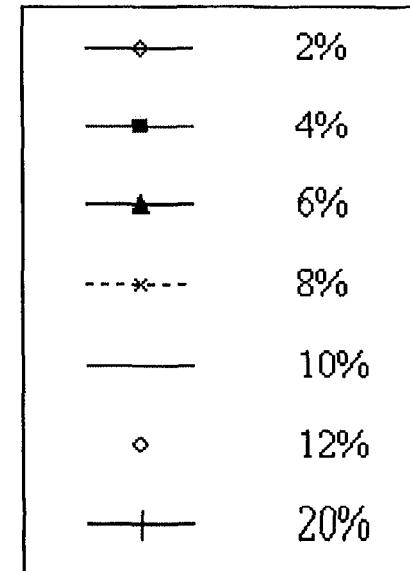


Planche 1a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène

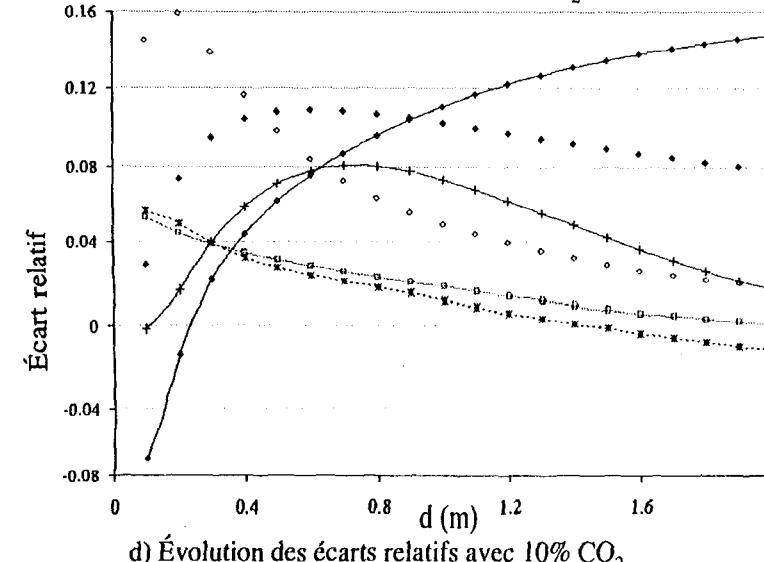
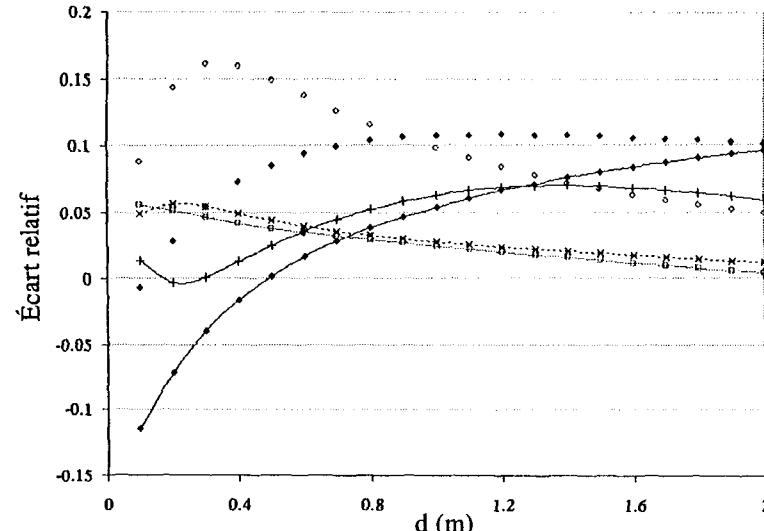
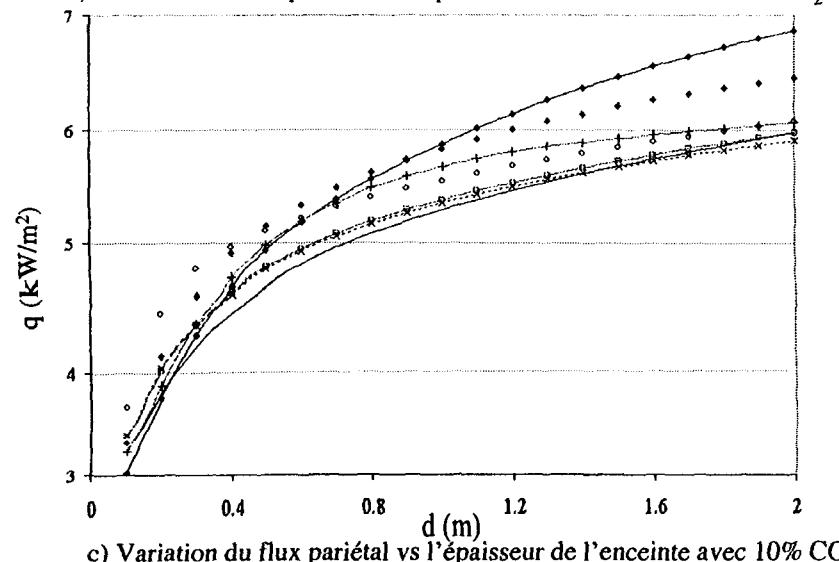
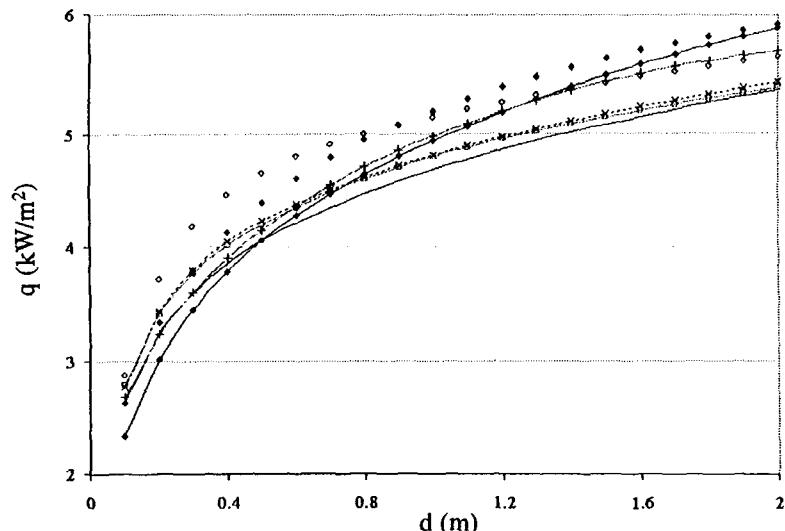
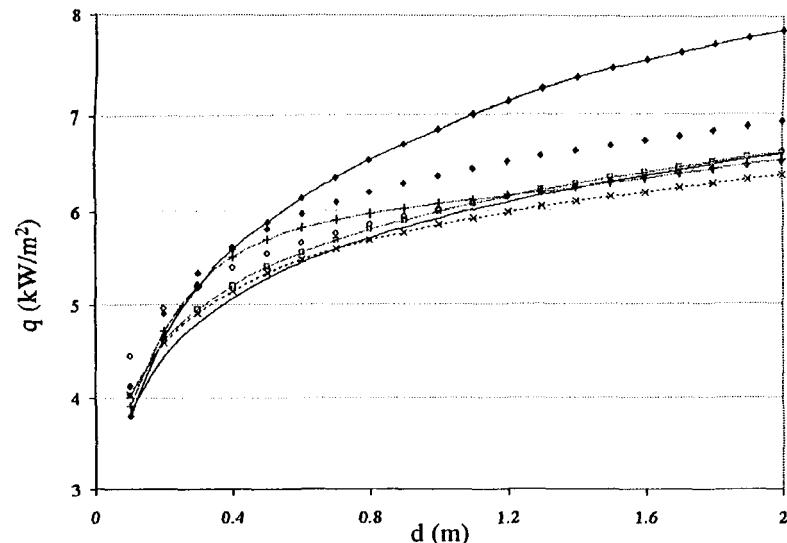
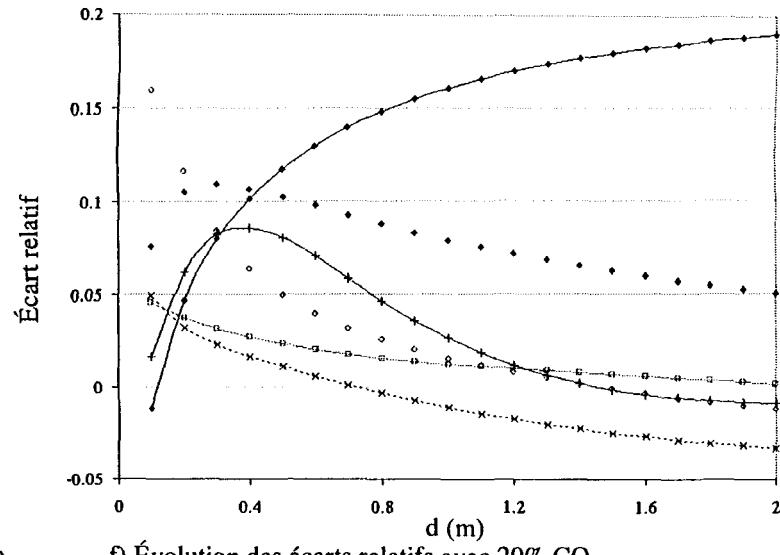


Planche 1b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène

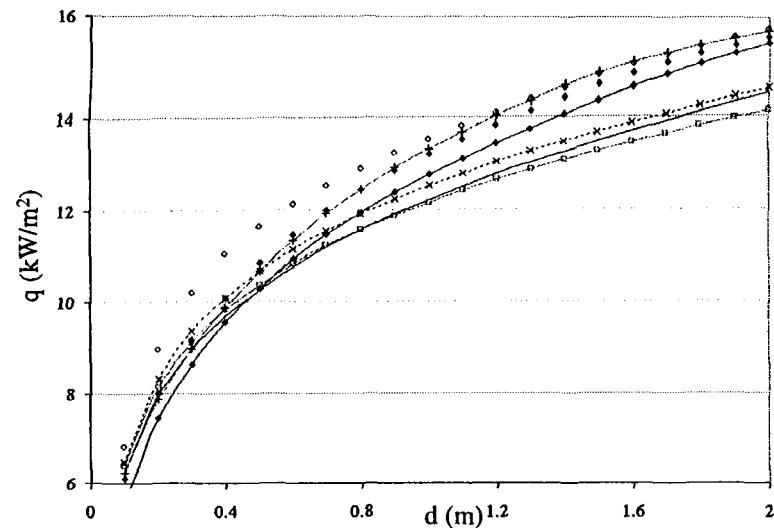


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% CO_2

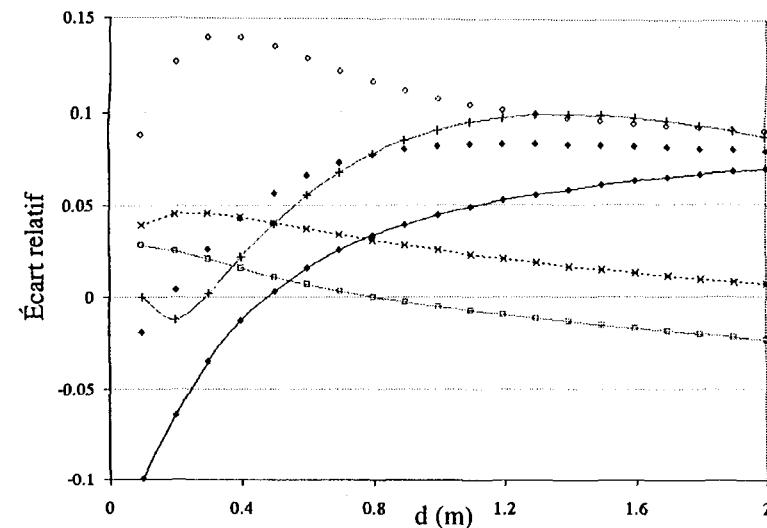


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% CO_2

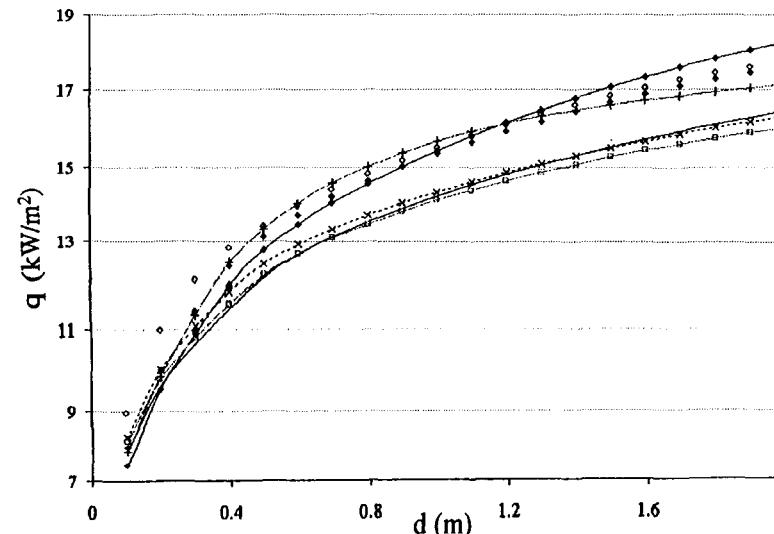
Planche 2a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène



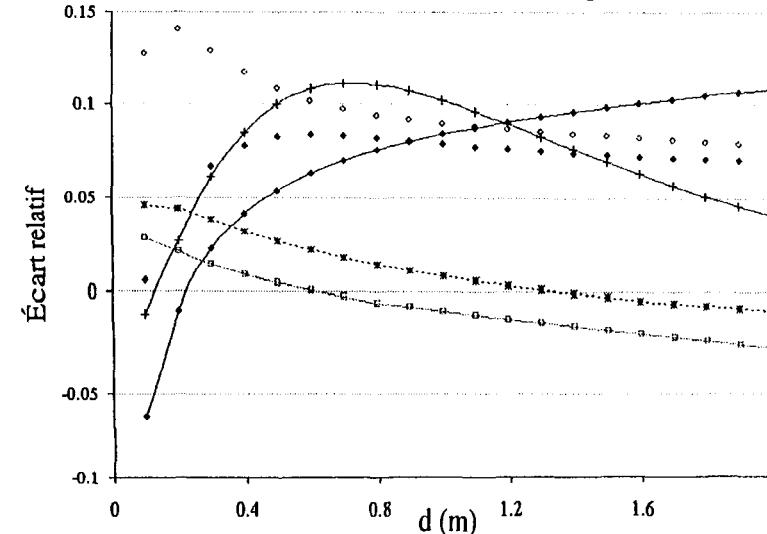
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO_2



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO_2

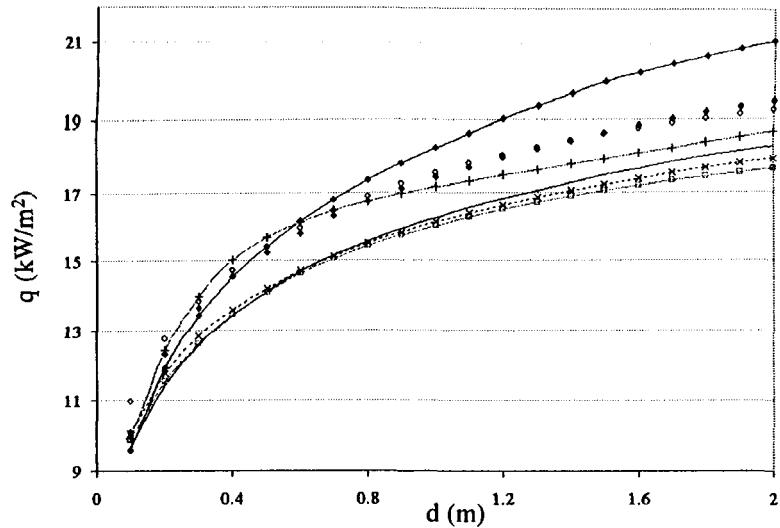


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO_2

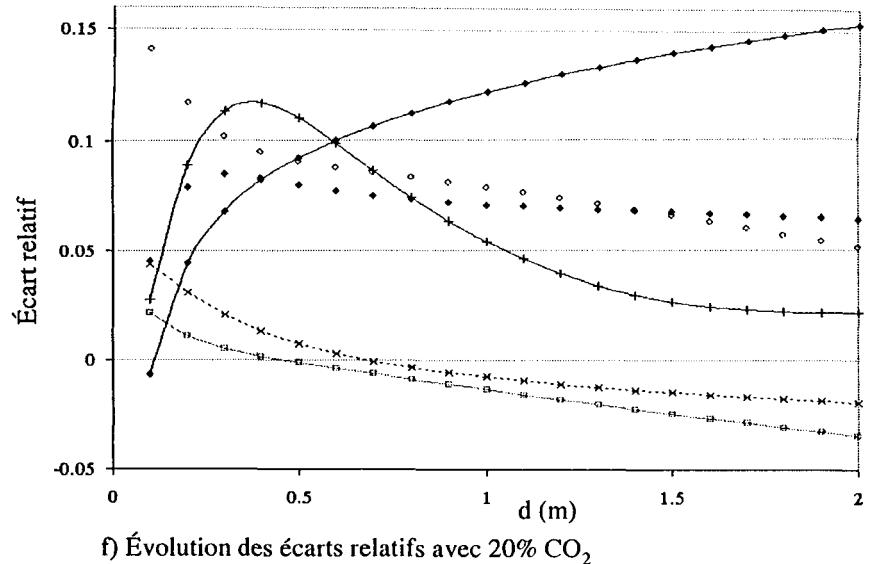


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO_2

Planche 2b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène

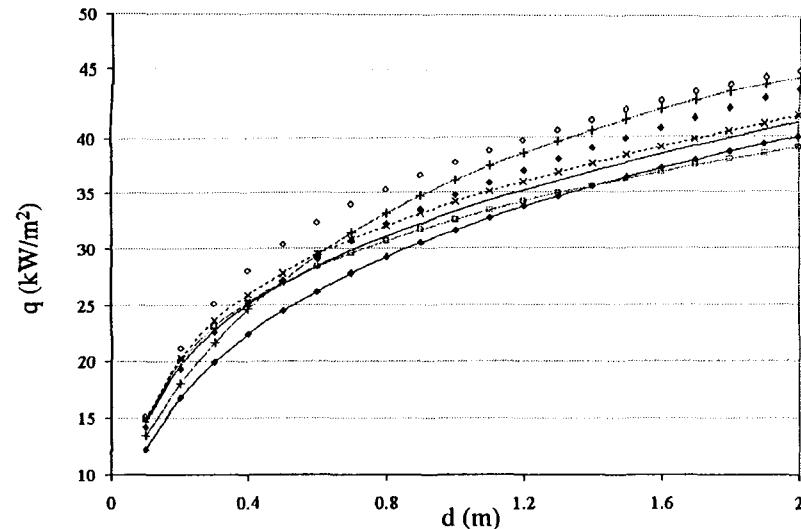


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% CO_2

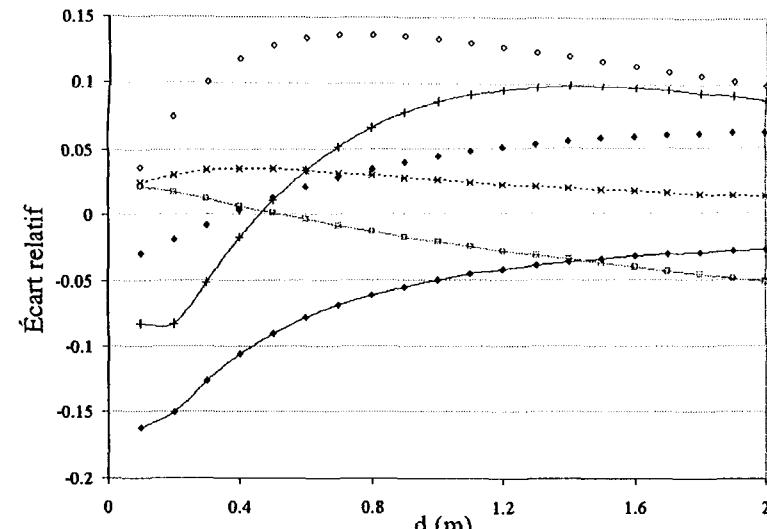


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% CO_2

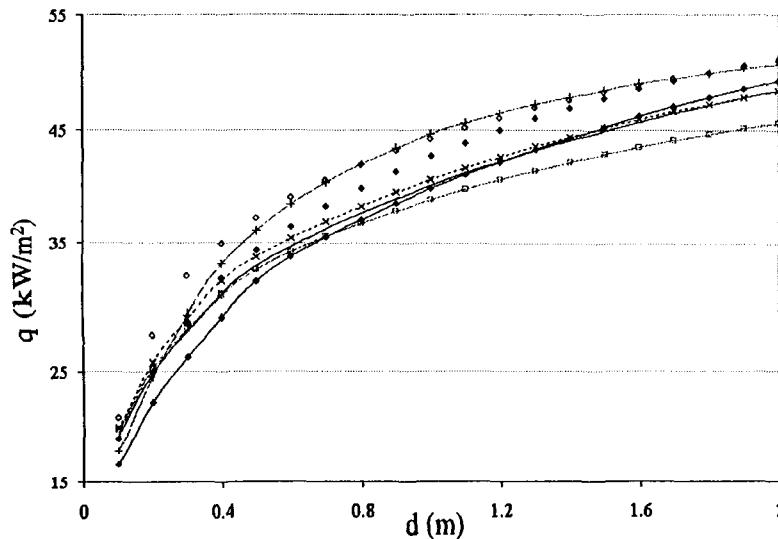
Planche 3a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène



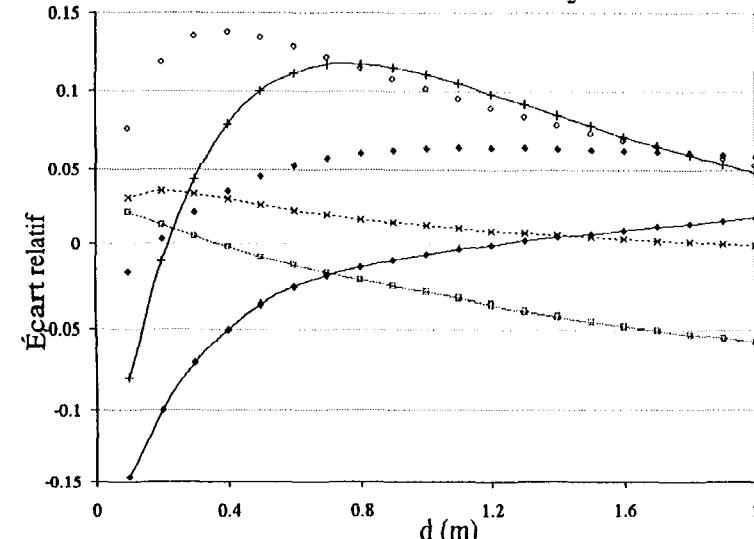
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO_2



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO_2

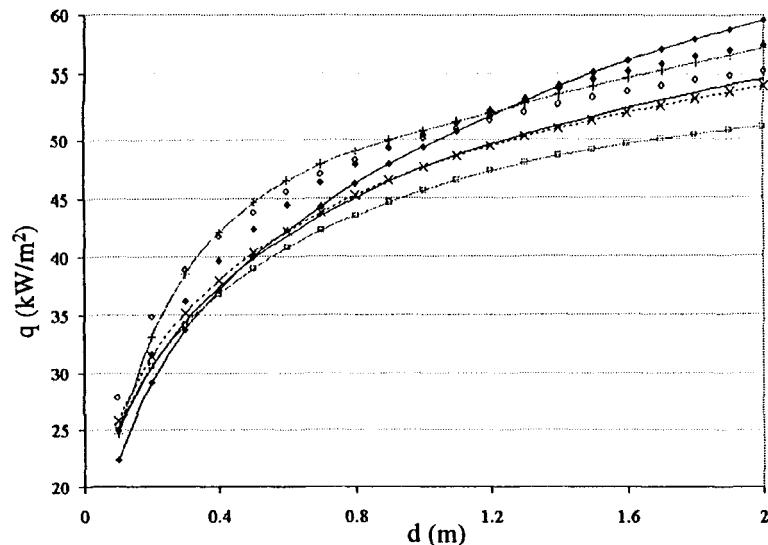


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO_2

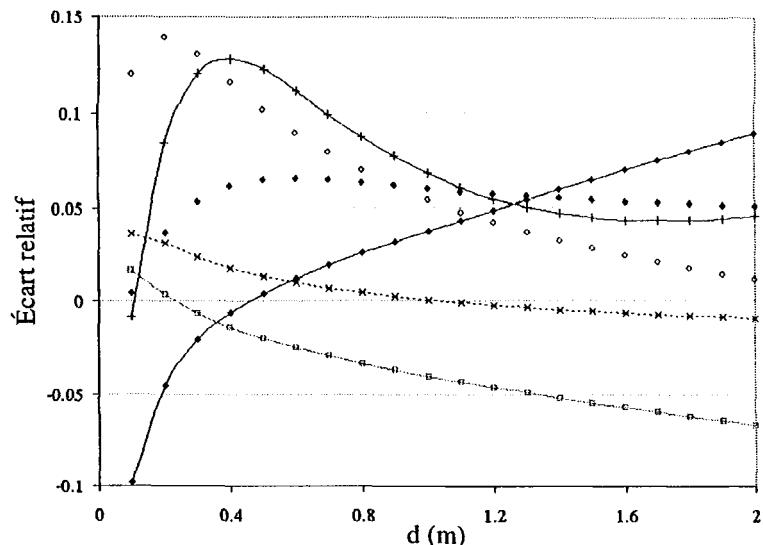


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO_2

Planche 3b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène

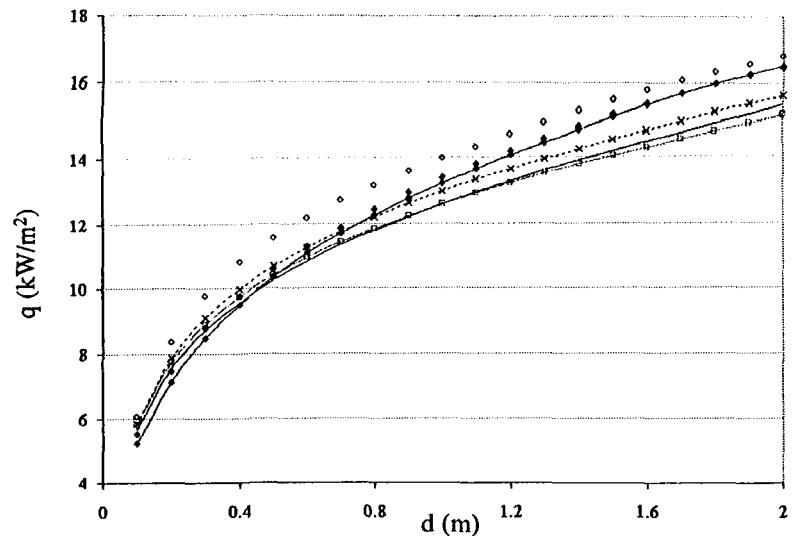


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% CO_2

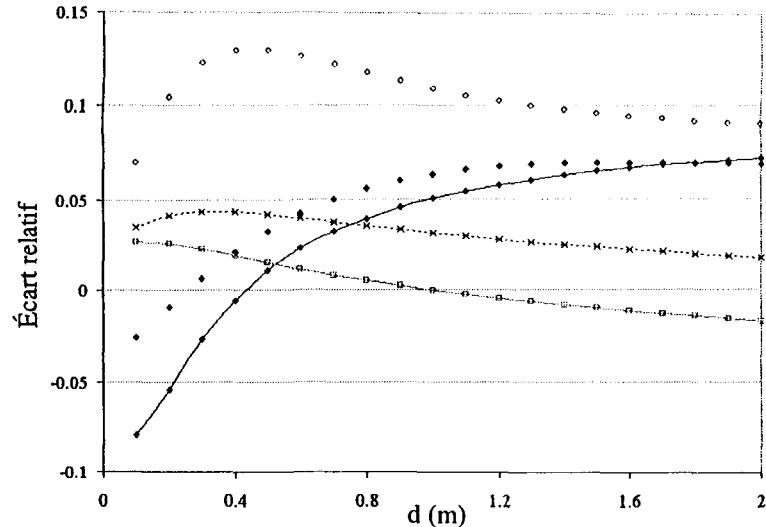


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% CO_2

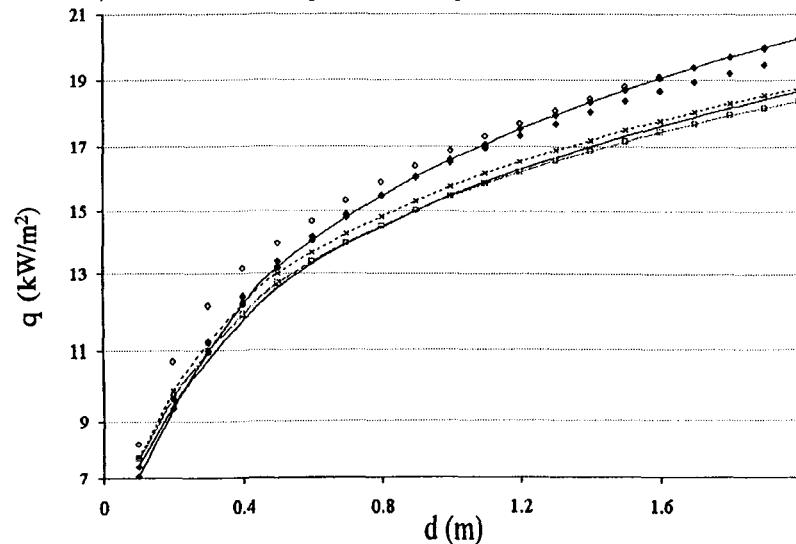
Planche 4a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène



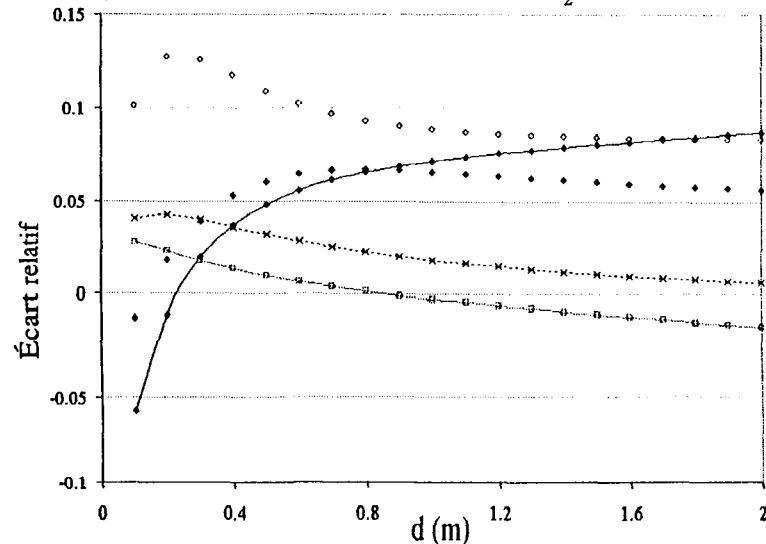
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO_2



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO_2

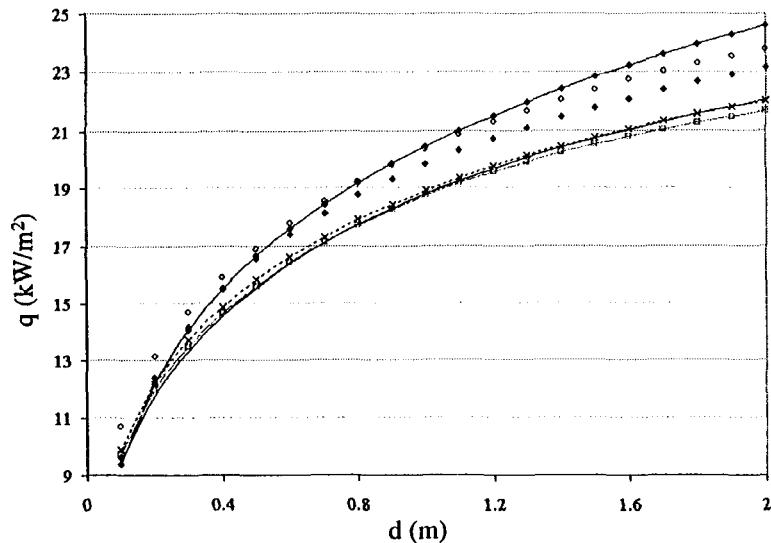


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO_2

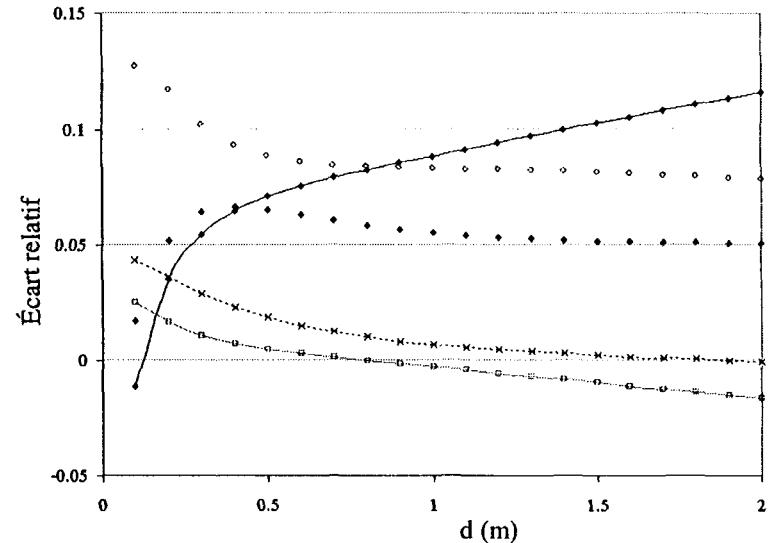


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO_2

Planche 4b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène

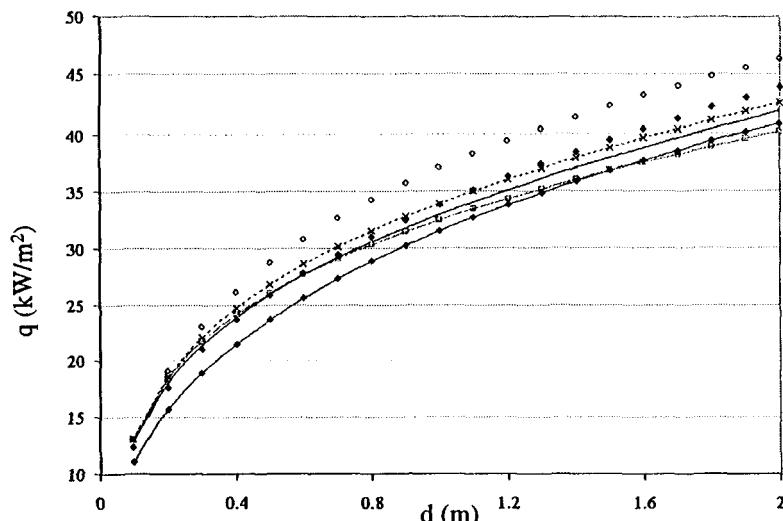


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% CO₂

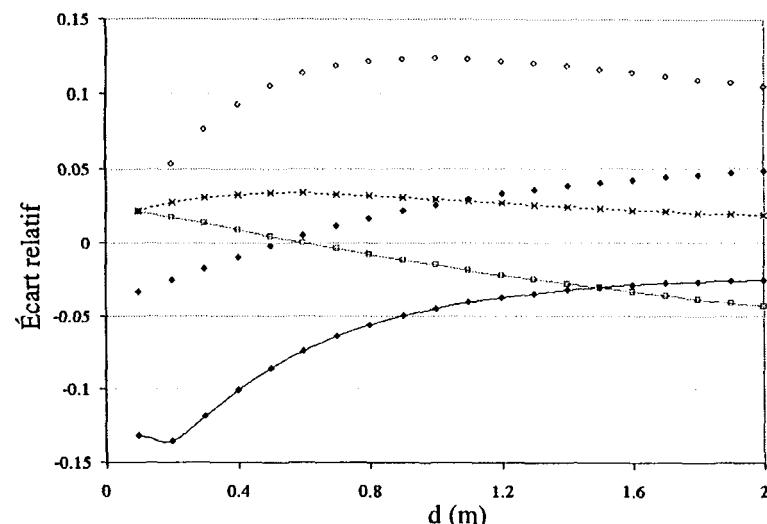


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% CO₂

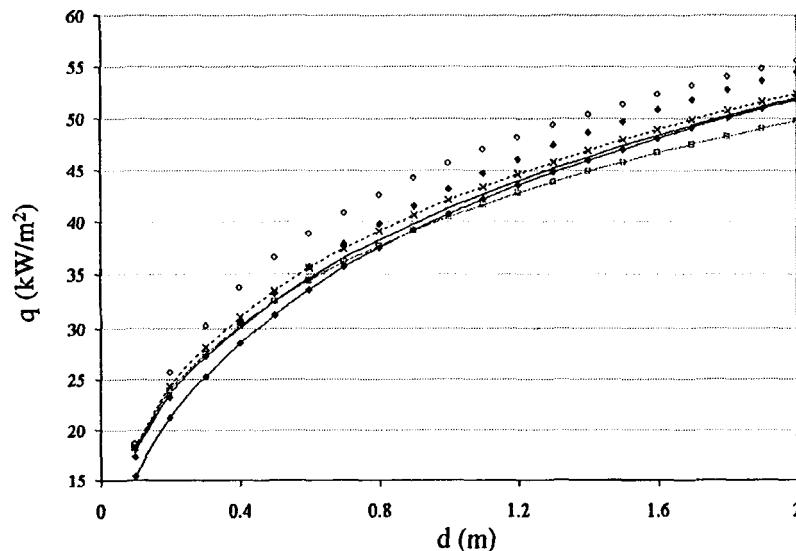
Planche 5a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène



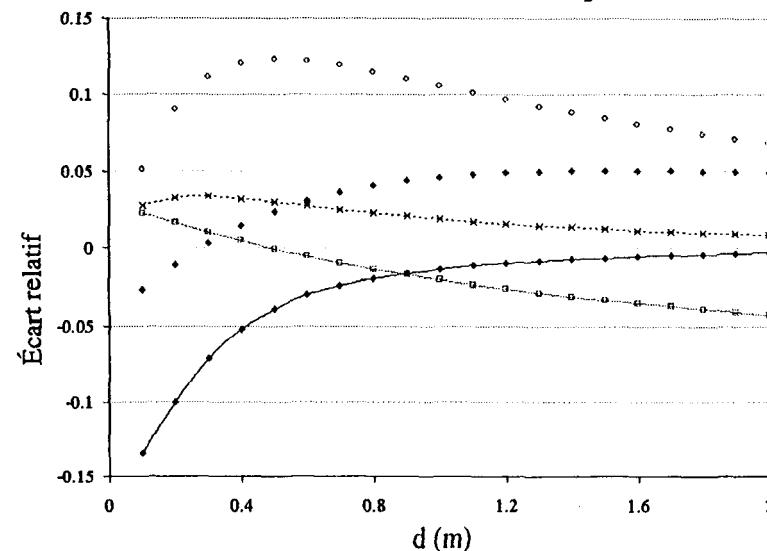
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO₂



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO₂

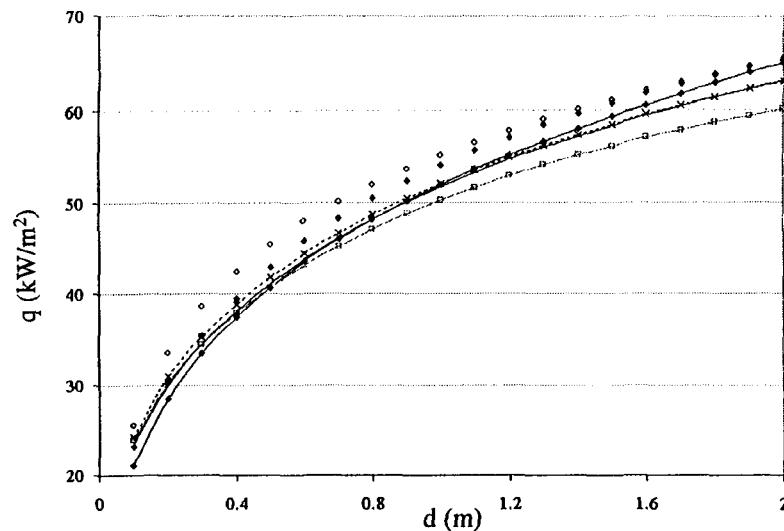


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO₂

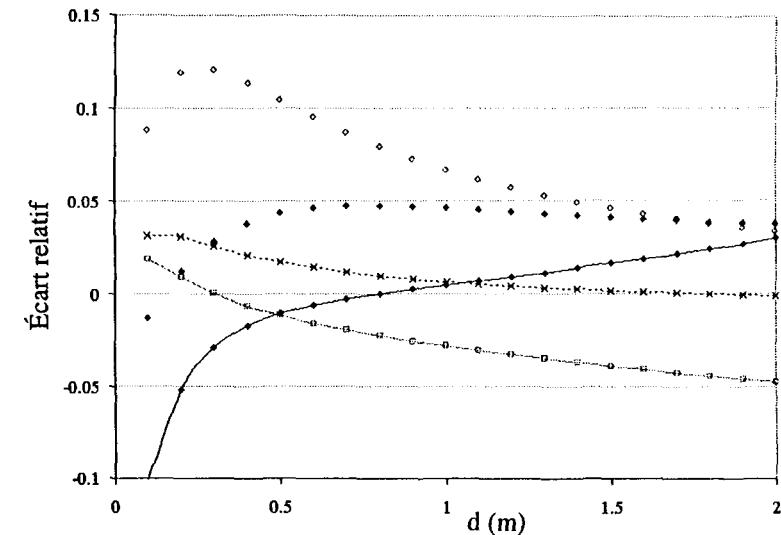


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO₂

Planche 5b: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène

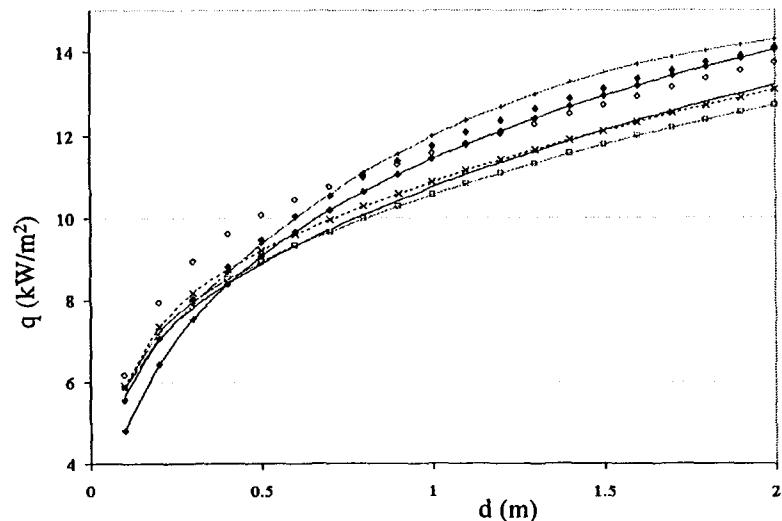


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% CO_2

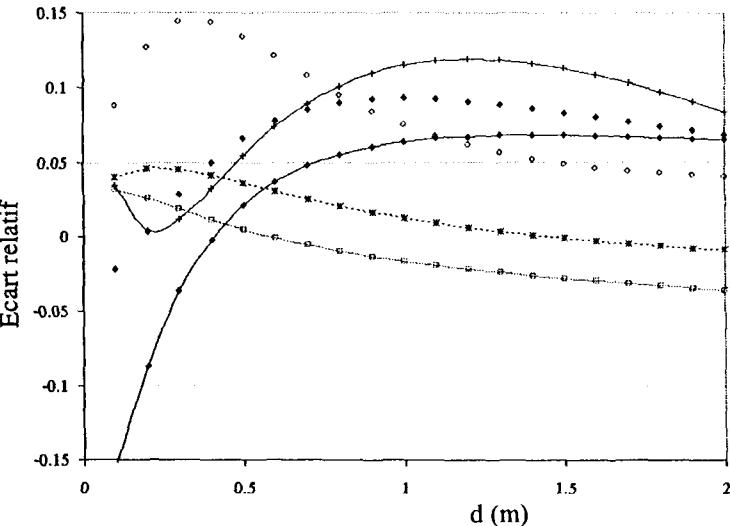


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% CO_2

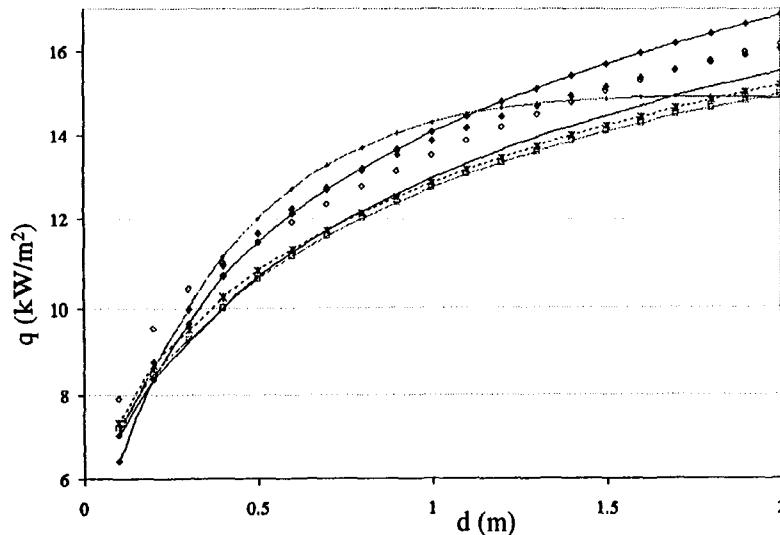
Planche 6a: Milieu anisotherme et homogène



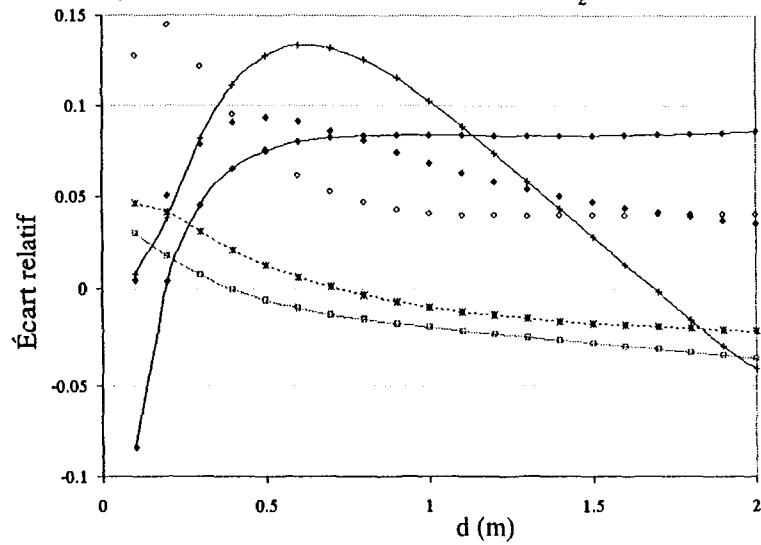
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO_2



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO_2

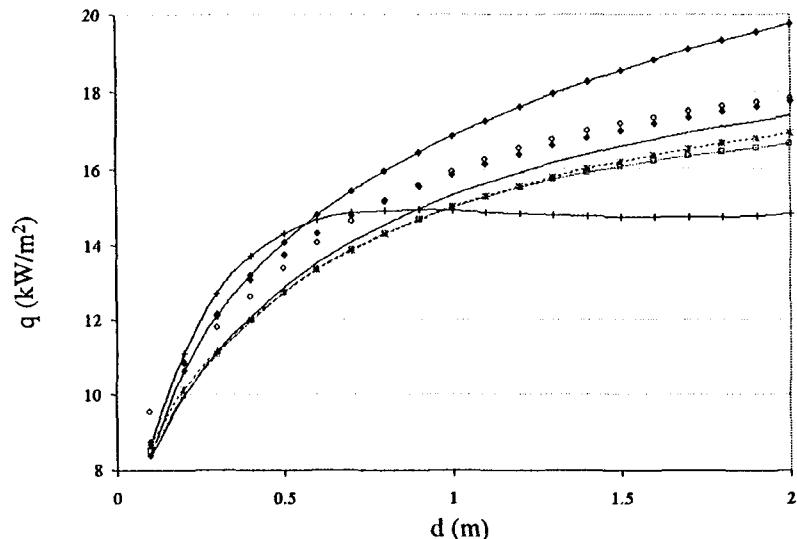


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO_2

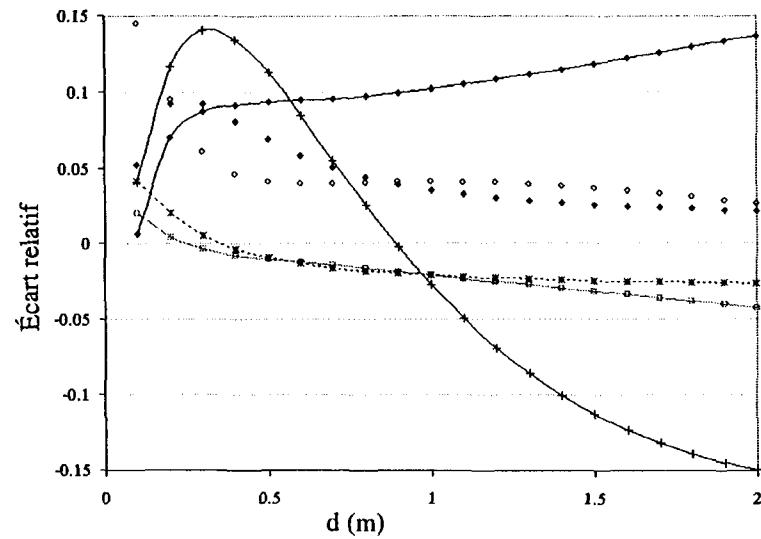


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO_2

Planche 6b: Milieu anisotherme et homogène

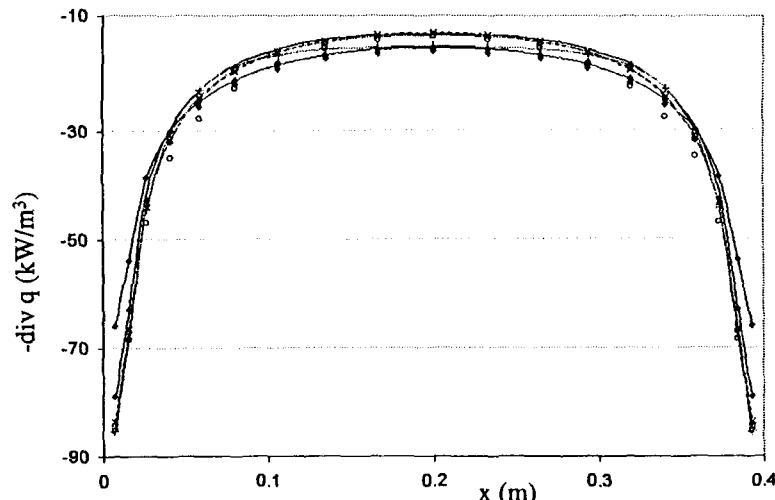


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% CO_2

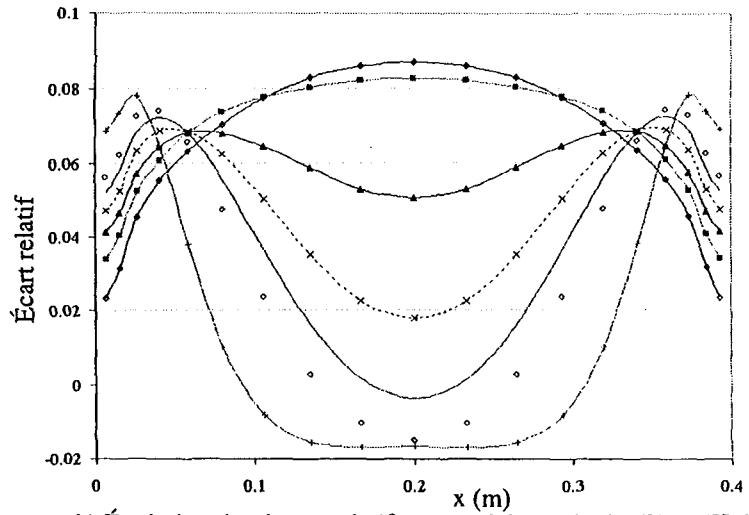


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% CO_2

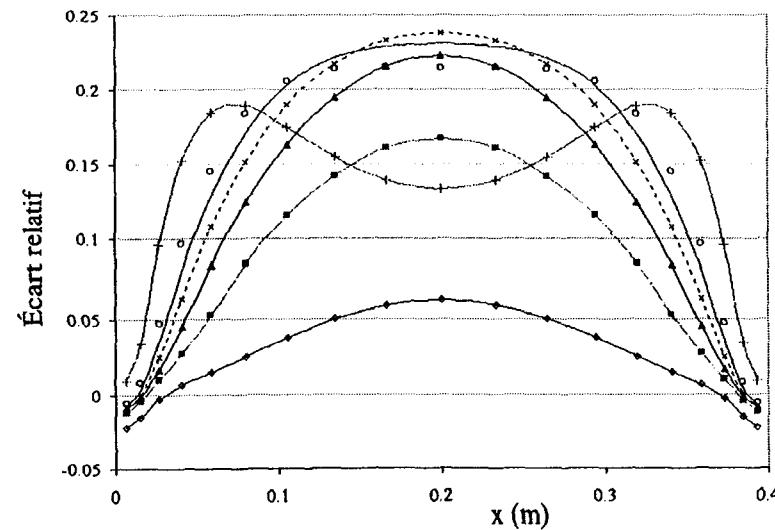
Planche 7a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=0,4$ m)



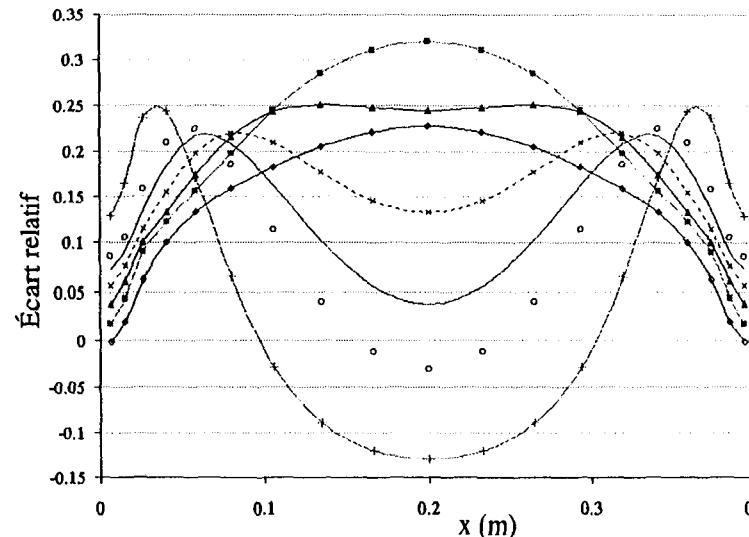
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

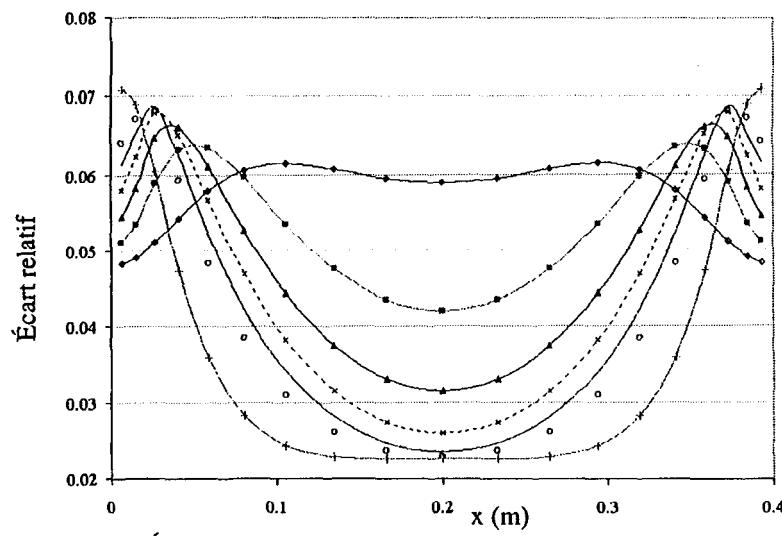


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

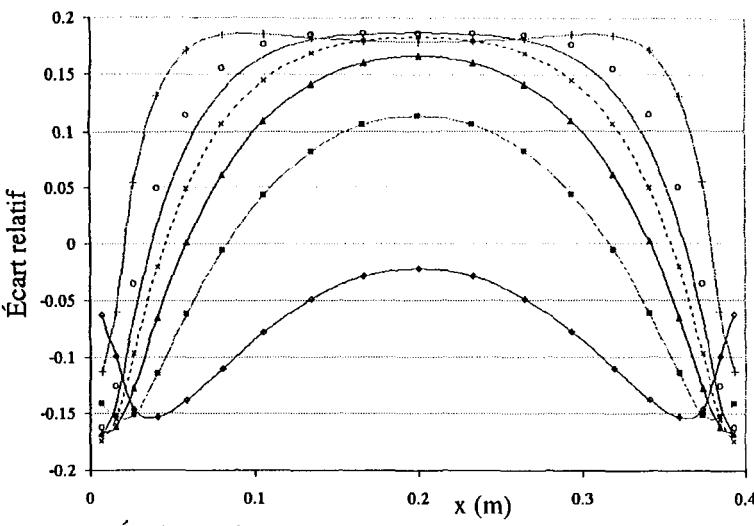


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

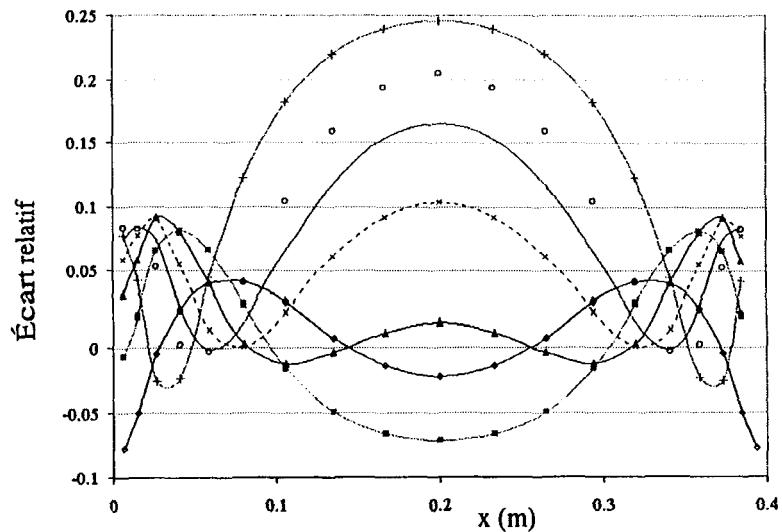
Planche 7b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=0,4$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

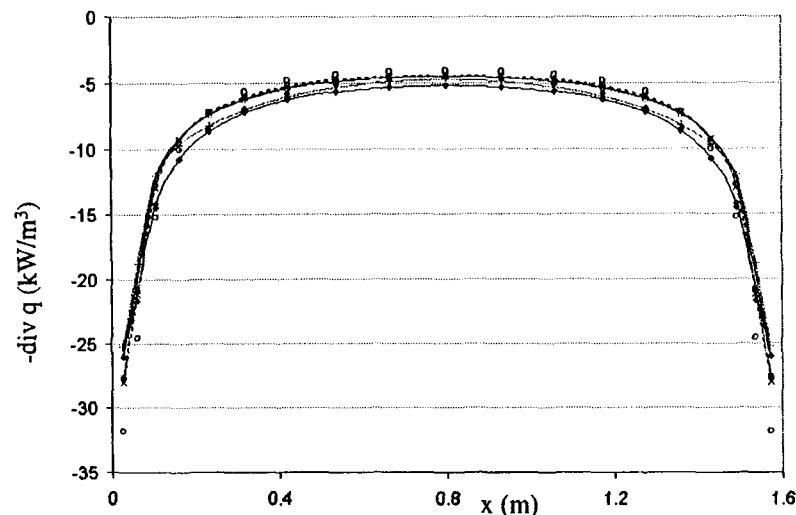


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

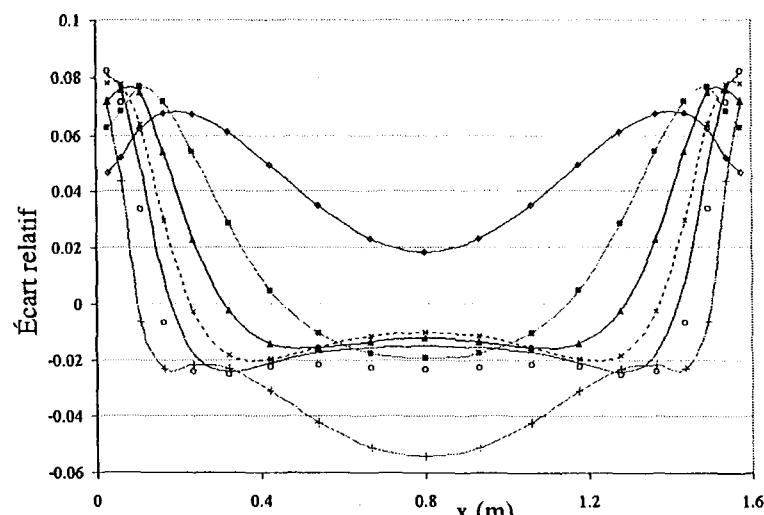


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

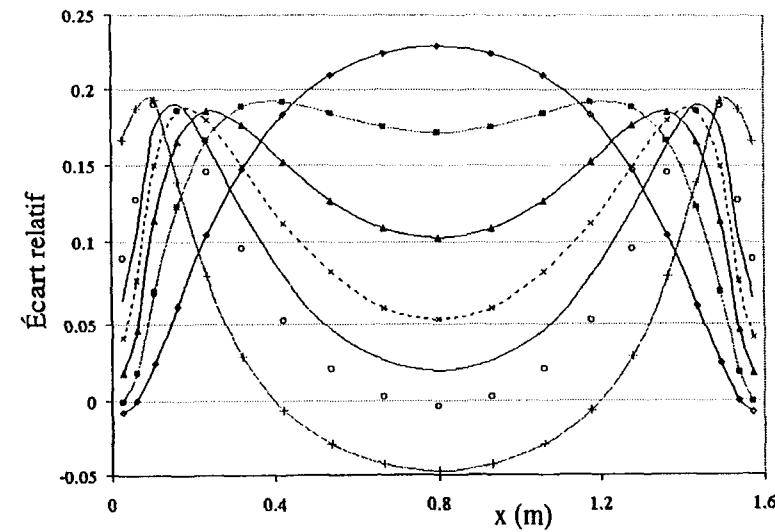
Planche 8a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=1,6$ m)



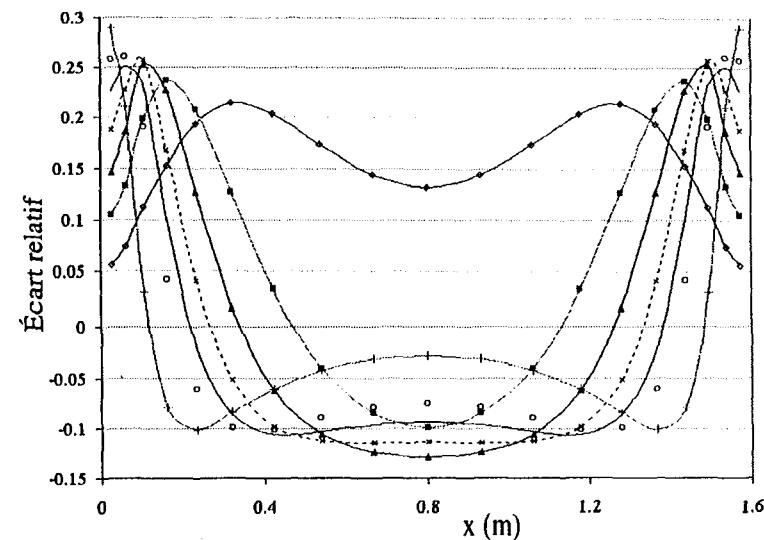
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

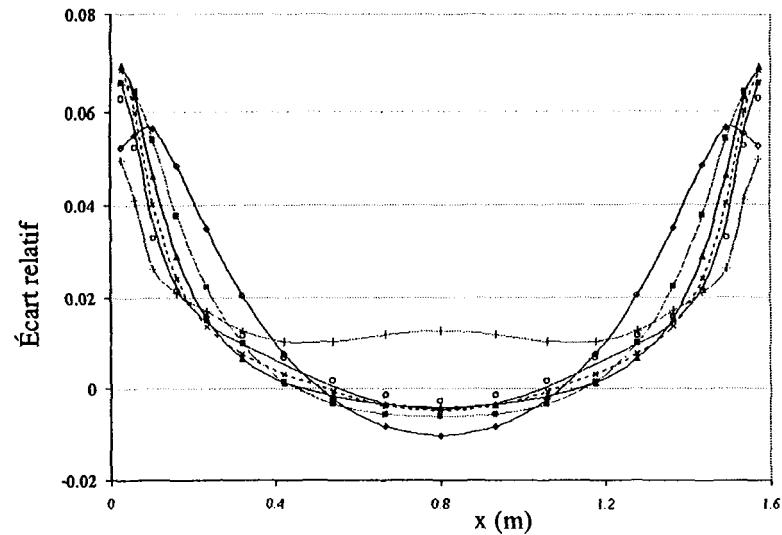


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

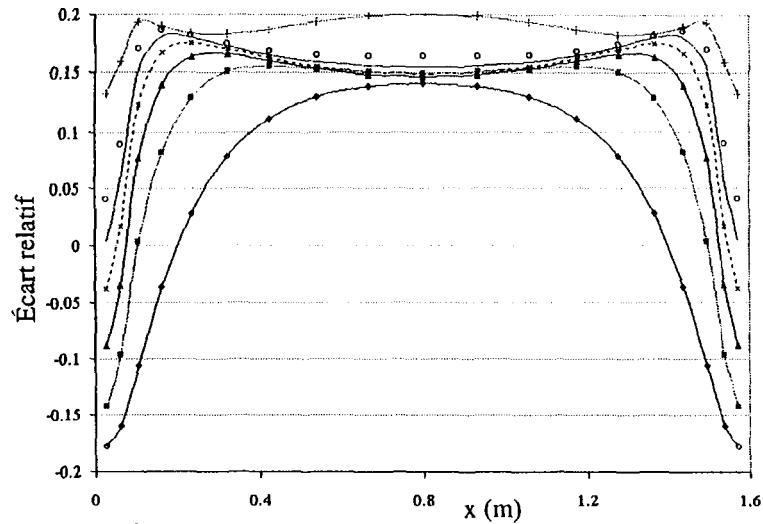


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

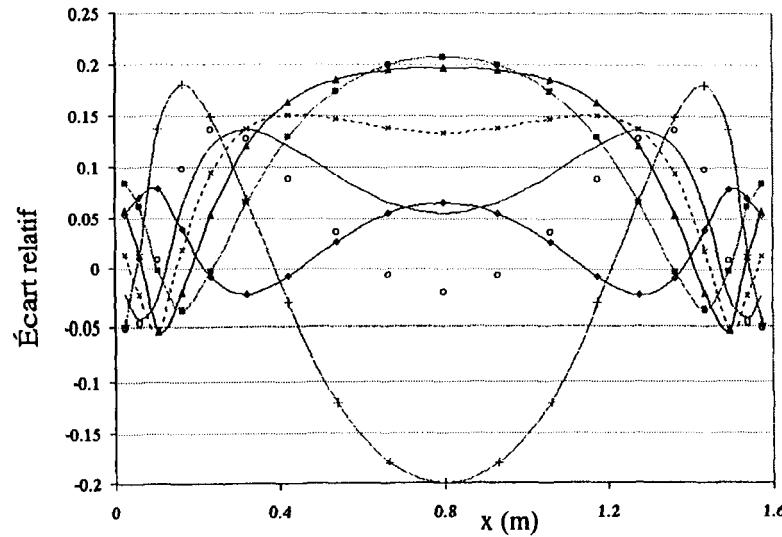
Planche 8b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=1,6$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

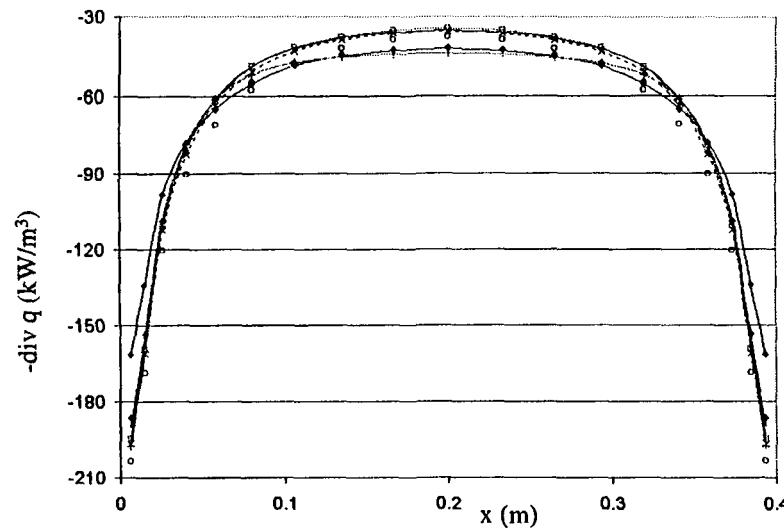


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

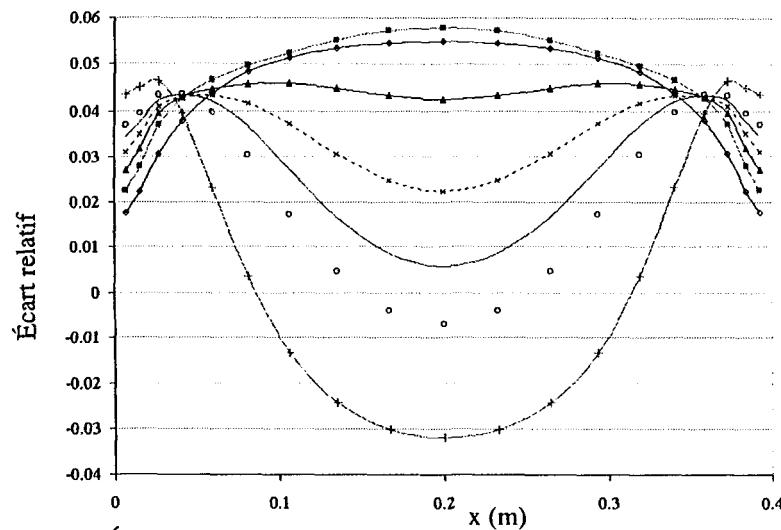


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

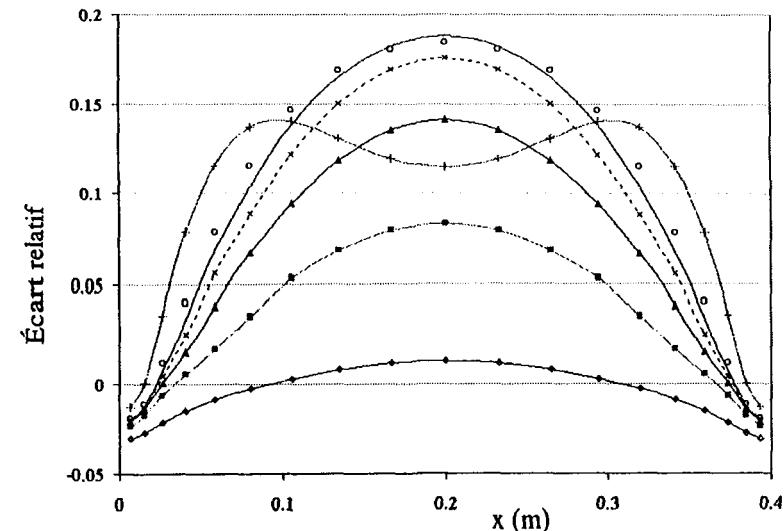
Planche 9a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=0,4$ m)



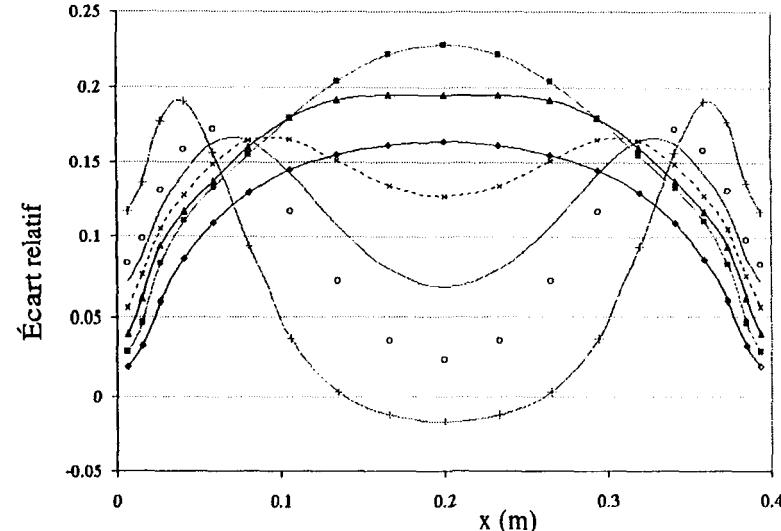
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

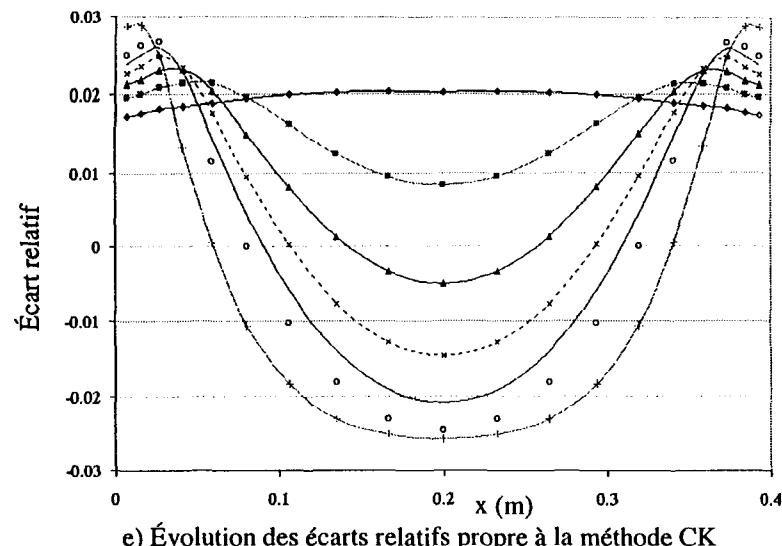


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

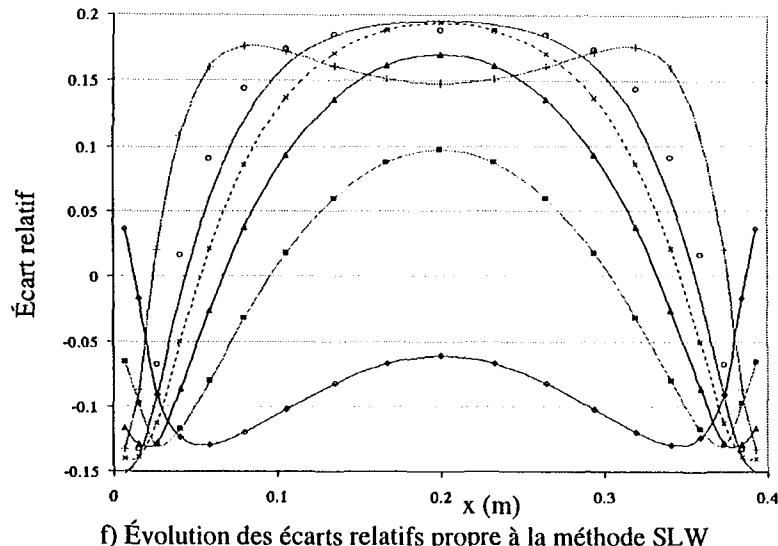


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

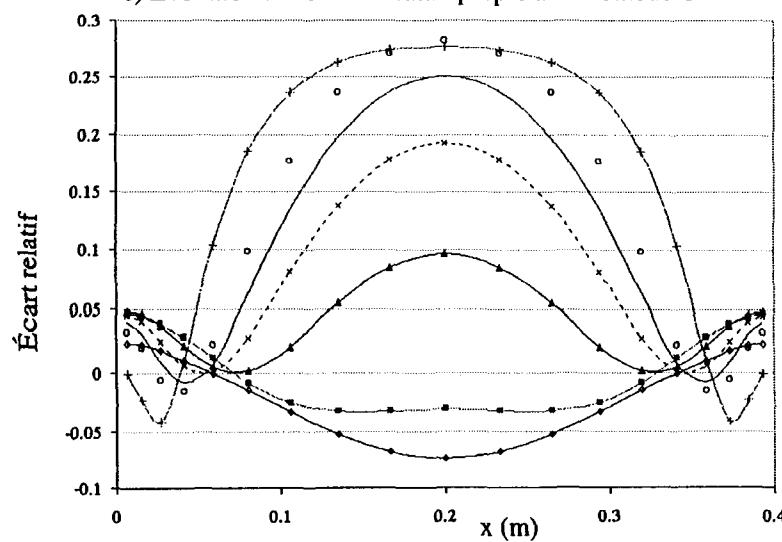
Planche 9b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=0,4$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

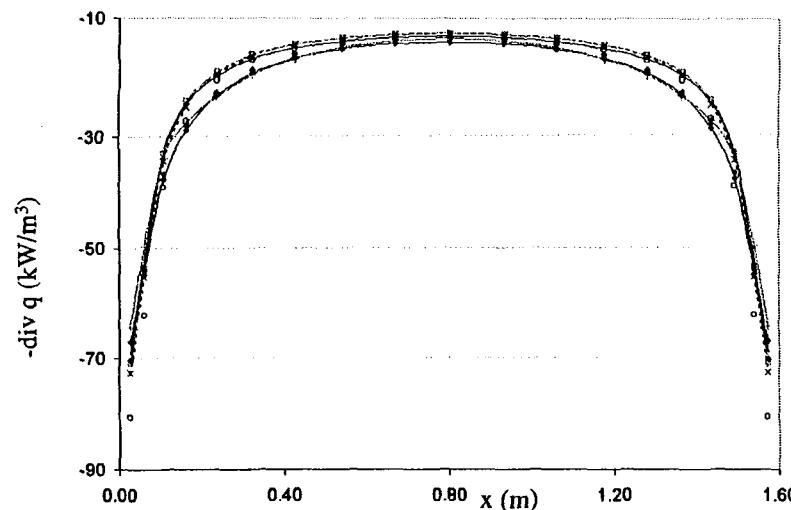


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

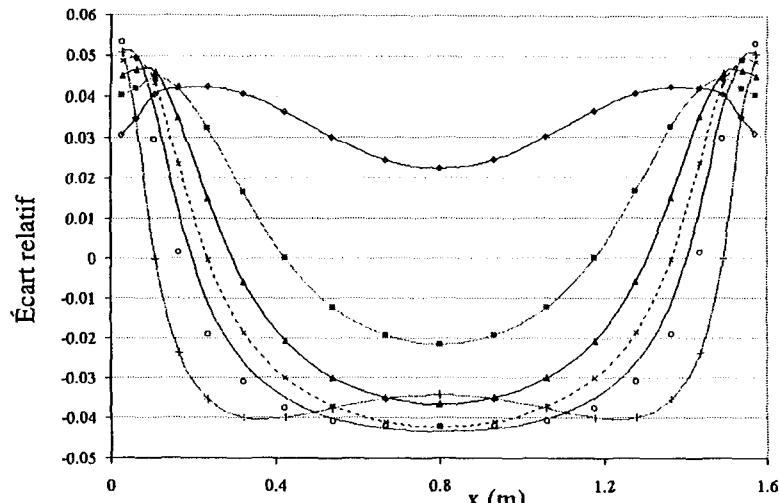


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

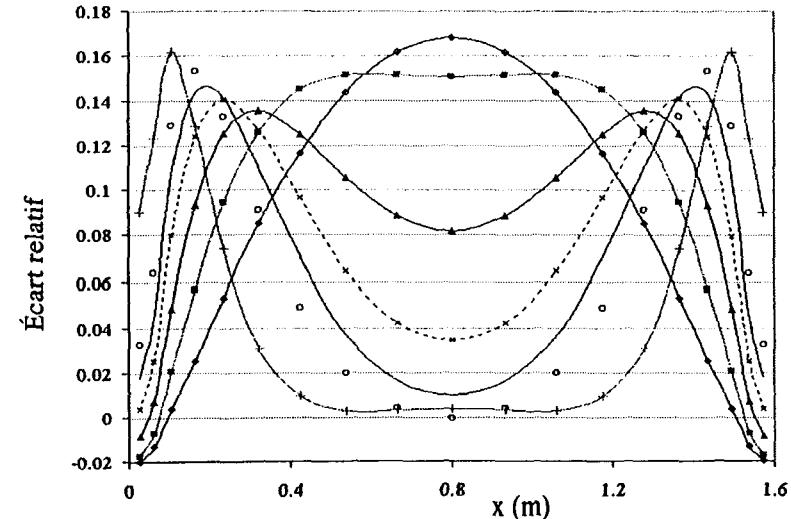
Planche 10a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=1,6$ m)



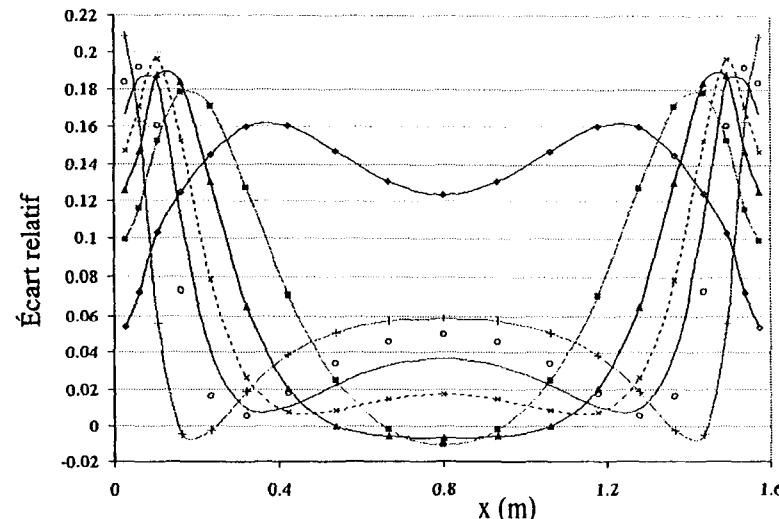
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

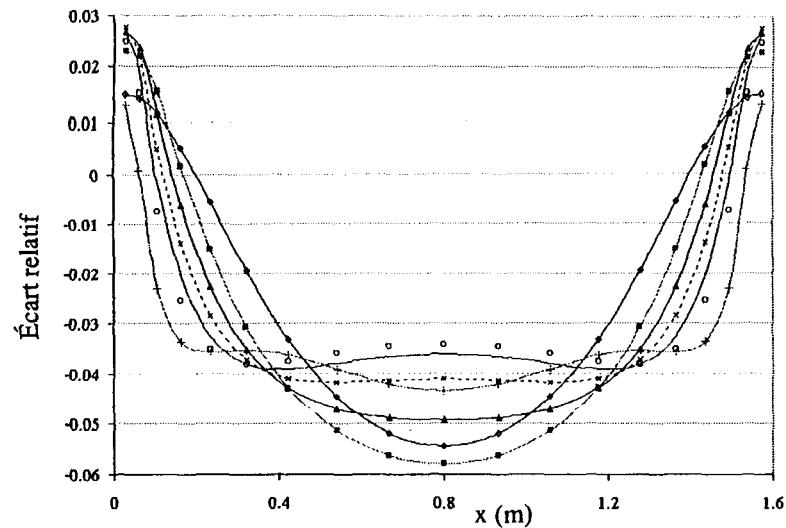


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

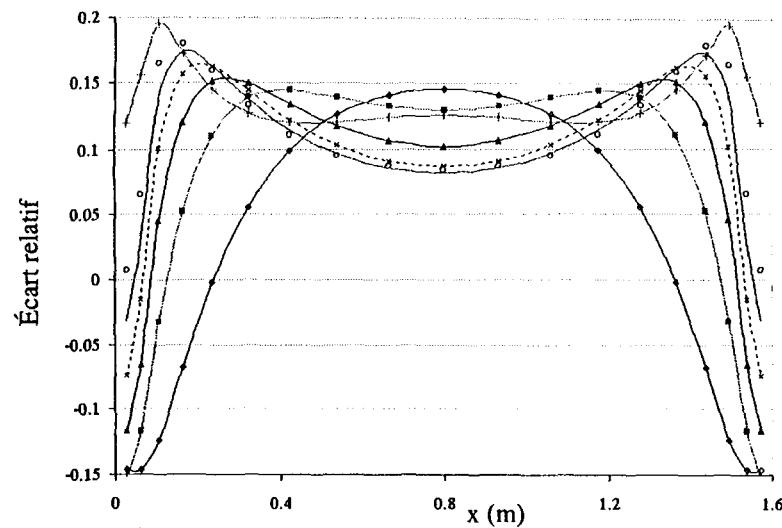


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

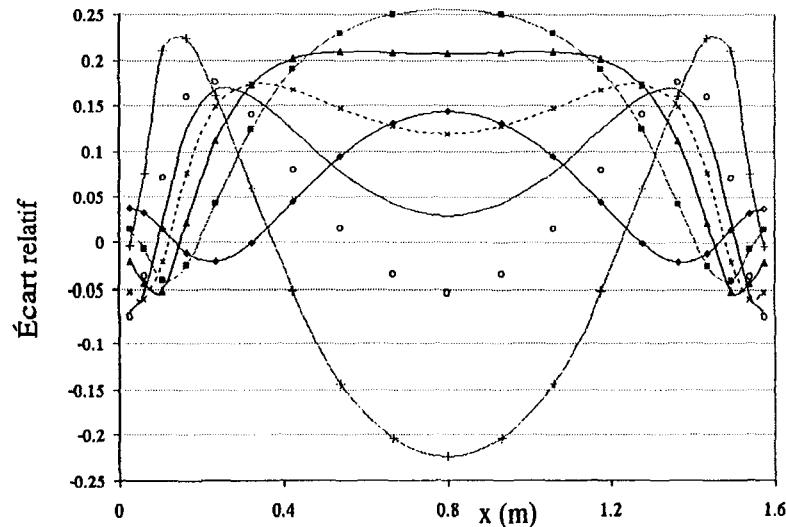
Planche 10b: Milieu isotherme (1300K) et homogène ($d=1,6$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

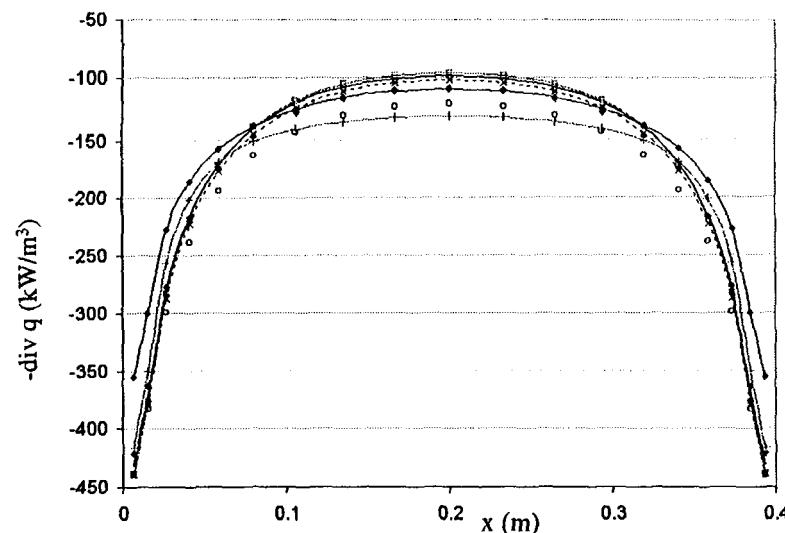


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

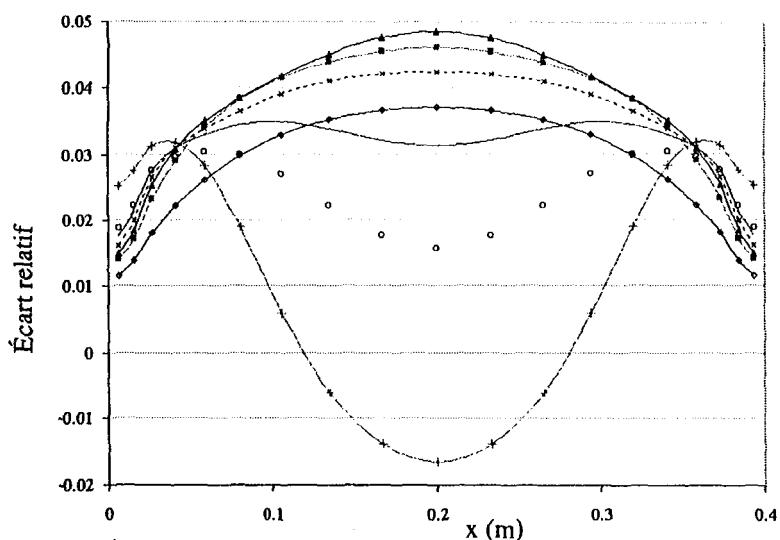


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

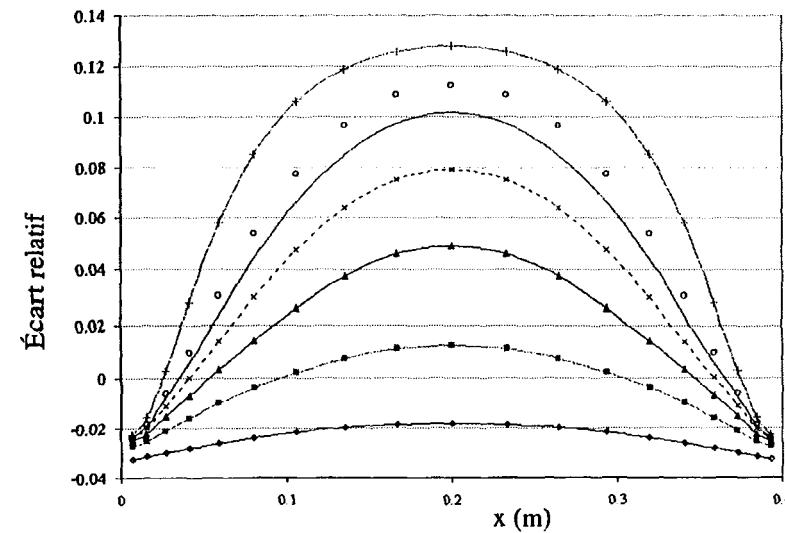
Planche 11a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=0,4$ m)



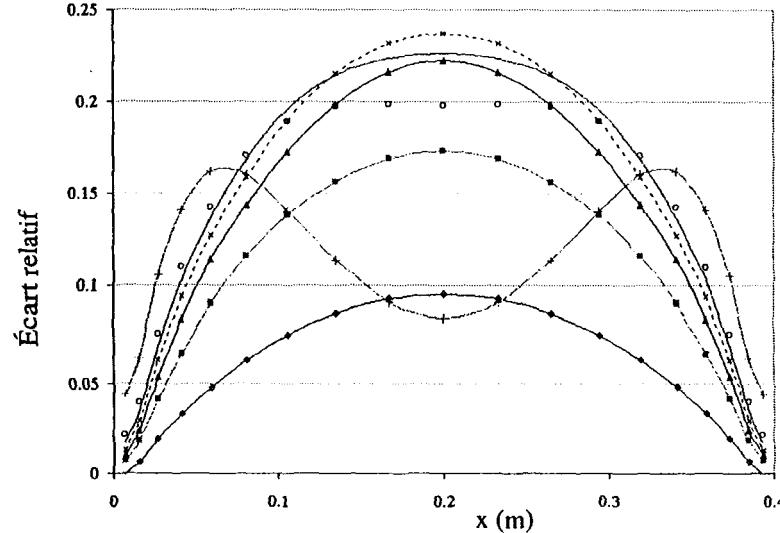
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

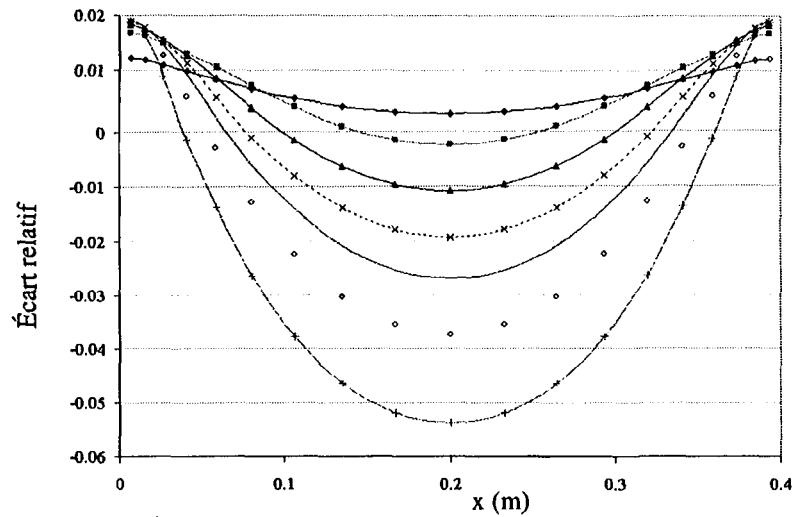


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

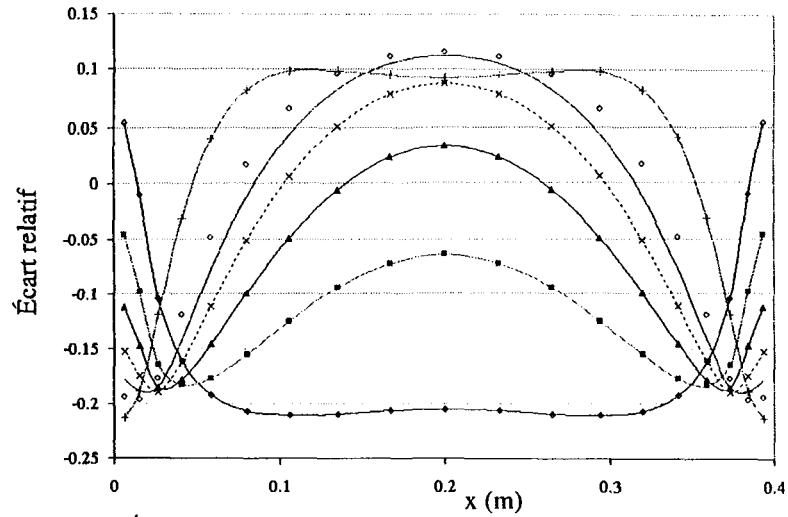


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

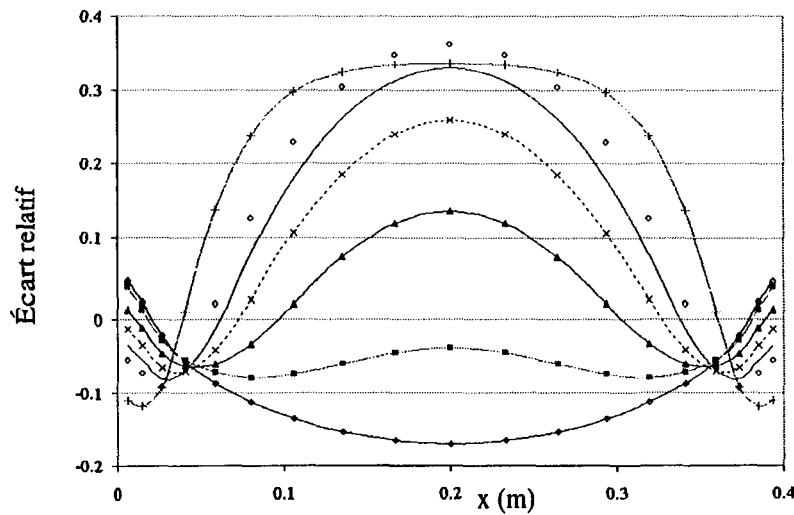
Planche 11b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=0,4$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

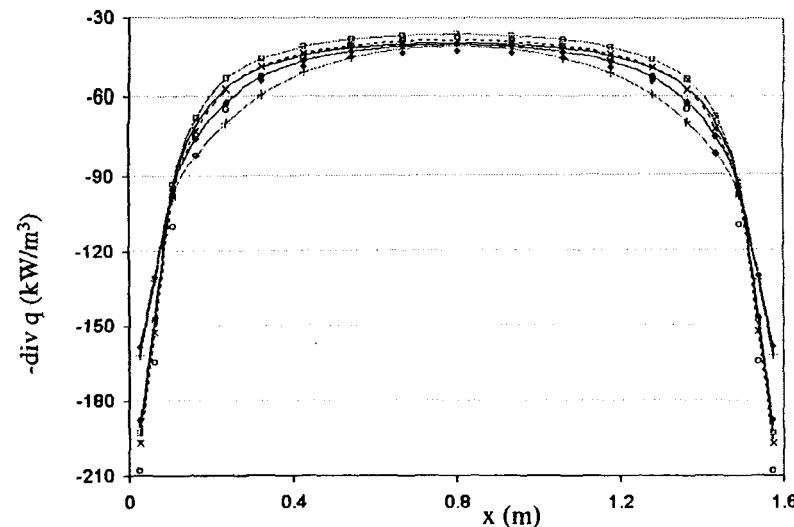


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

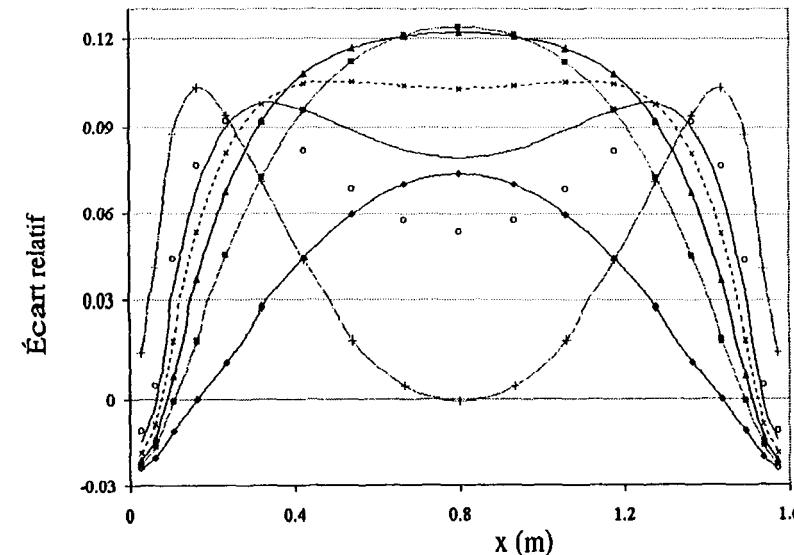


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

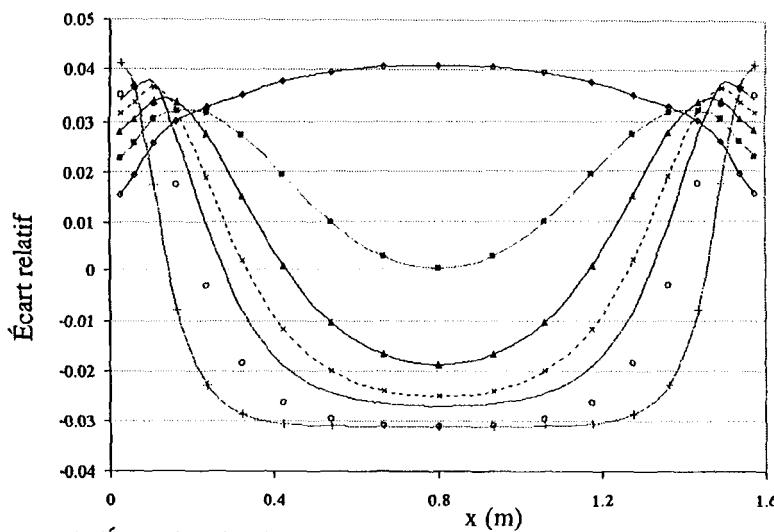
Planche 12a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=1,6$ m)



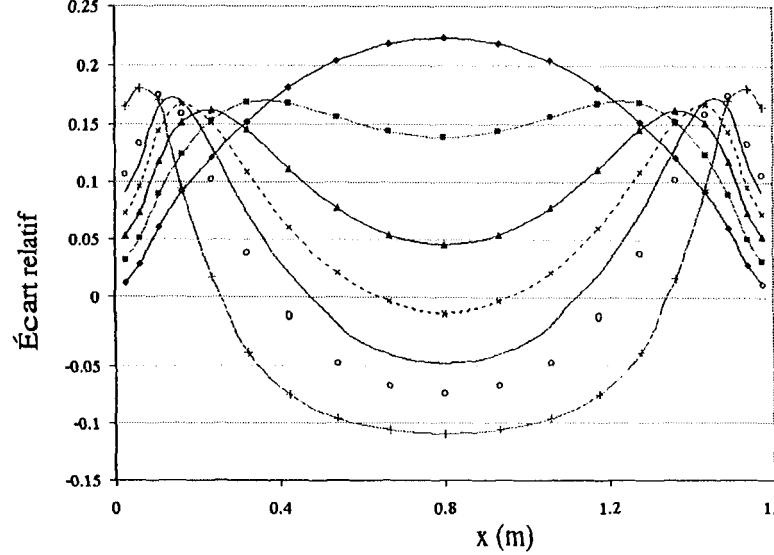
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT



d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 12b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=1,6$ m)

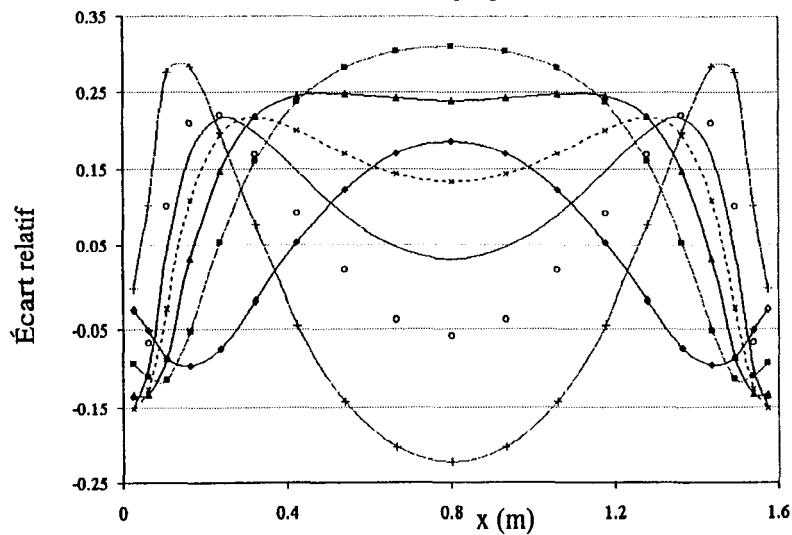
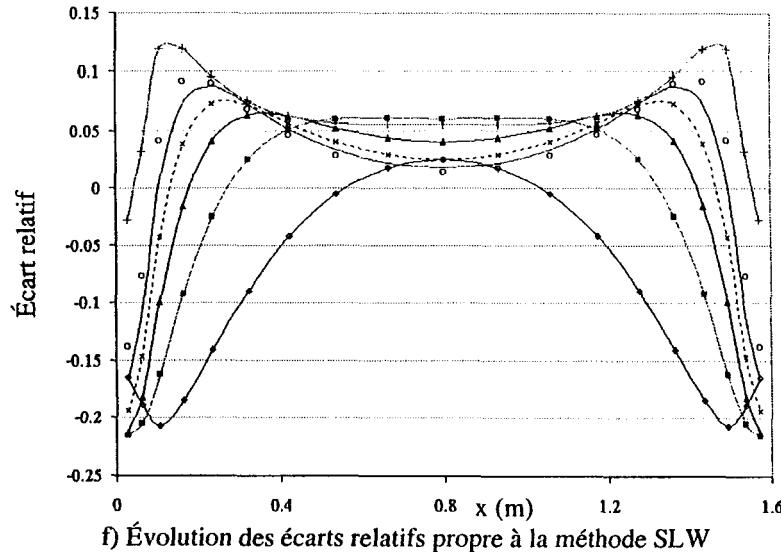
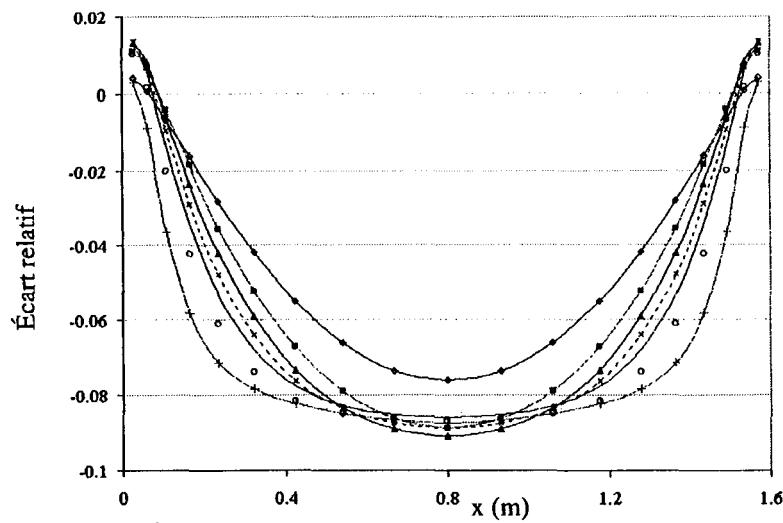
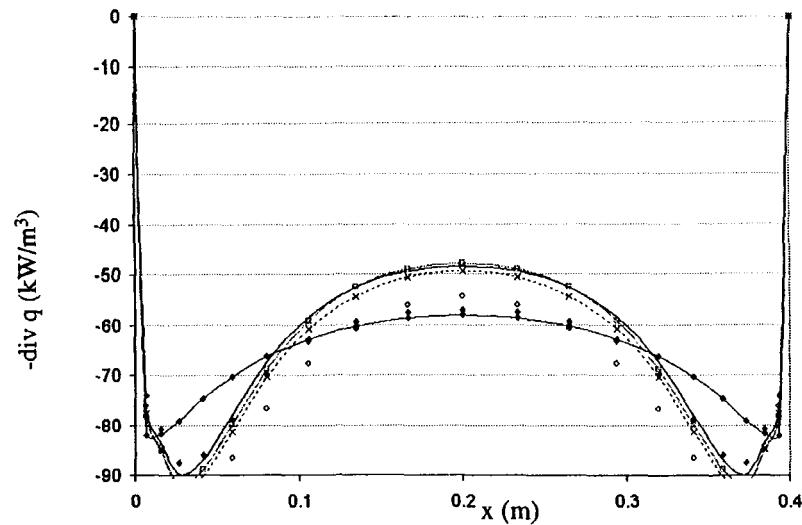
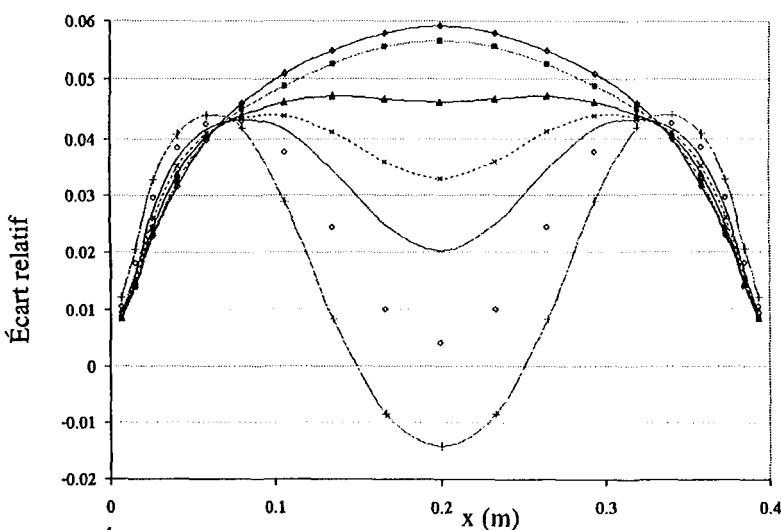


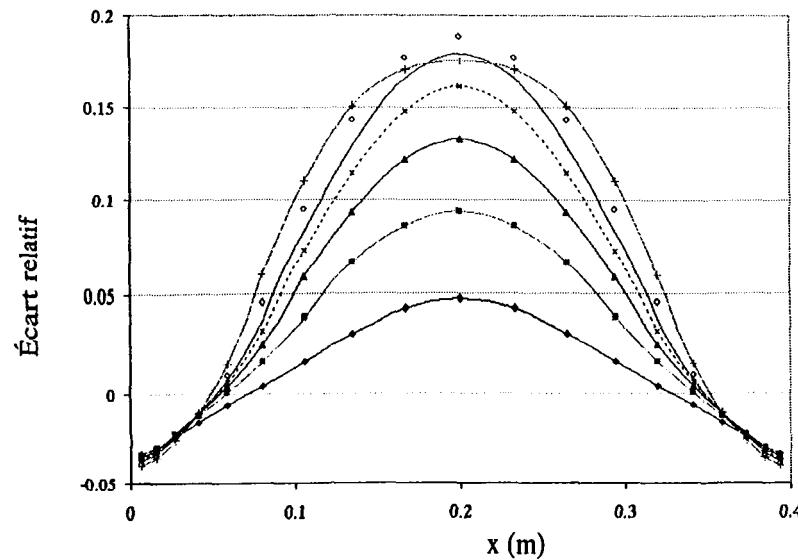
Planche 13a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=0,4$ m)



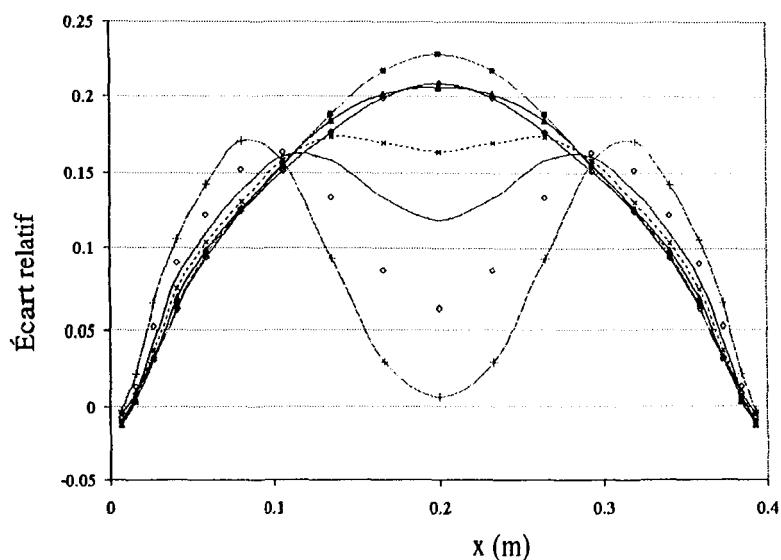
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

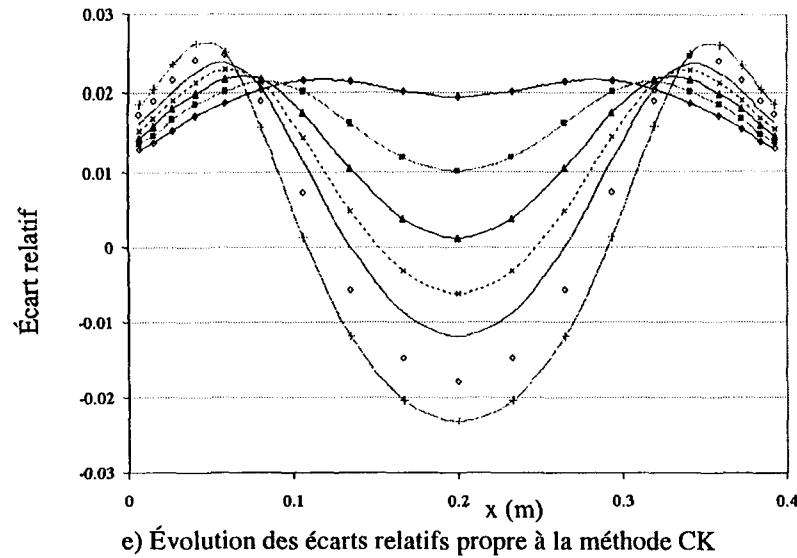


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

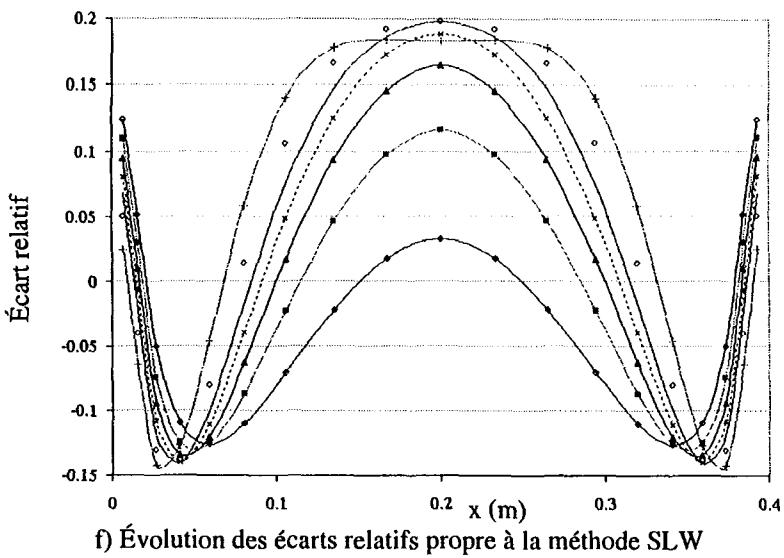


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 13b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=0,4$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

Planche 14a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=1,6$ m)

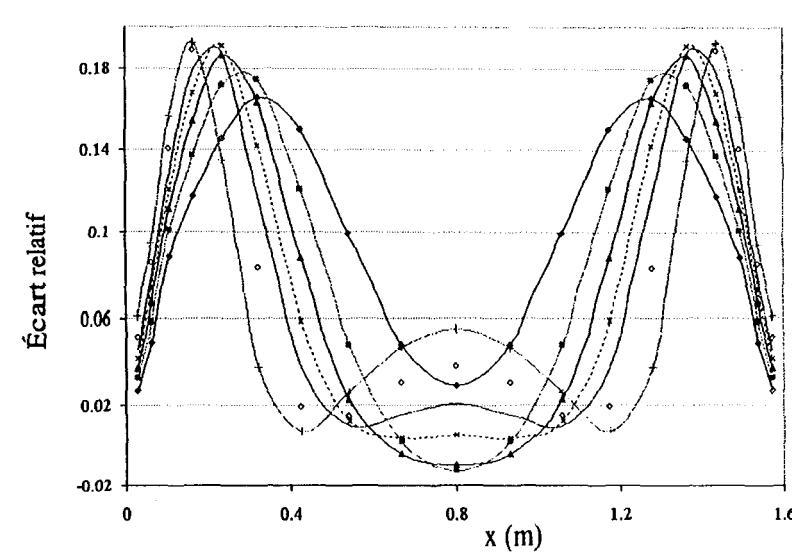
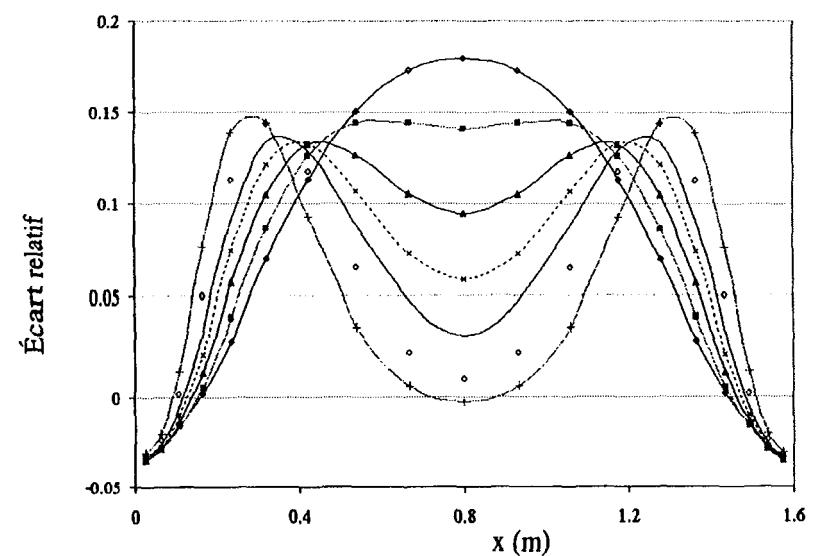
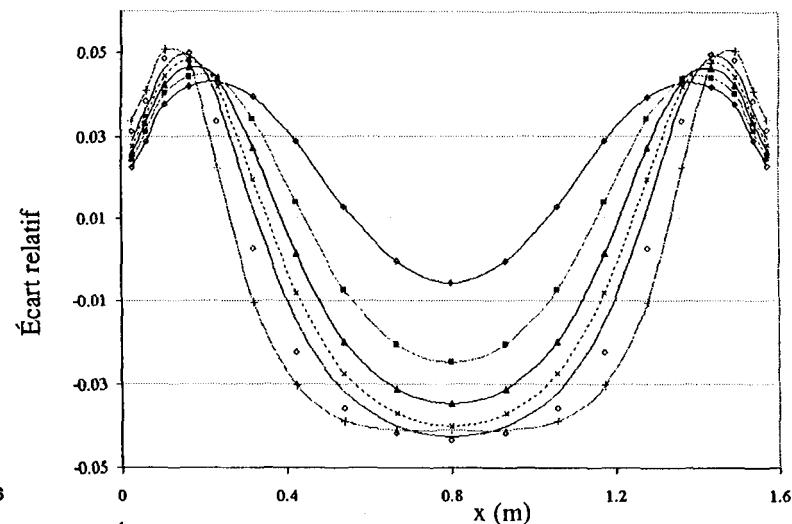
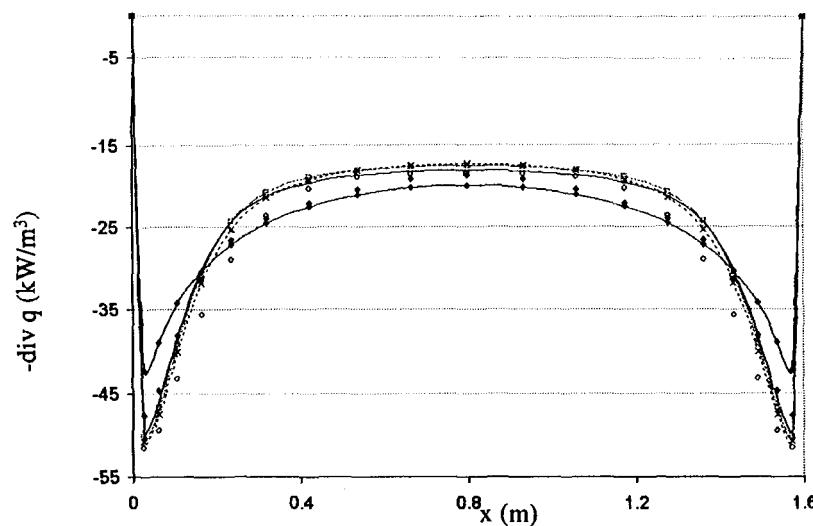
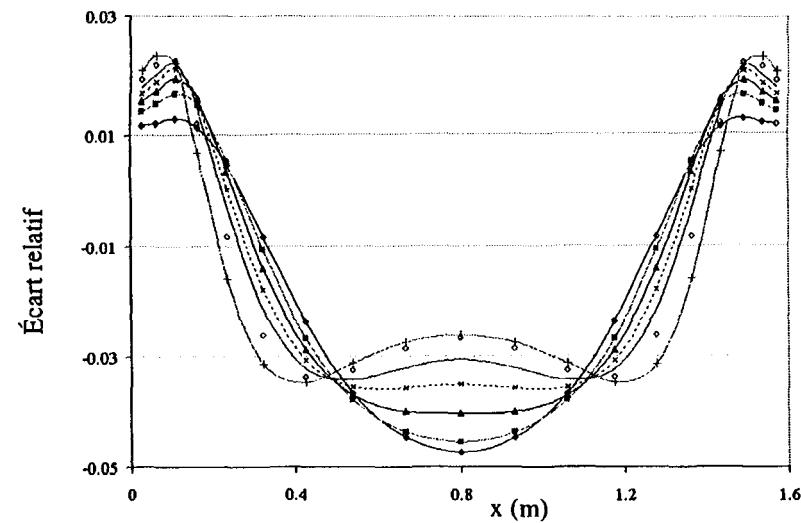
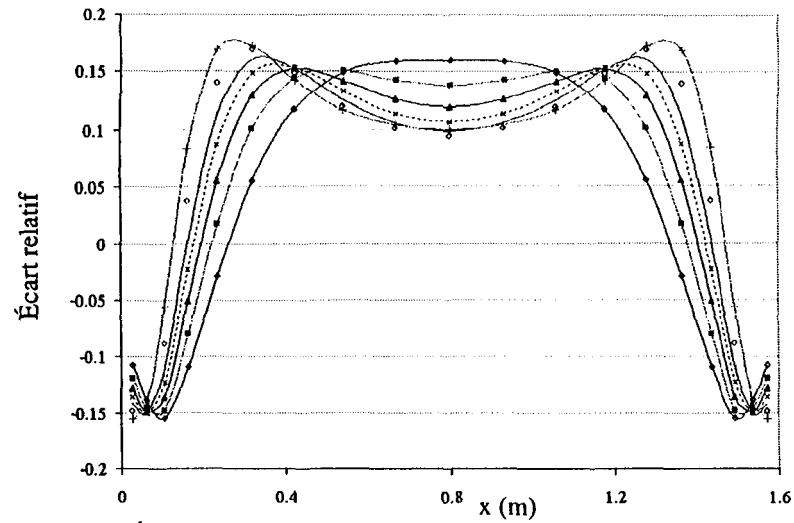


Planche 14b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=1,6$ m)

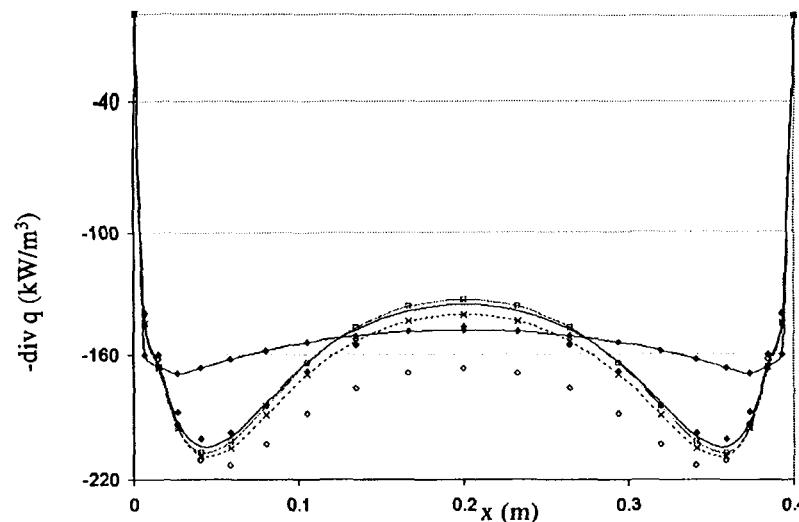


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

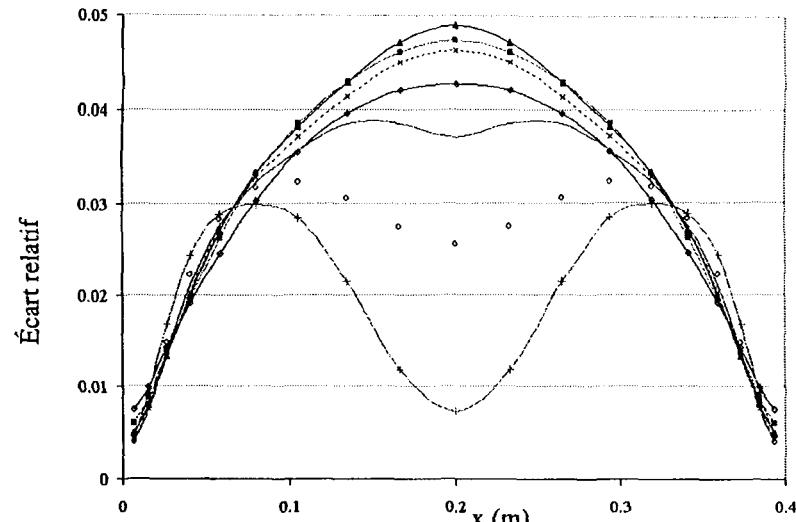


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

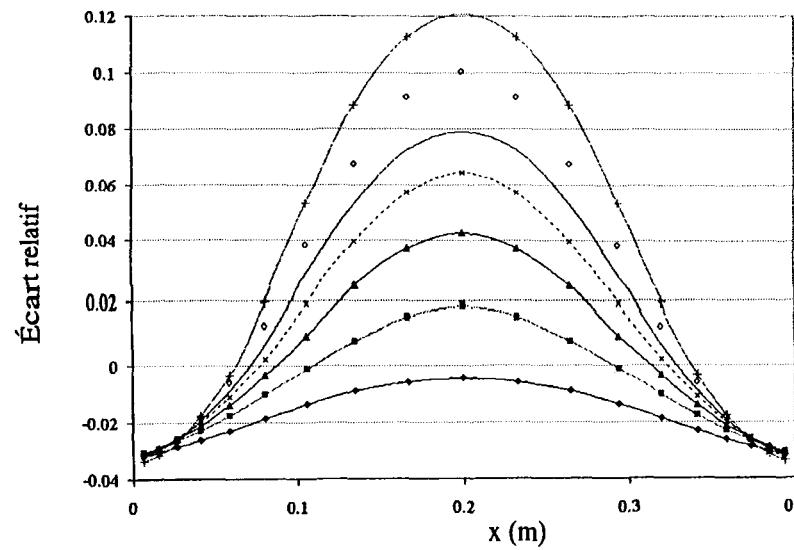
Planche 15a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=0.4$ m)



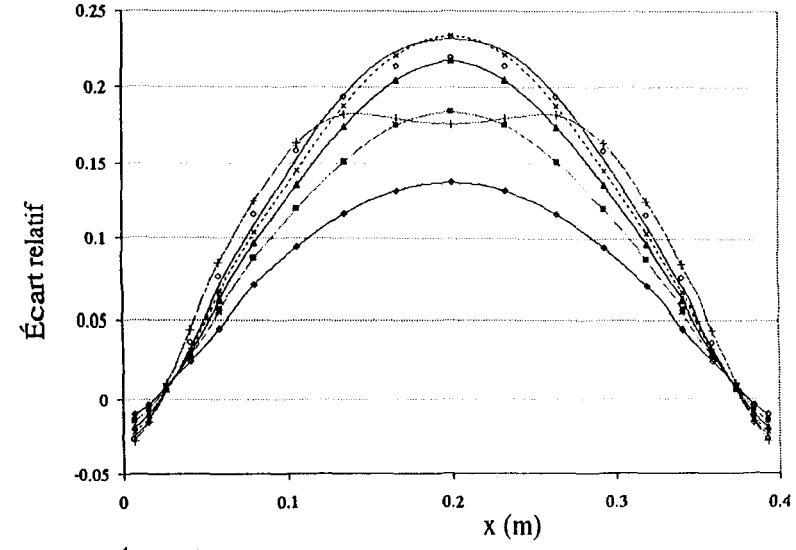
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

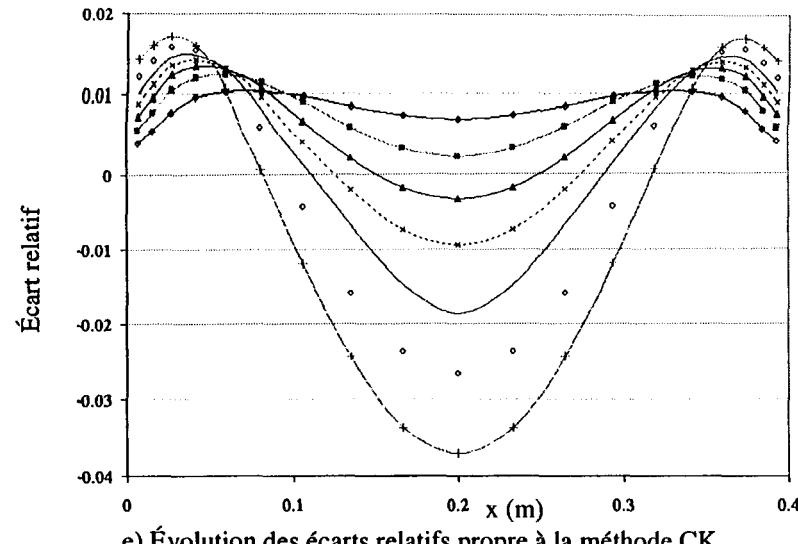


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

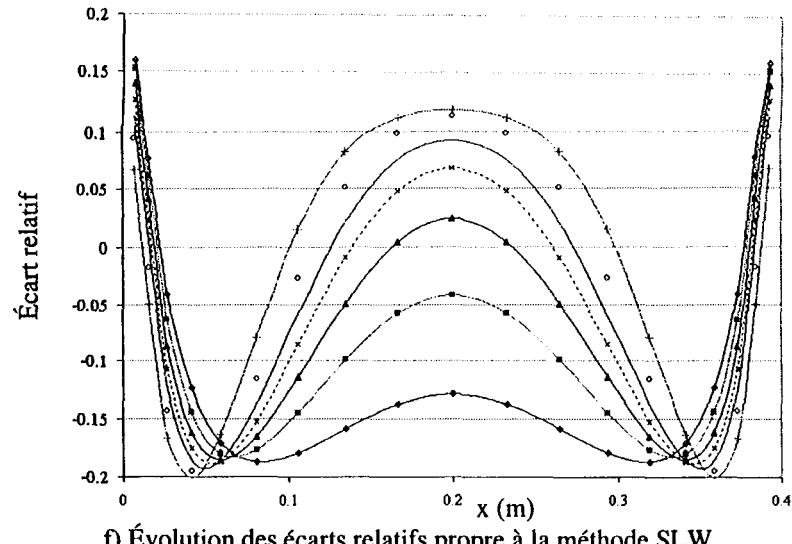


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 15b: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=0,4$ m)

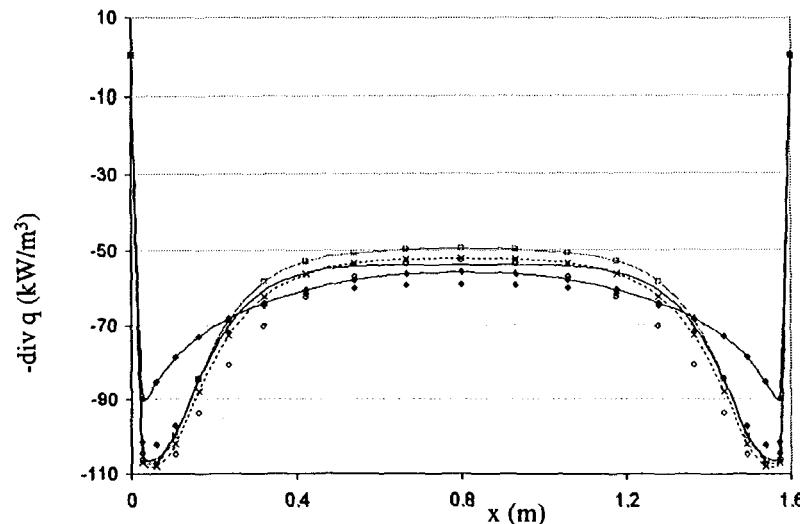


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

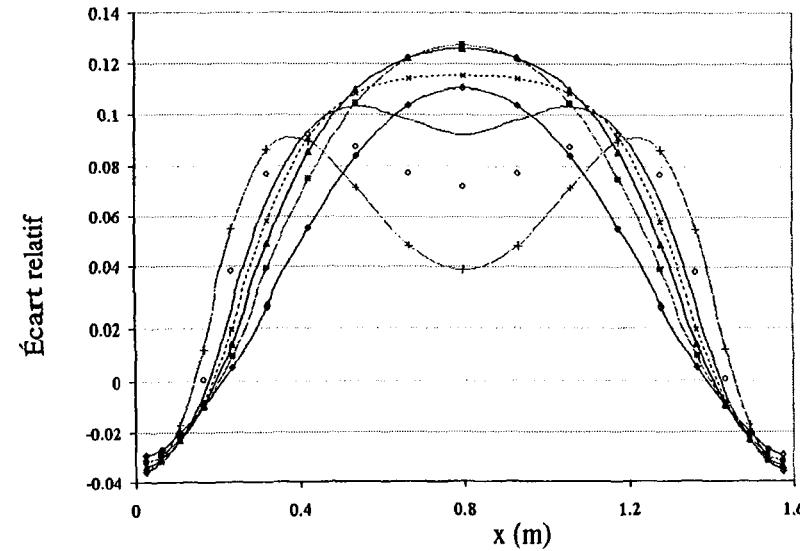


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

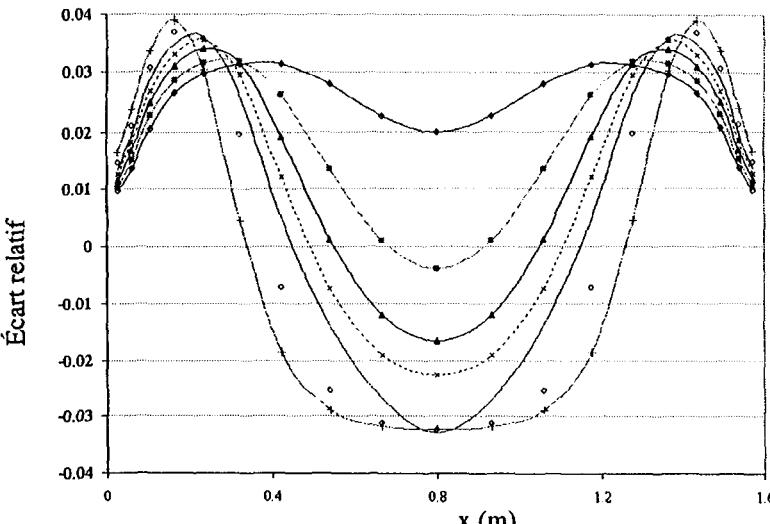
Planche 16a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=1.6$ m)



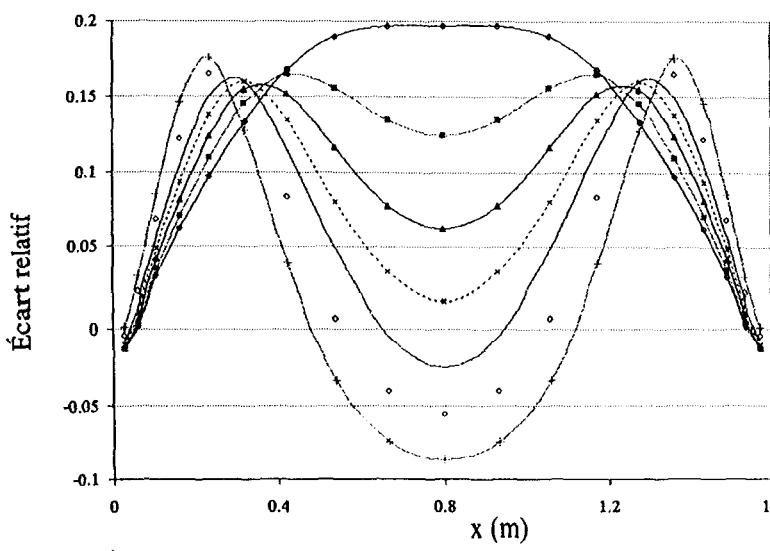
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

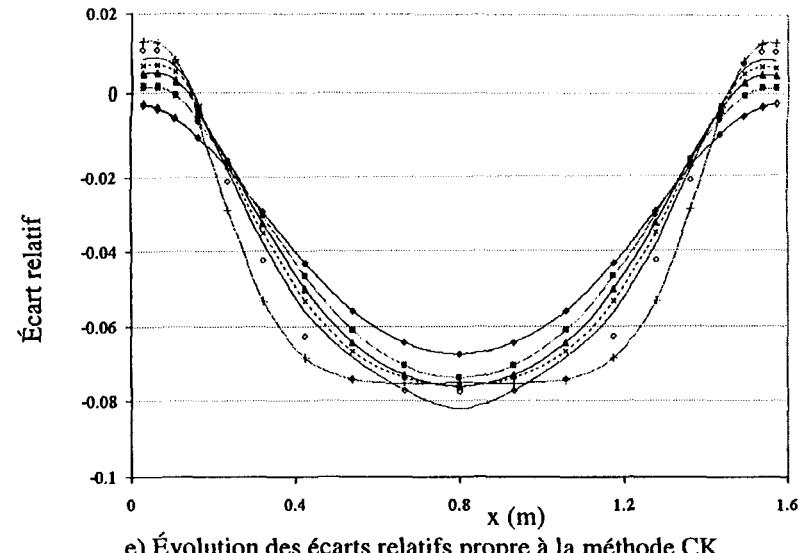


b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

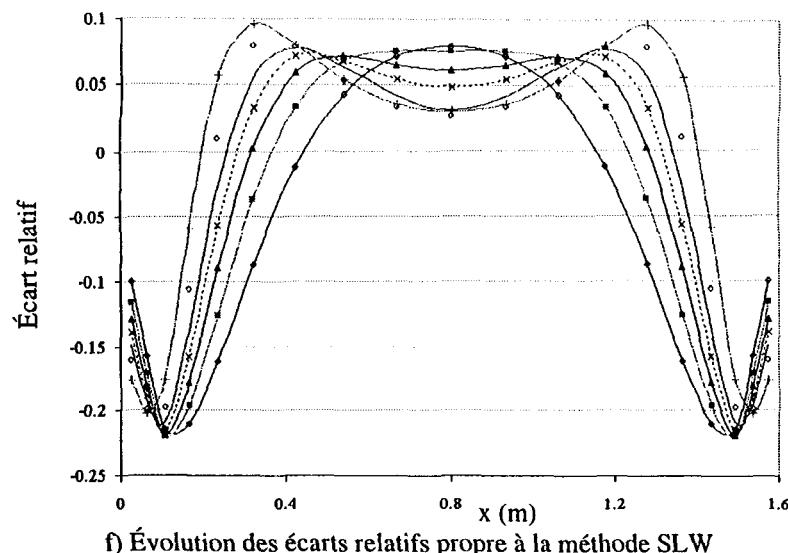


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 16b: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=1.6$ m)

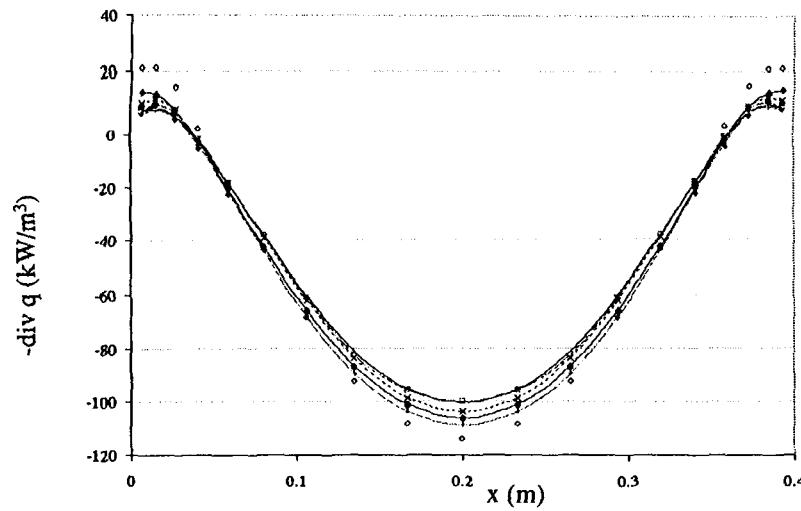


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

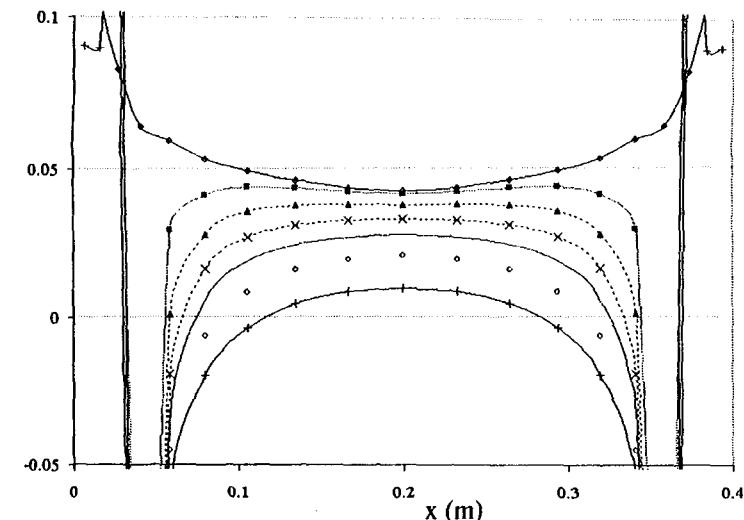


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

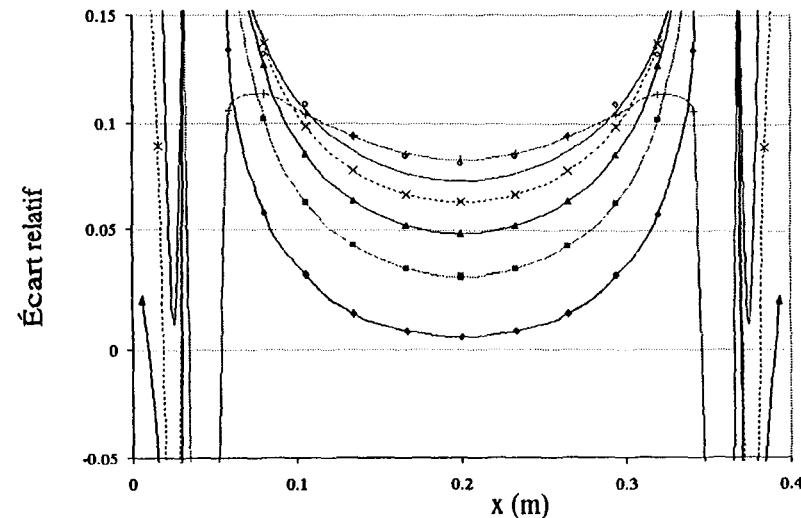
Planche 17a: Milieu anisotherme et homogène ($d=0,4$ m)



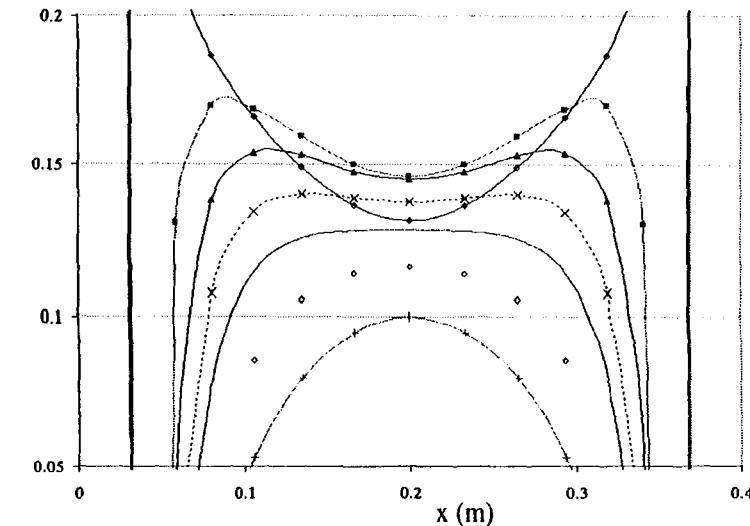
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

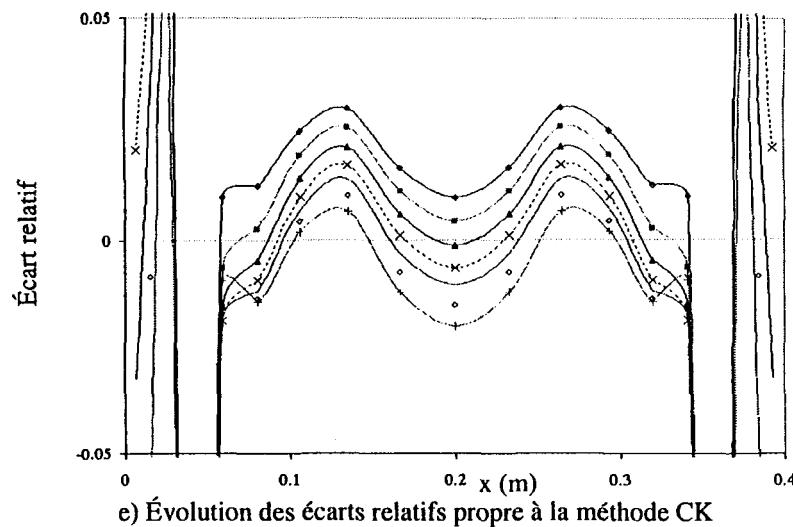


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

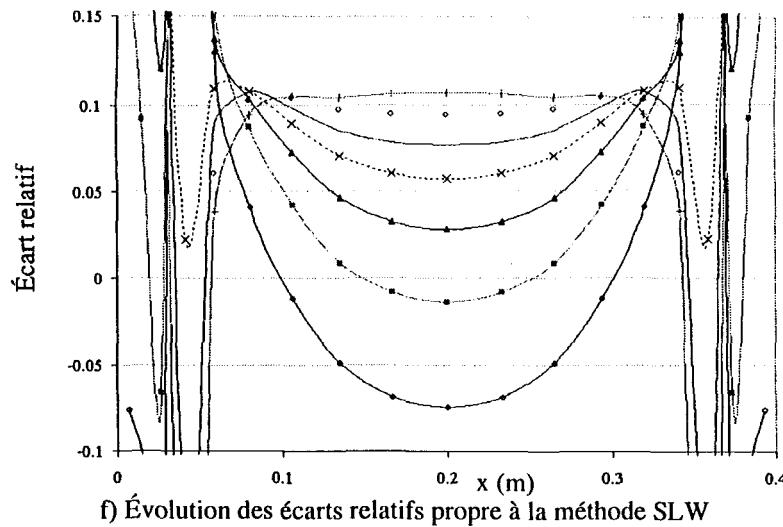


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

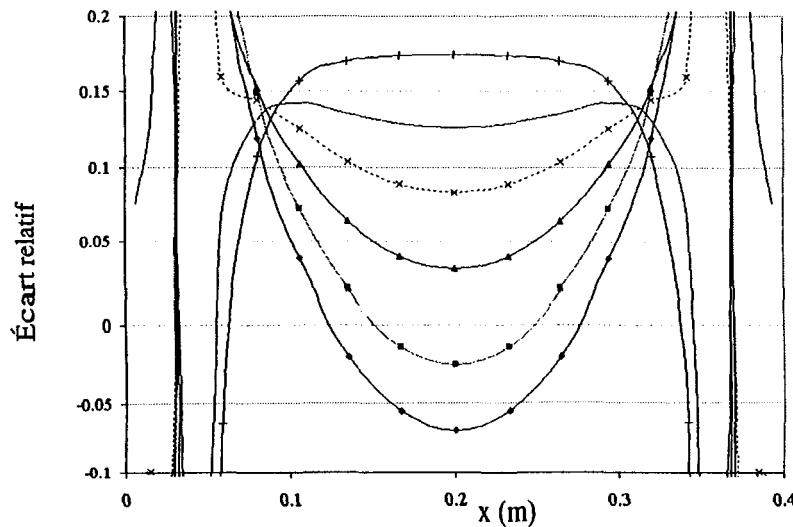
Planche 17b: Milieu anisotherme et homogène ($d=0,4$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

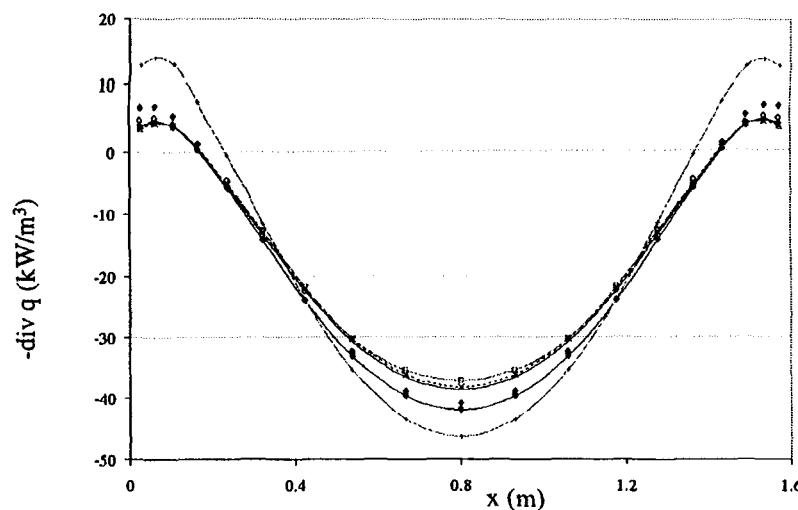


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

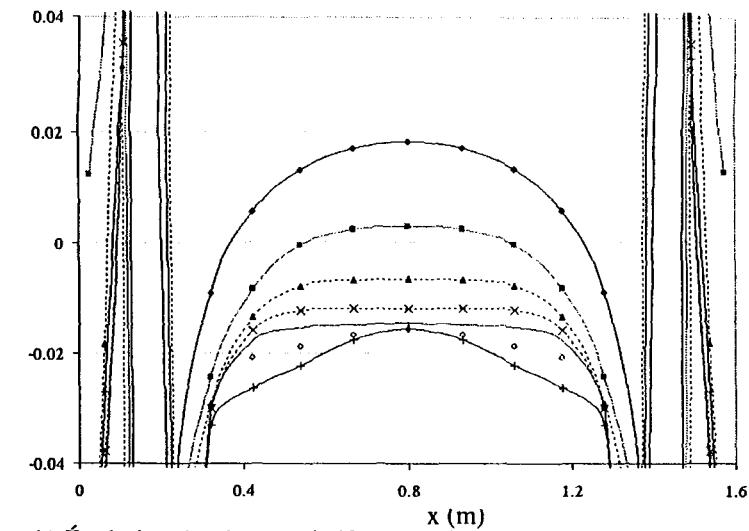


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

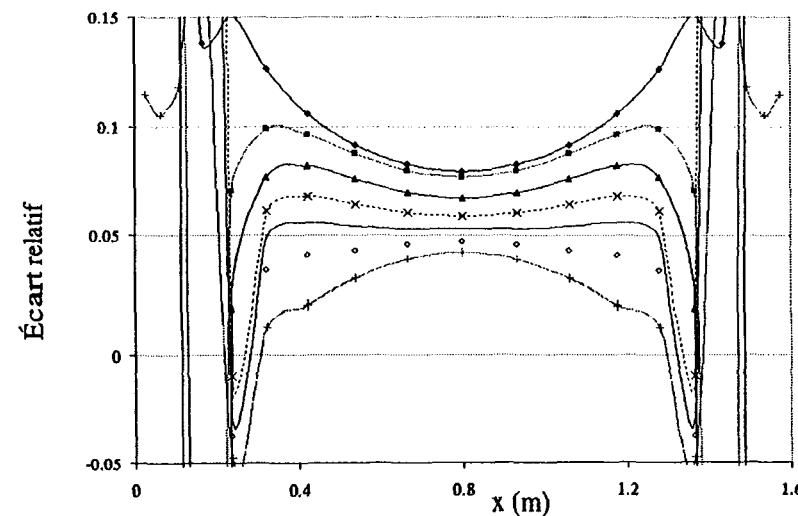
Planche 18a: Milieu anisotherme et homogène ($d=1,6$ m)



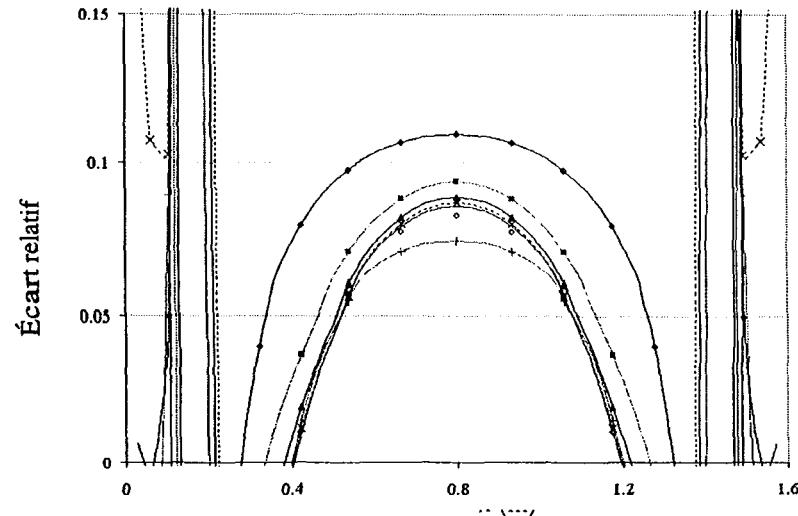
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

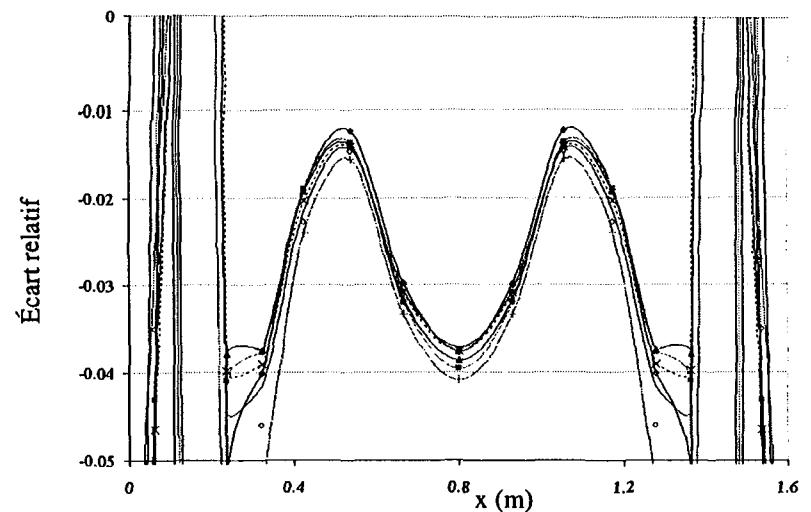


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

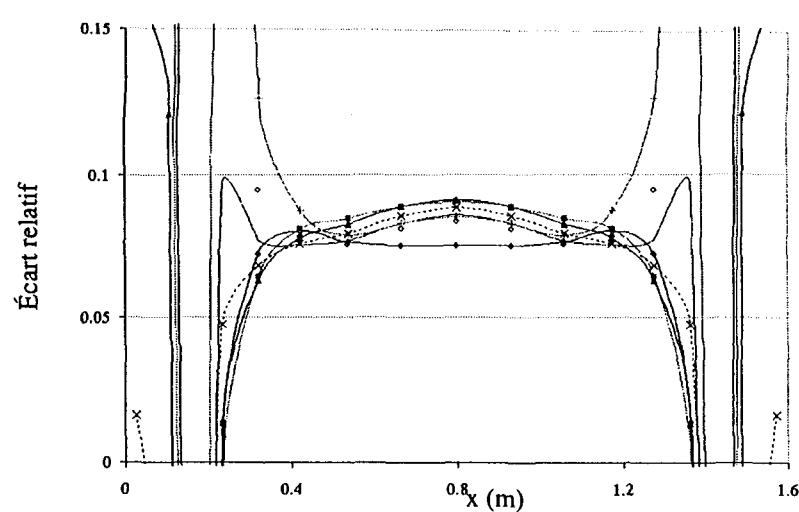


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

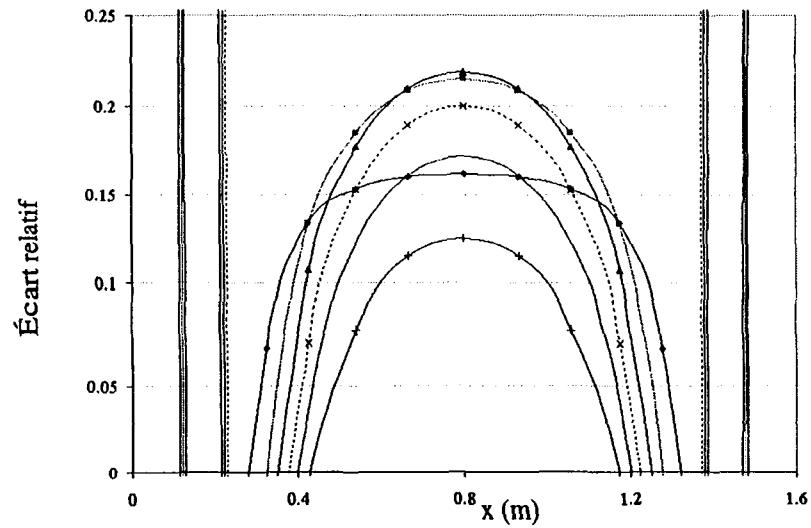
Planche 18b: Milieu anisotherme et homogène ($d=1,6$ m)



e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



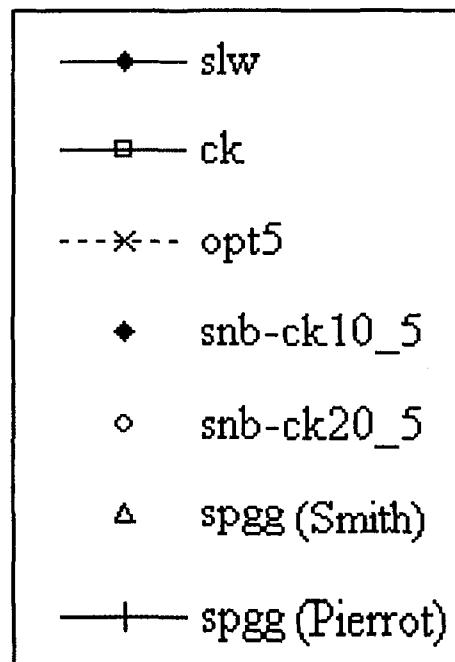
f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW



g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

Planches 19 à 36: Comparaisons avec le H₂O

Légende utilisée pour les résultats des flux pariétaux



Légende utilisée pour les résultats de la divergence du flux

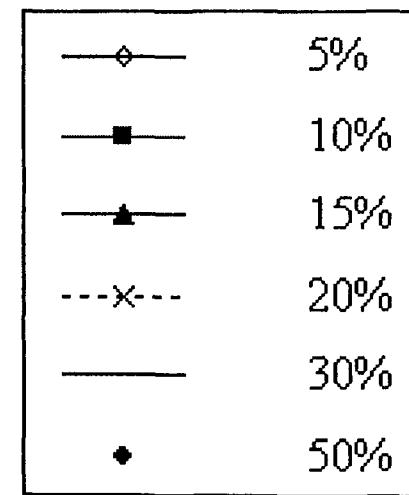
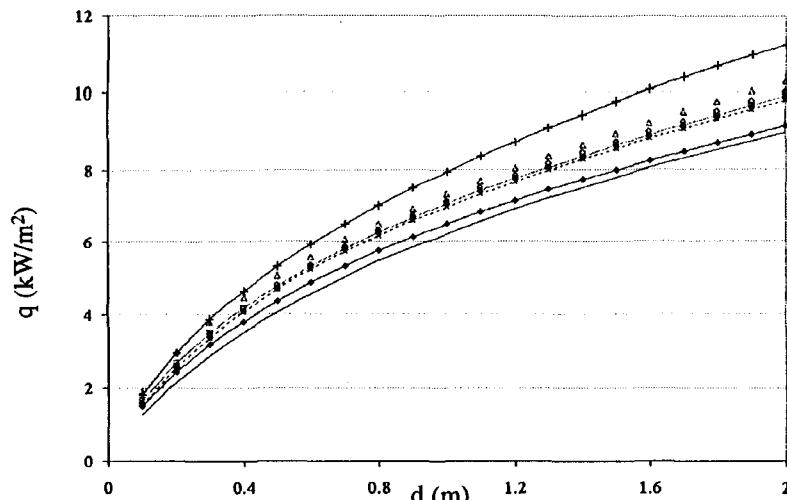
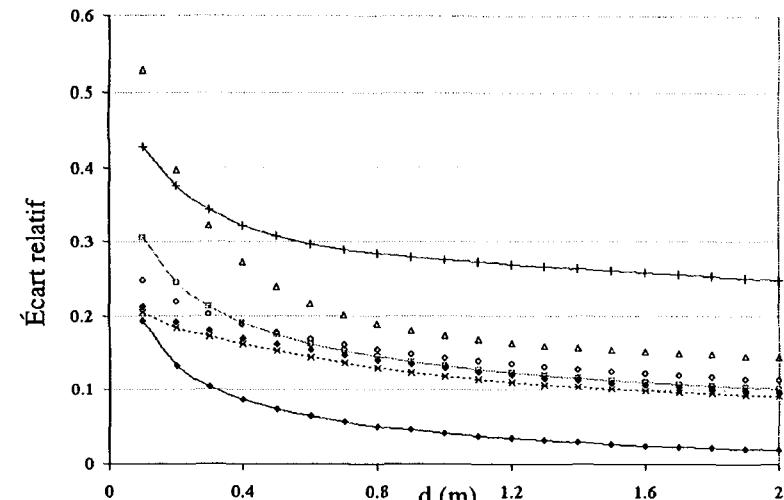


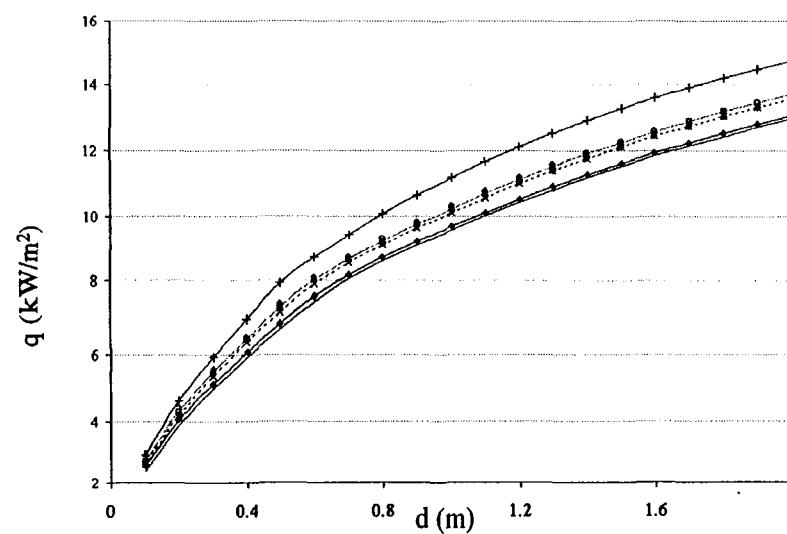
Planche 19a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène



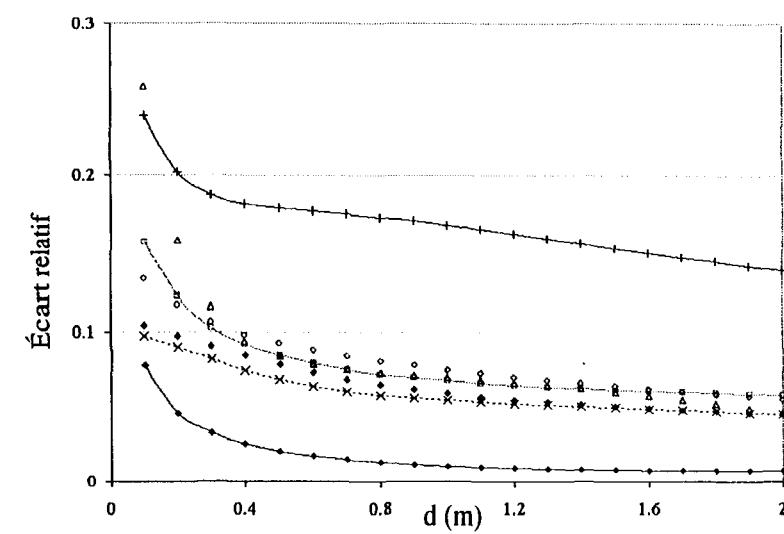
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% H₂O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% H₂O

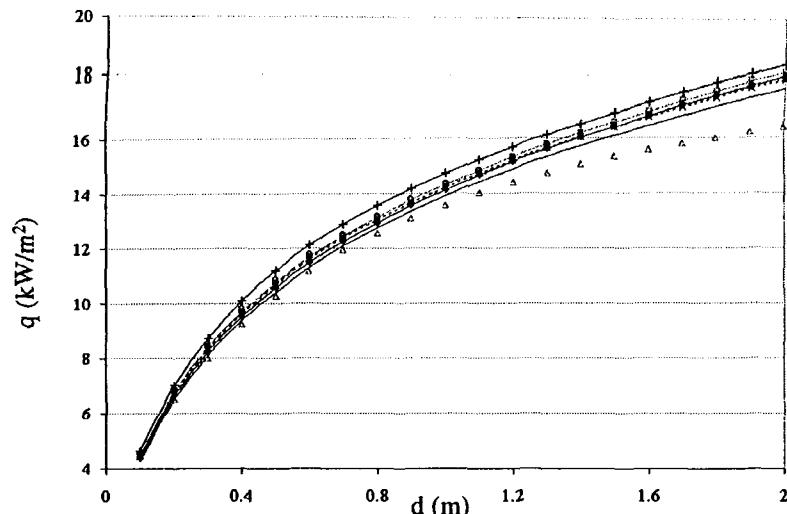


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% H₂O

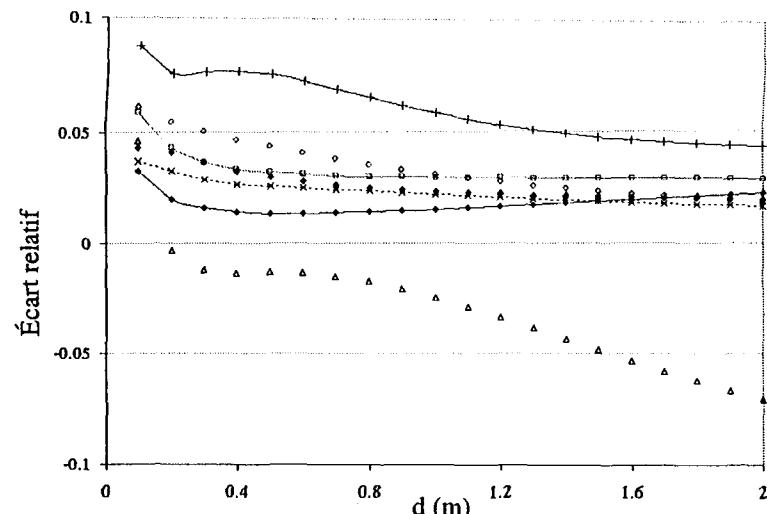


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% H₂O

Planche 19b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène

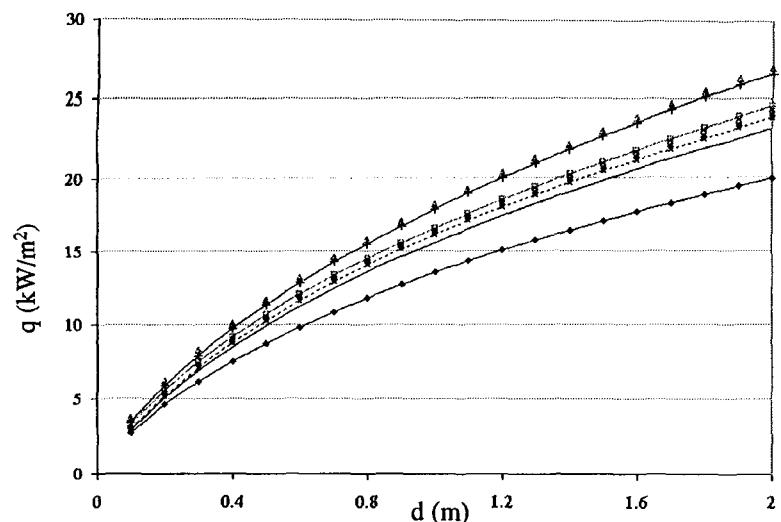


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% H₂O

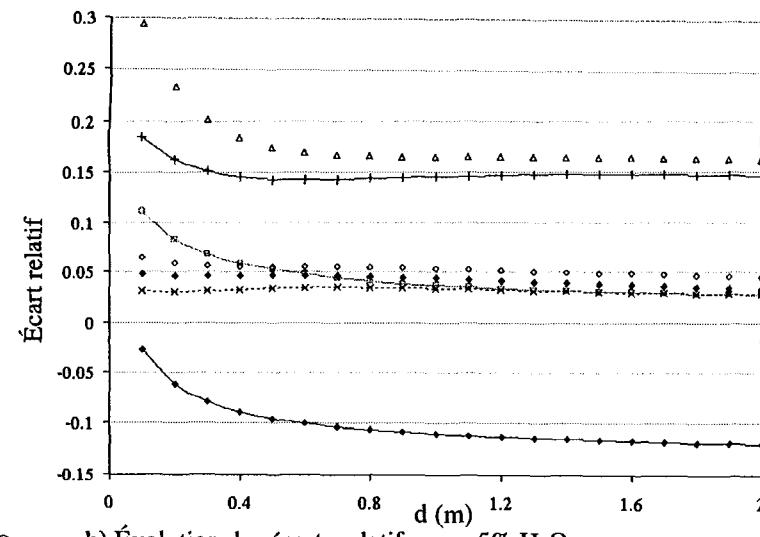


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% H₂O

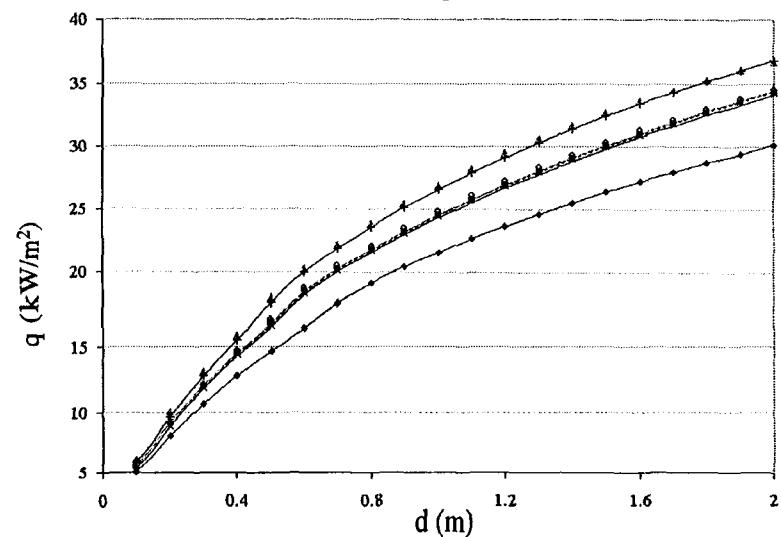
Planche 20a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène



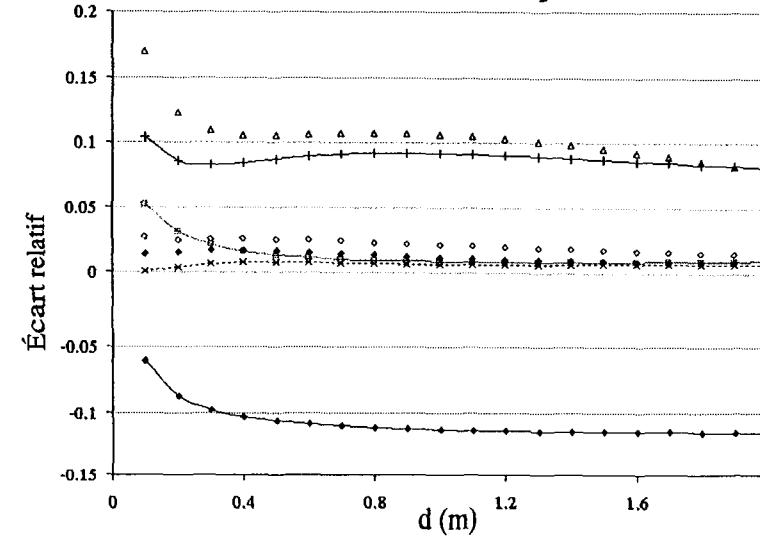
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% H_2O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% H_2O

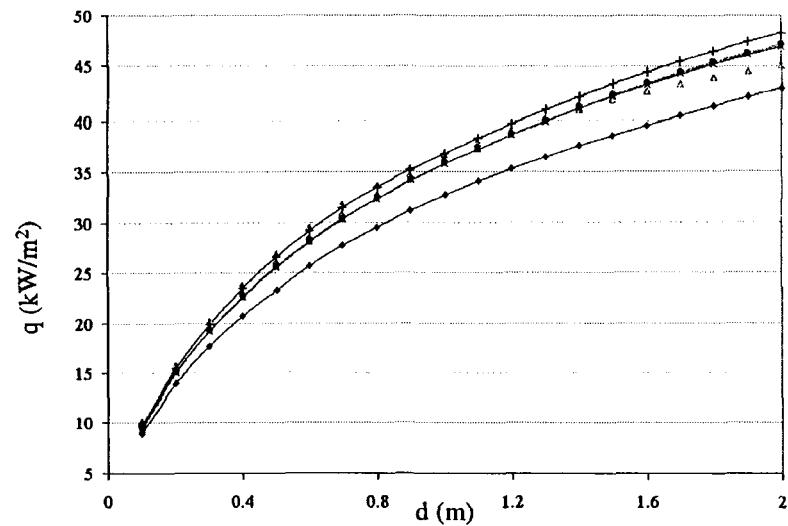


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% H_2O

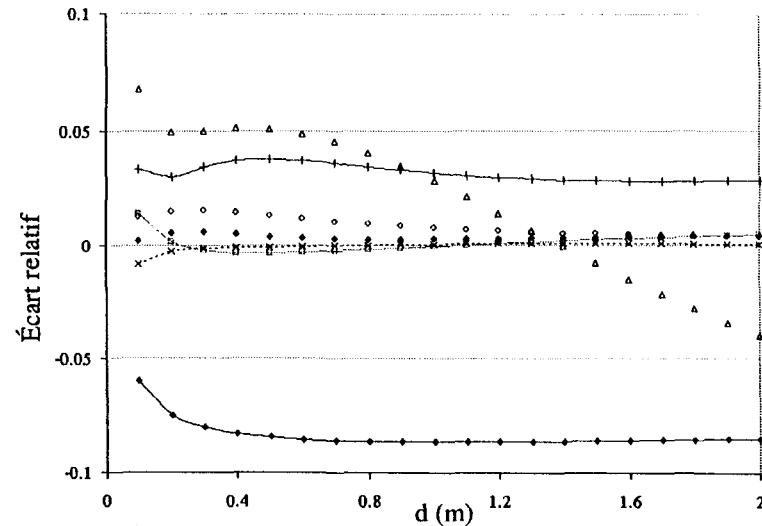


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% H_2O

Planche 20b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène

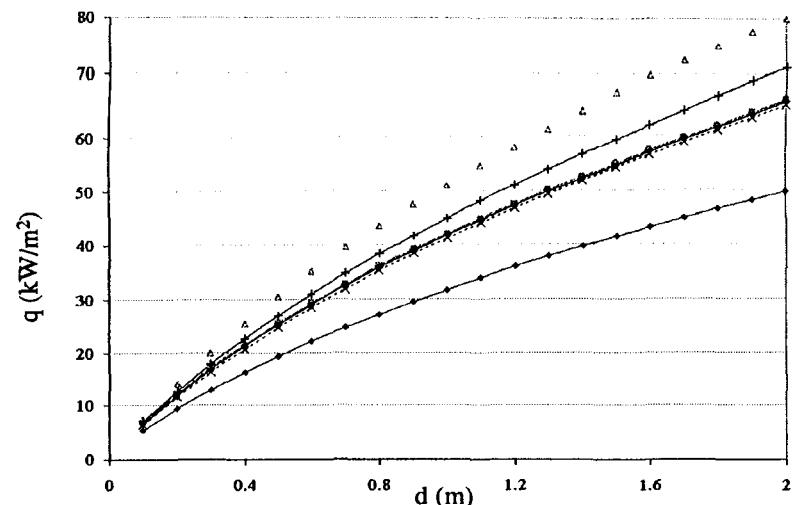


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% H_2O

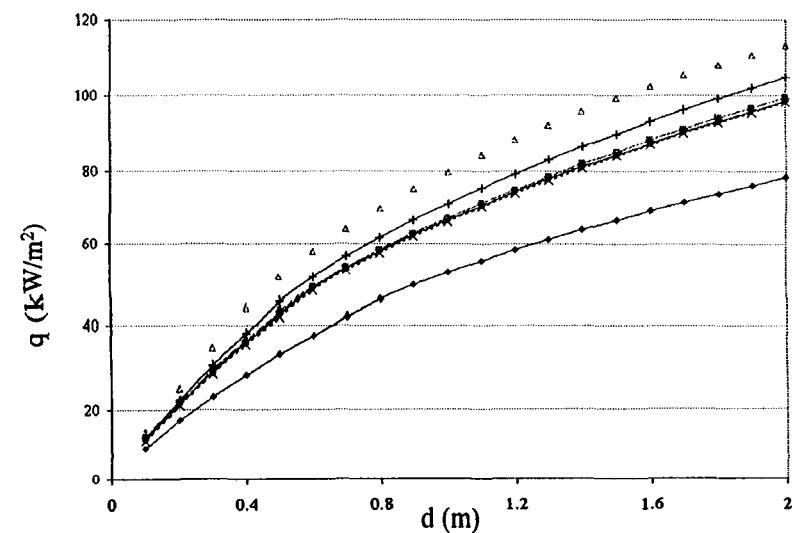


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% H_2O

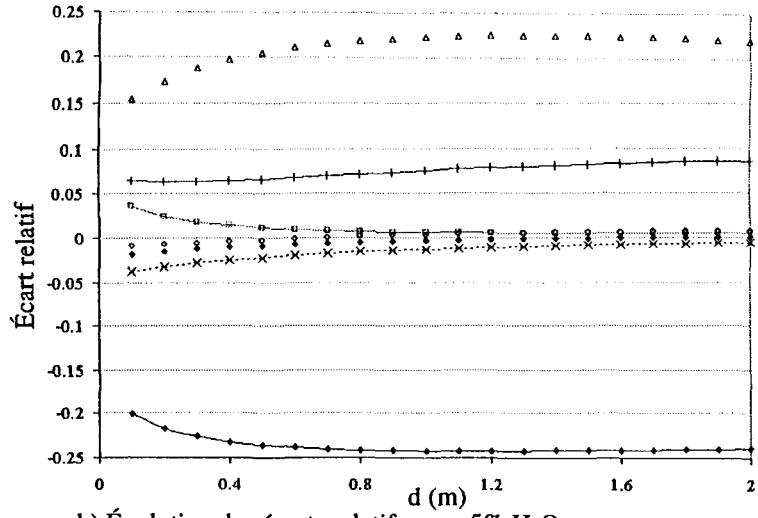
Planche 21a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène



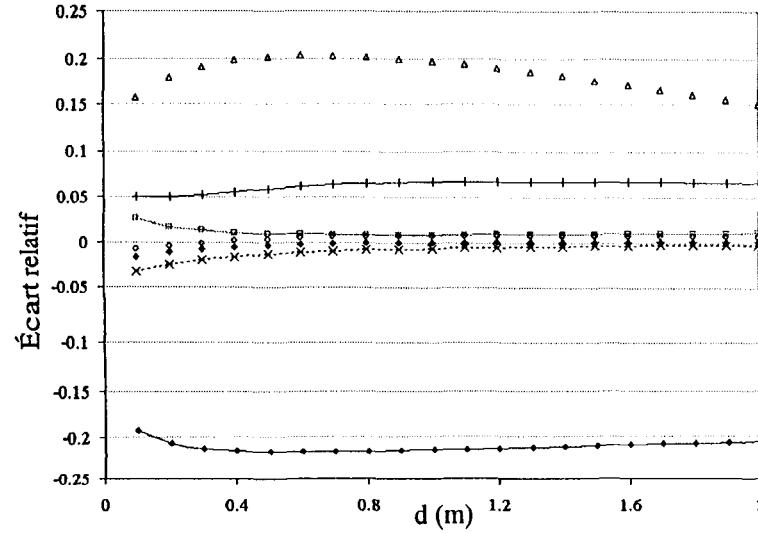
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% H₂O



c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% H₂O

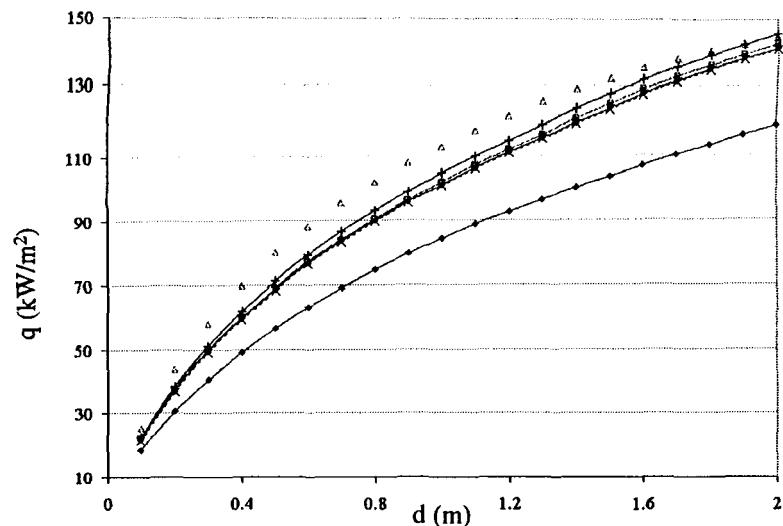


b) Évolution des écarts relatifs avec 5% H₂O

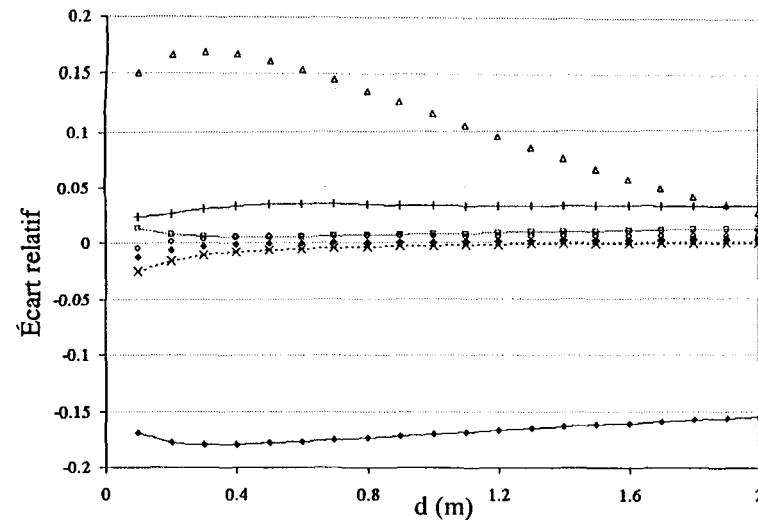


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% H₂O

Planche 21b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène

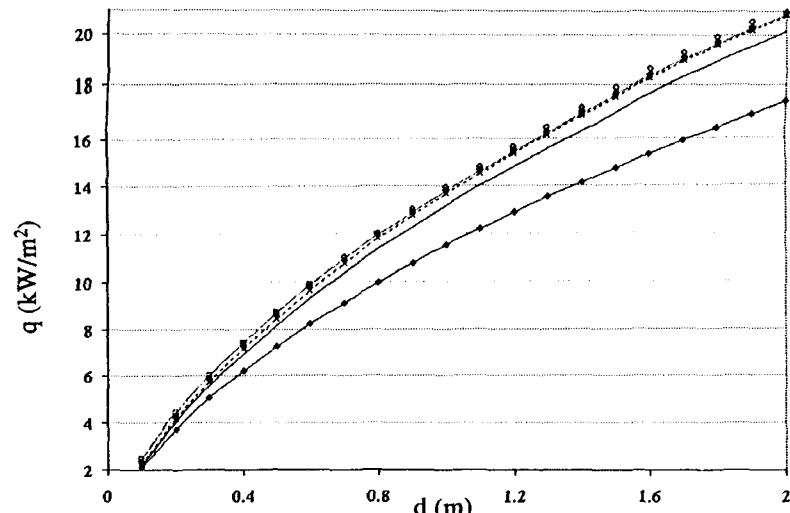


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% H_2O

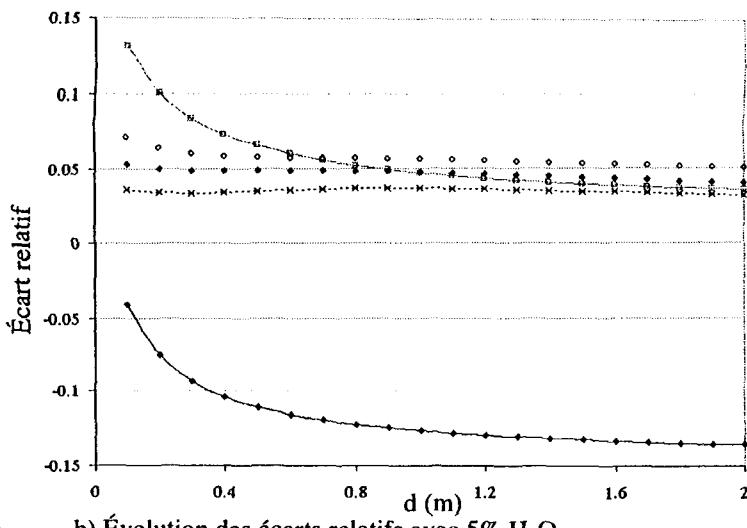


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% H_2O

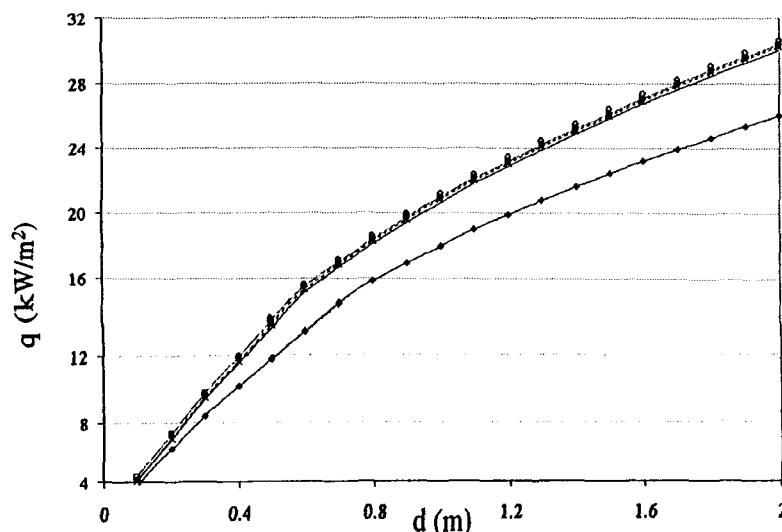
Planche 22a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène



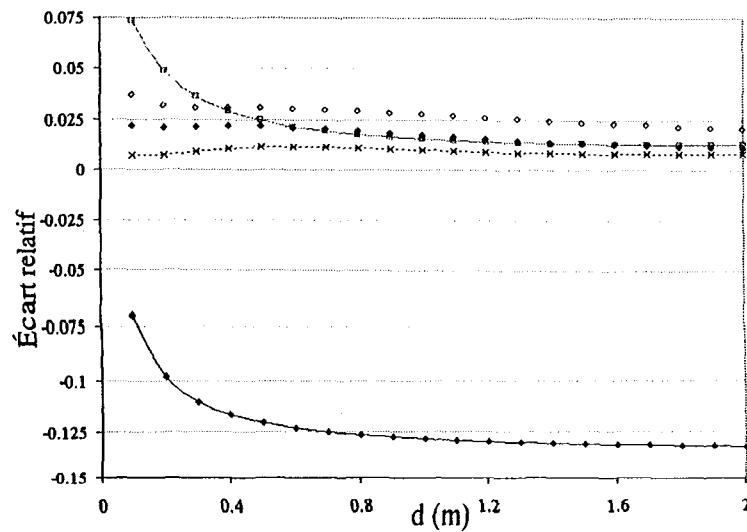
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% H₂O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% H₂O

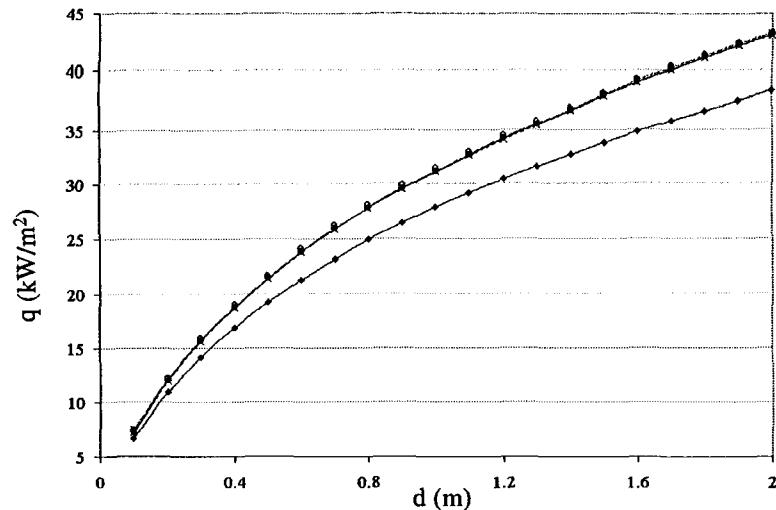


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% H₂O

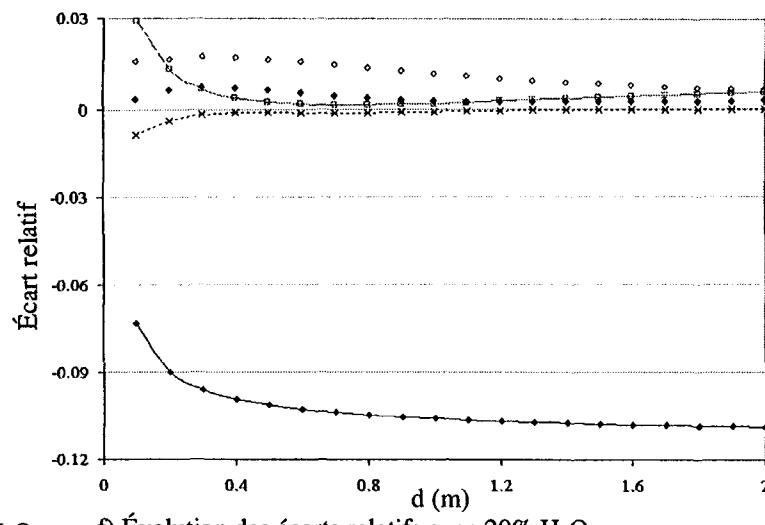


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% H₂O

Planche 22b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène

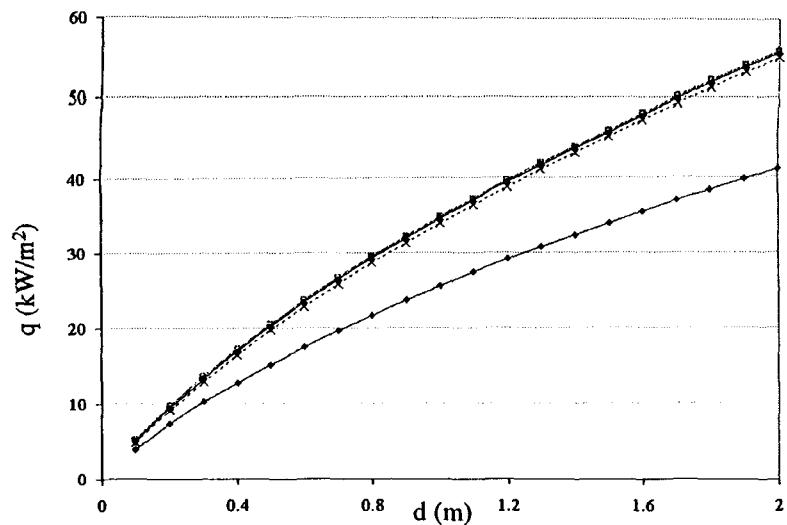


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% H_2O

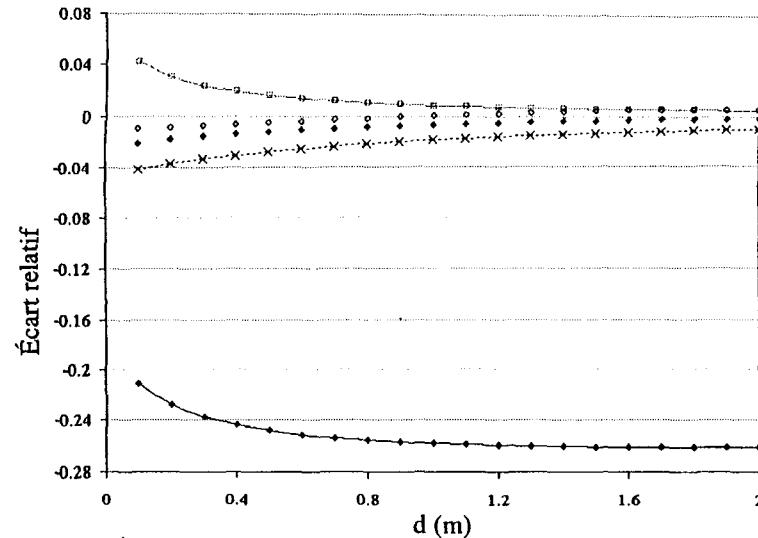


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% H_2O

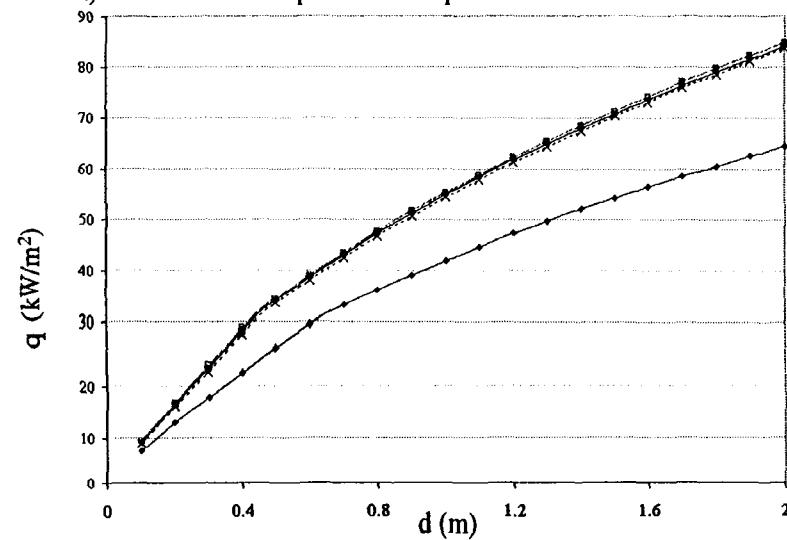
Planche 23a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène



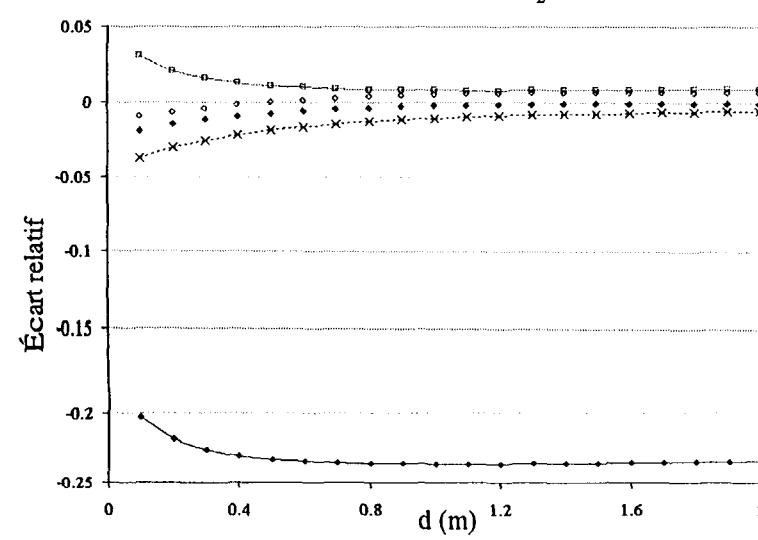
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% H₂O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% H₂O

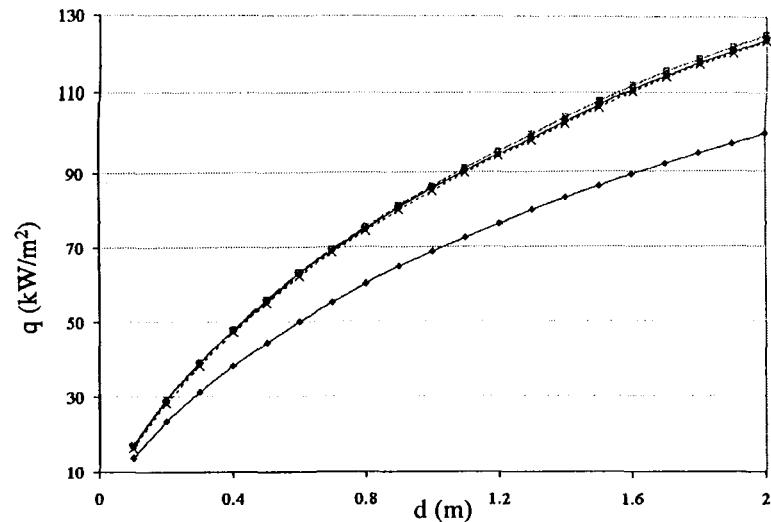


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% H₂O

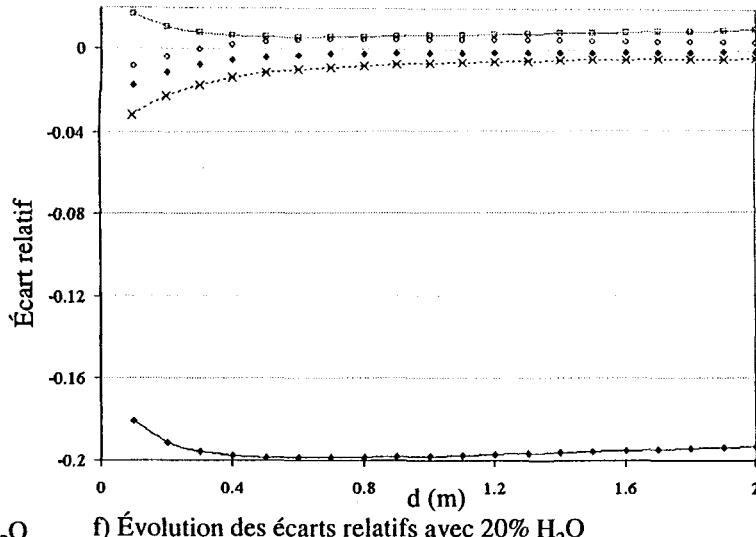


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% H₂O

Planche 23b: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène

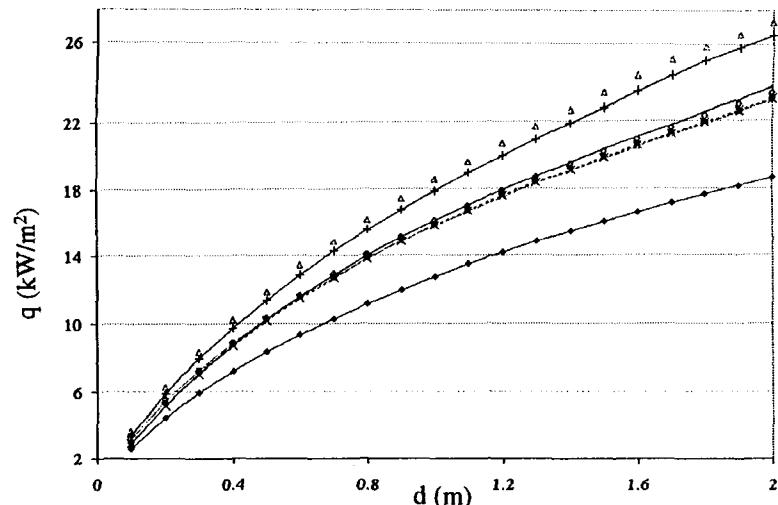


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% H_2O

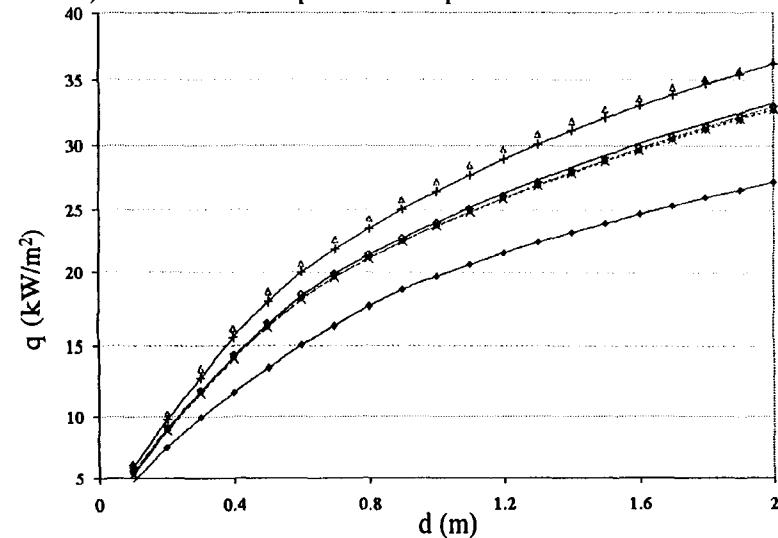


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% H_2O

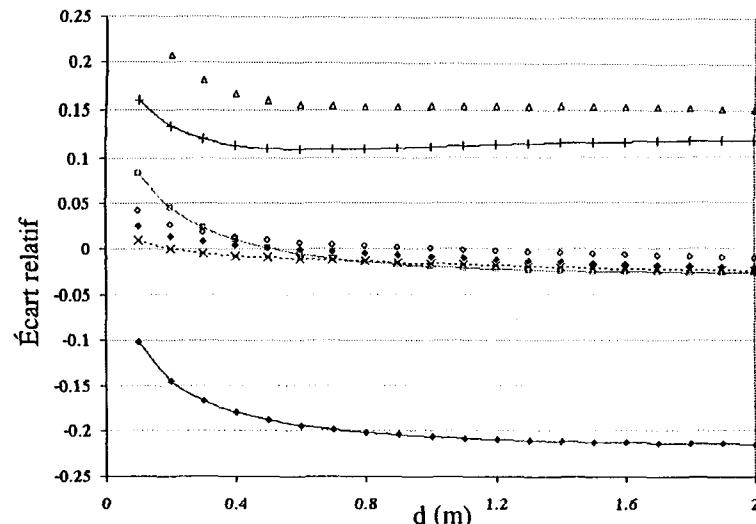
Planche 24a: Milieu anisotherme et homogène



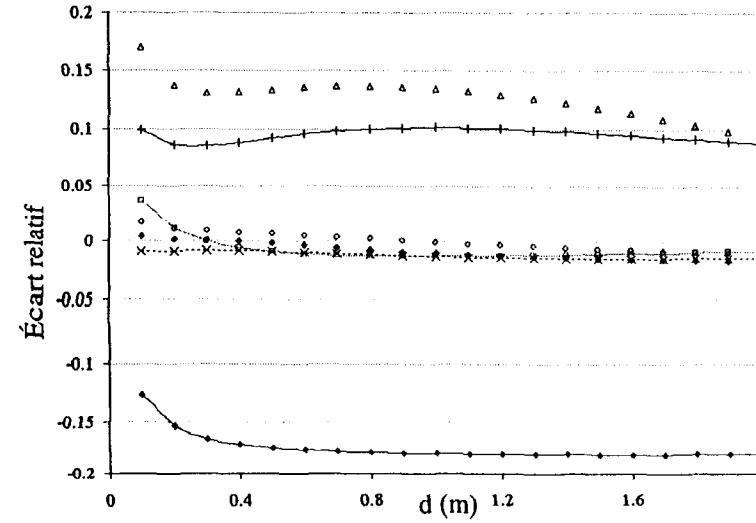
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% H₂O



c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% H₂O

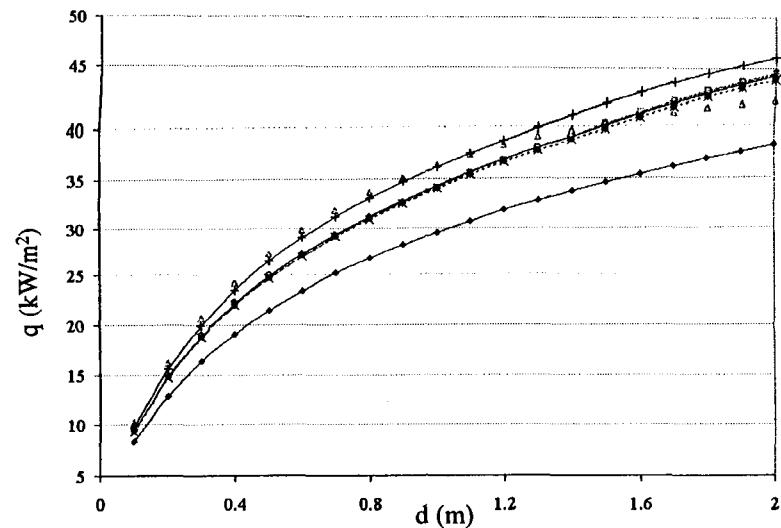


b) Évolution des écarts relatifs avec 5% H₂O

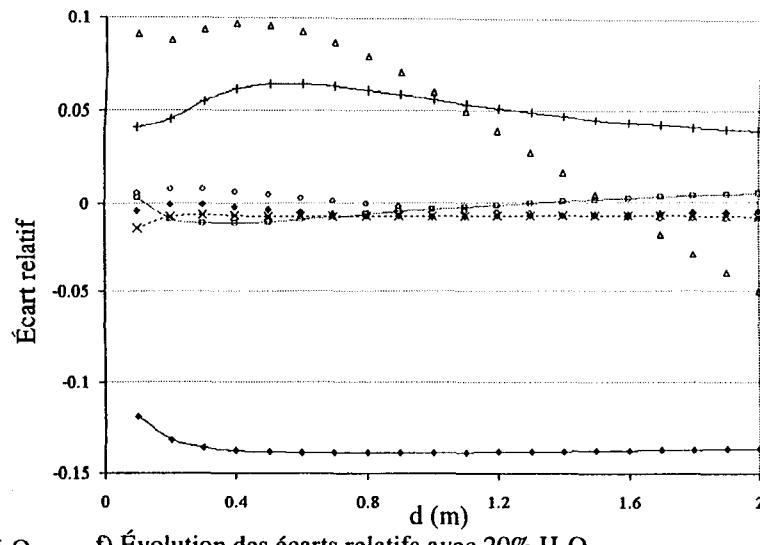


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% H₂O

Planche 24b: Milieu anisotherme et homogène

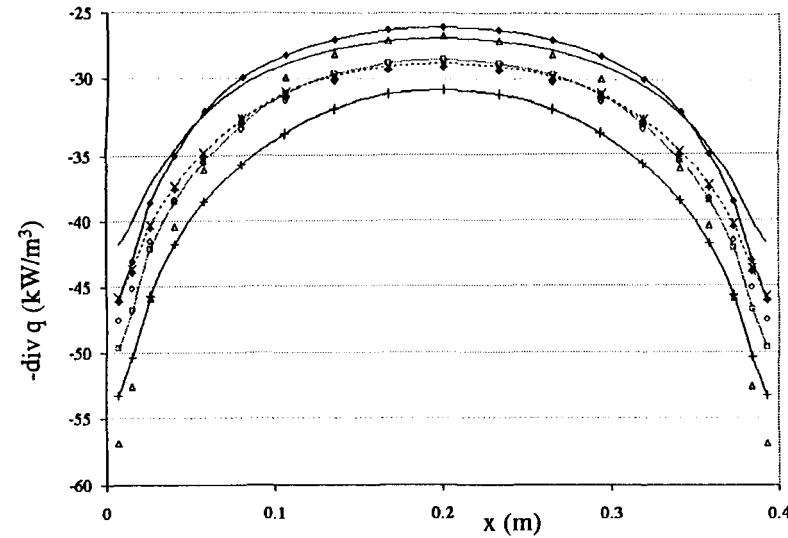


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 20% H_2O

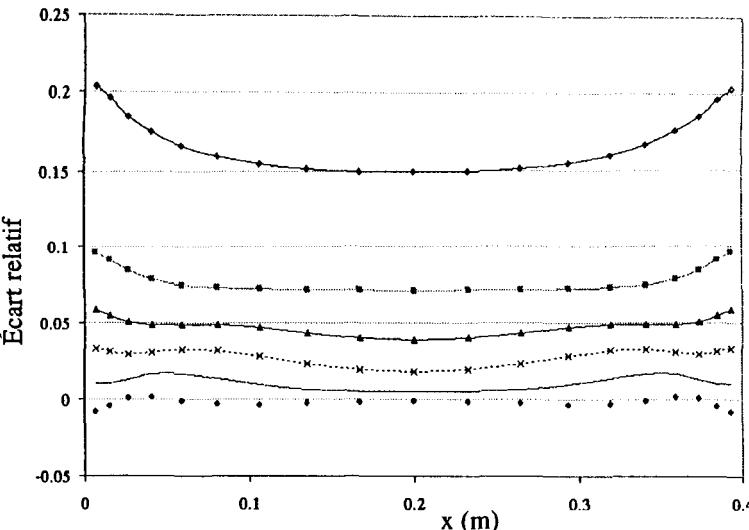


f) Évolution des écarts relatifs avec 20% H_2O

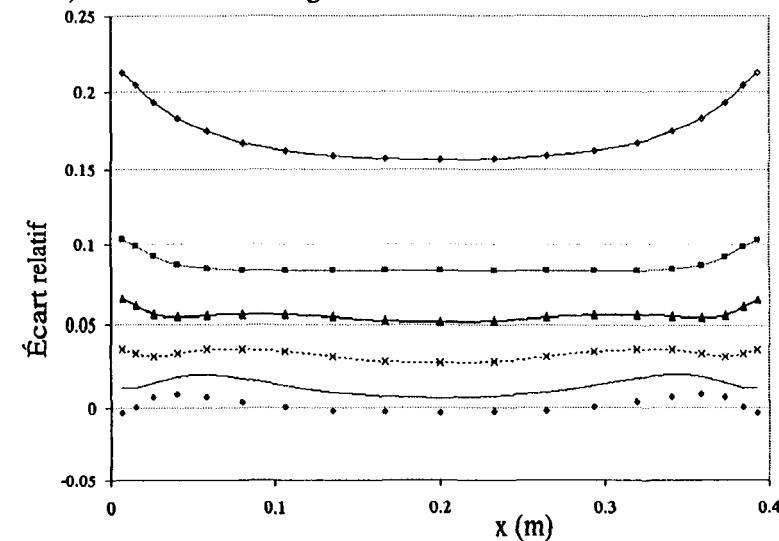
Planche 25a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=0,4$ m)



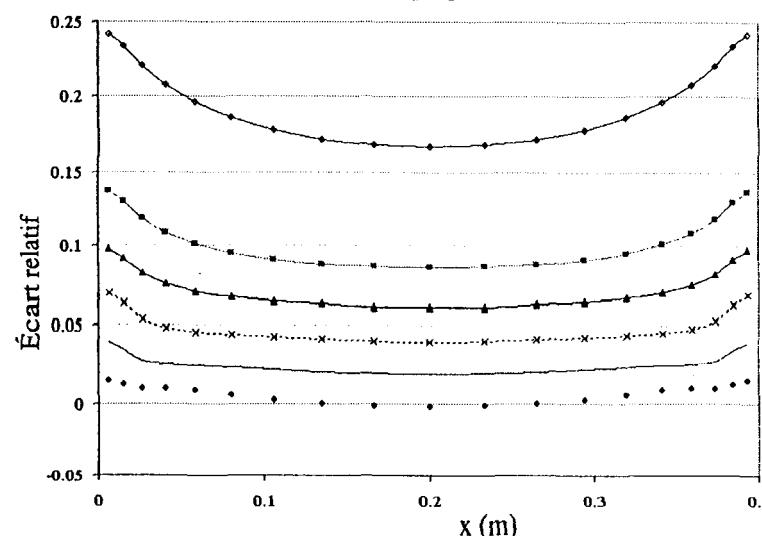
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

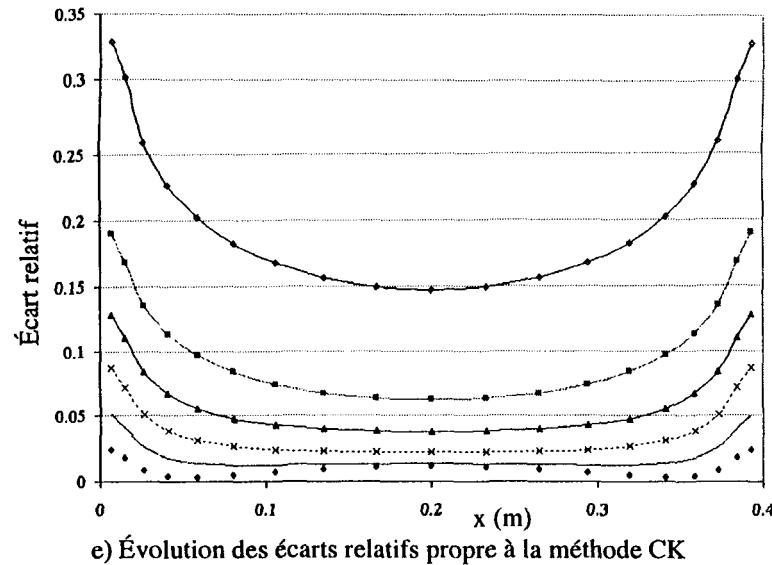


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

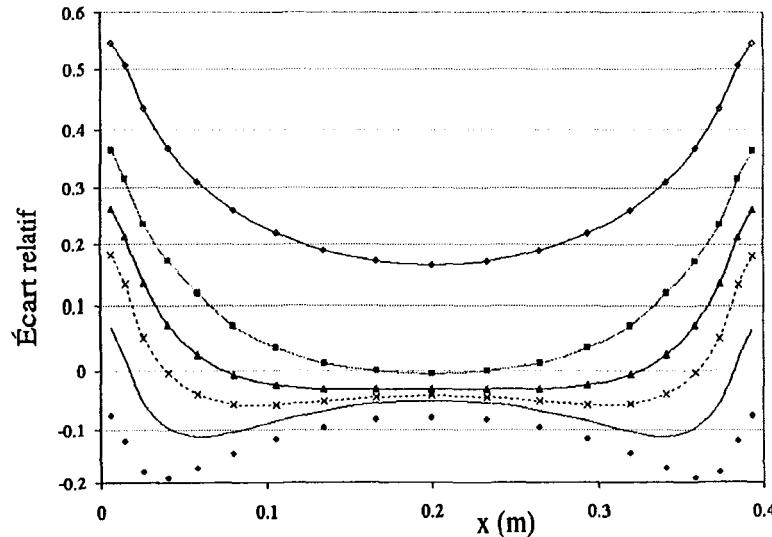


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

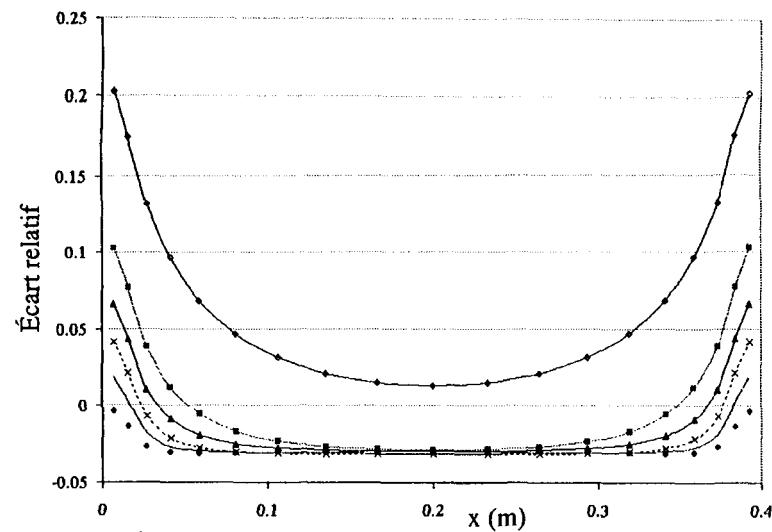
Planche 25b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=0,4$ m)



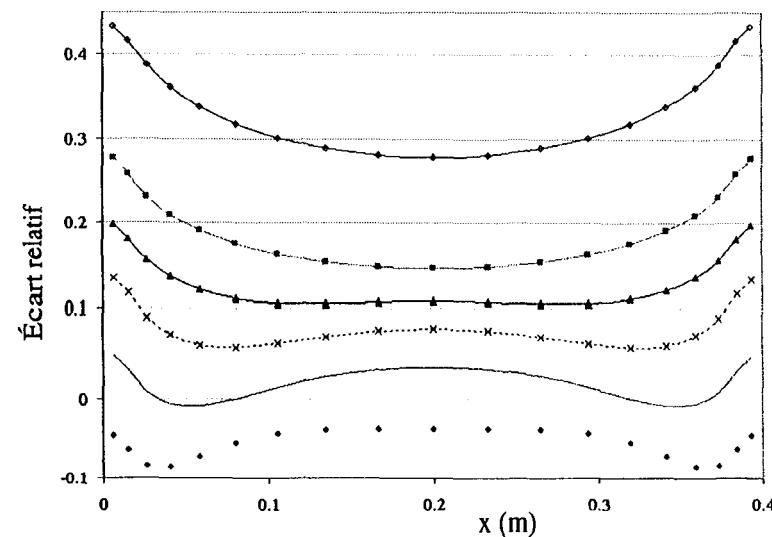
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

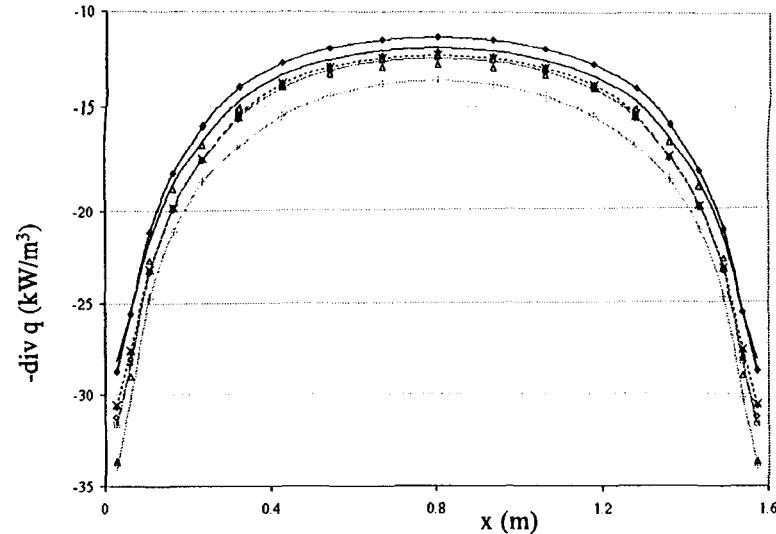


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

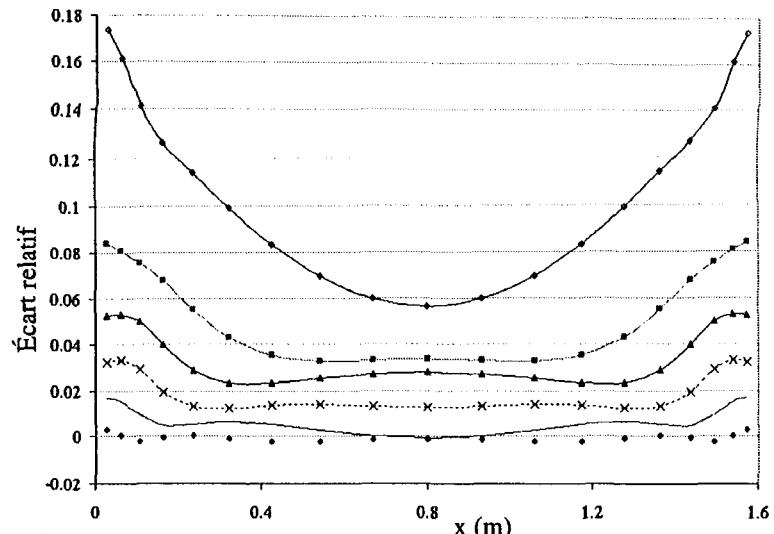


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

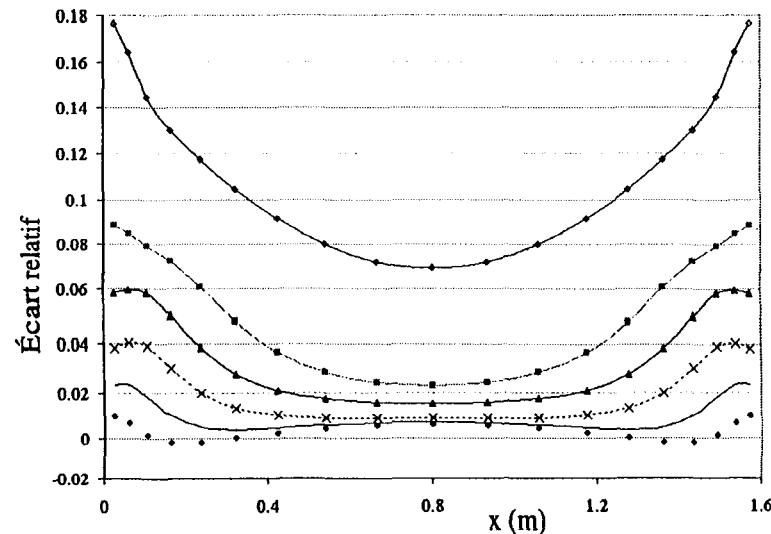
Planche 26a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=1,6$ m)



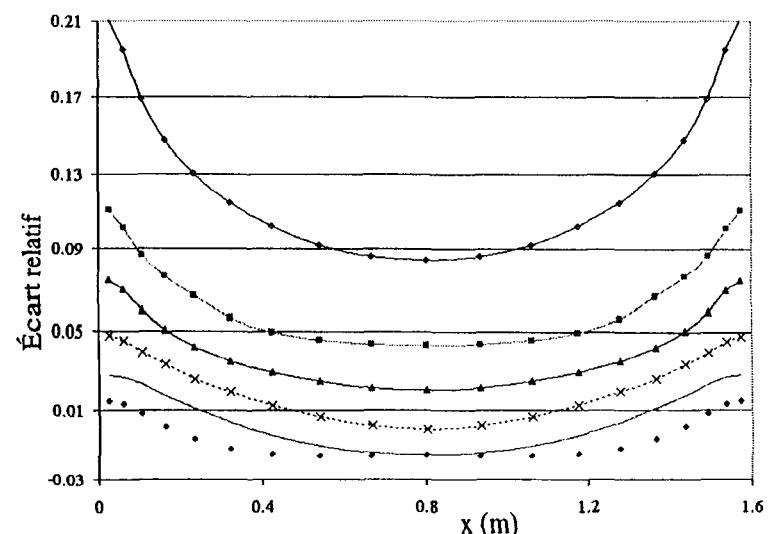
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

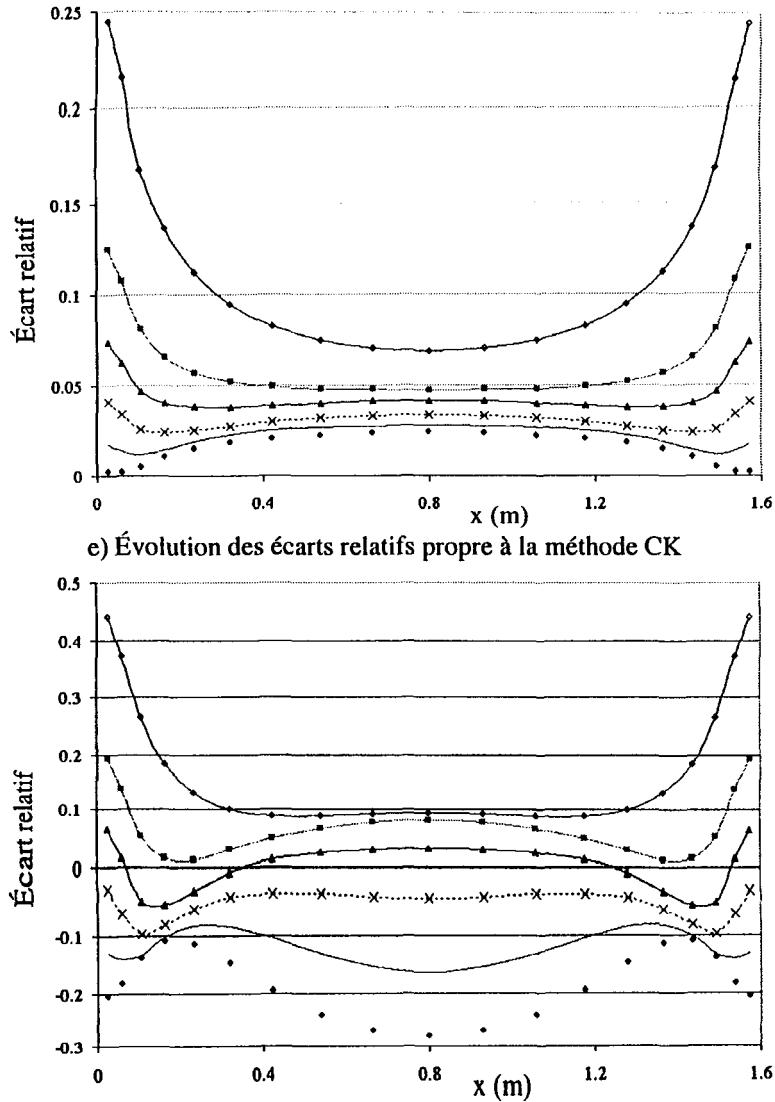


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

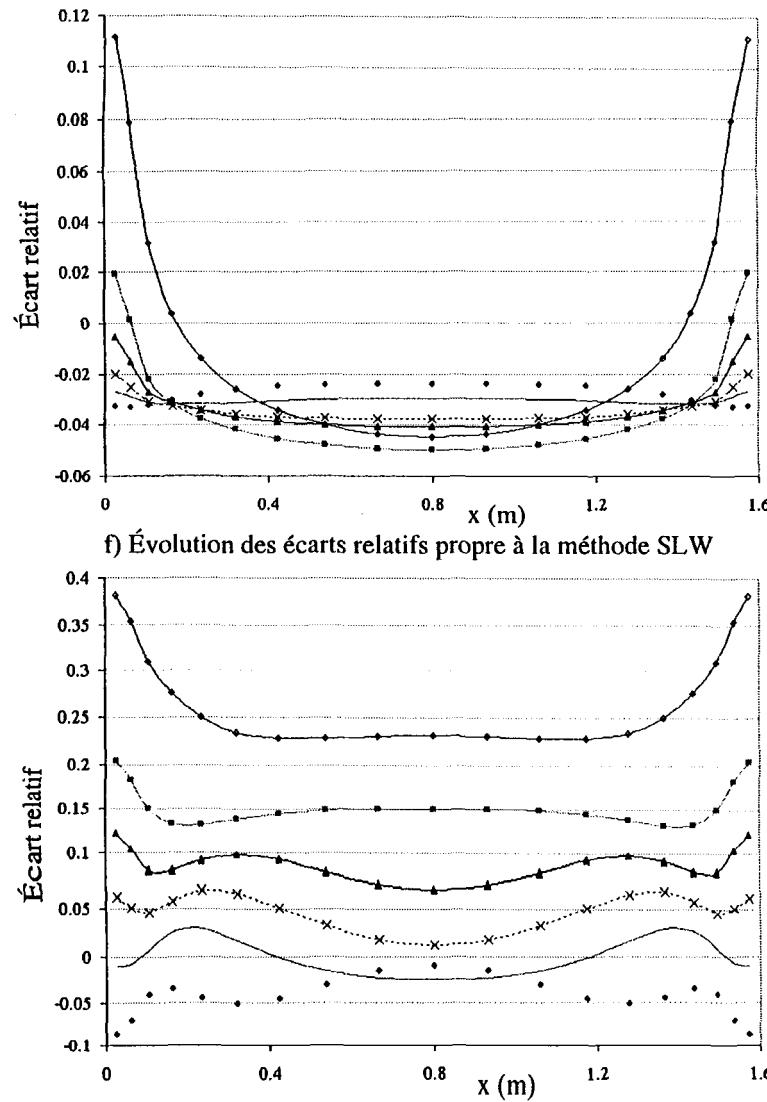


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

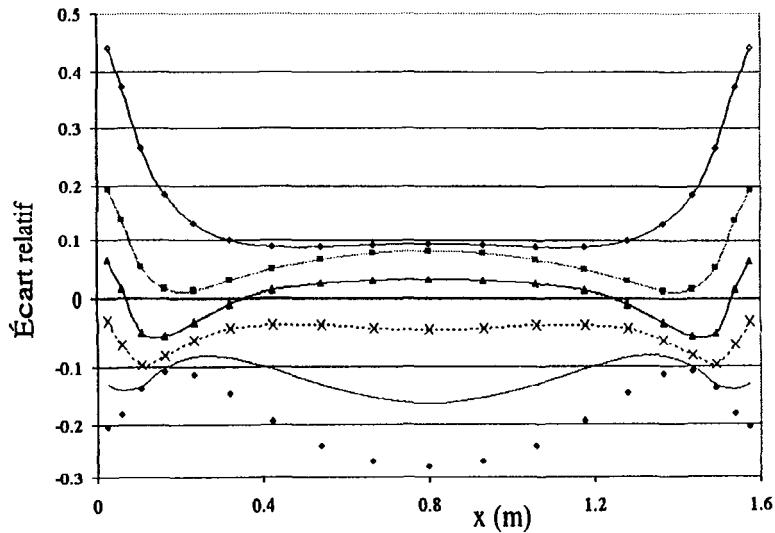
Planche 26b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=1,6$ m)



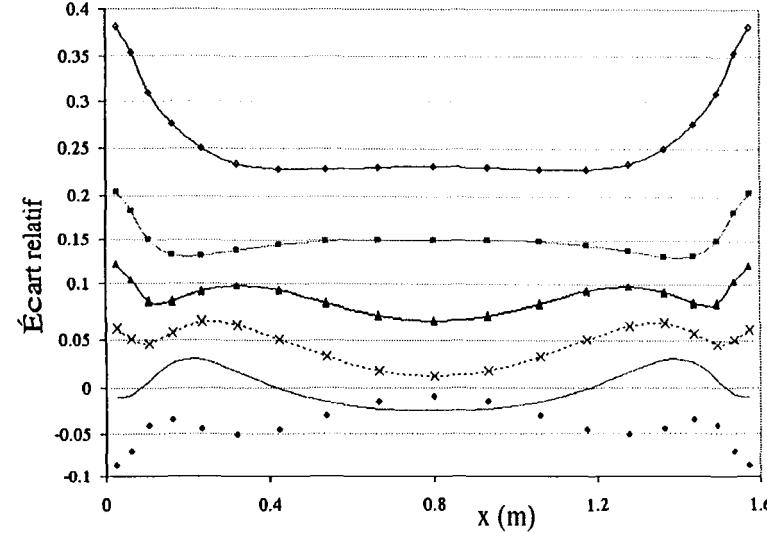
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

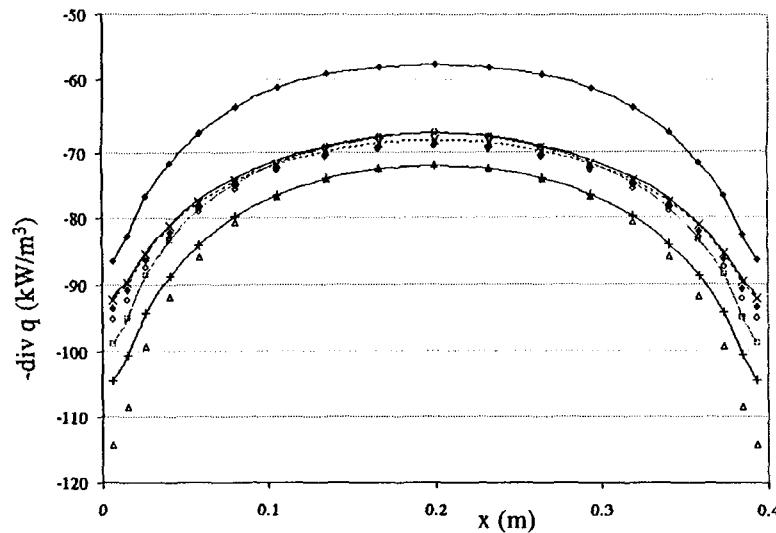


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

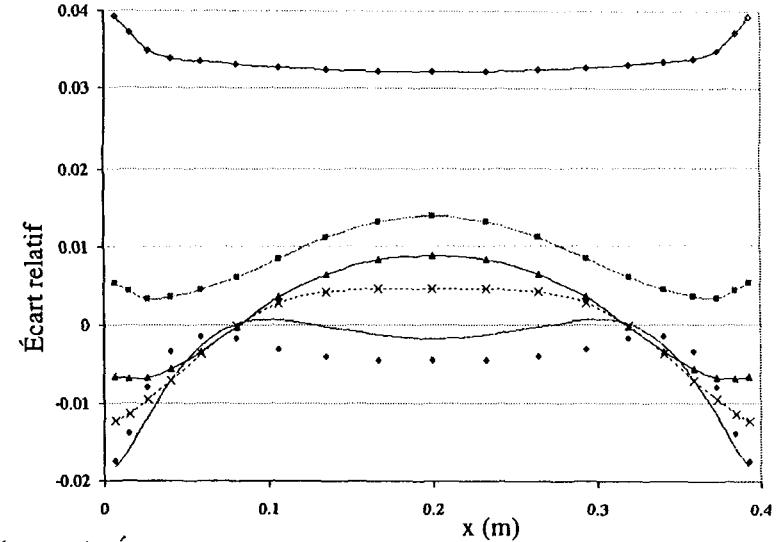


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

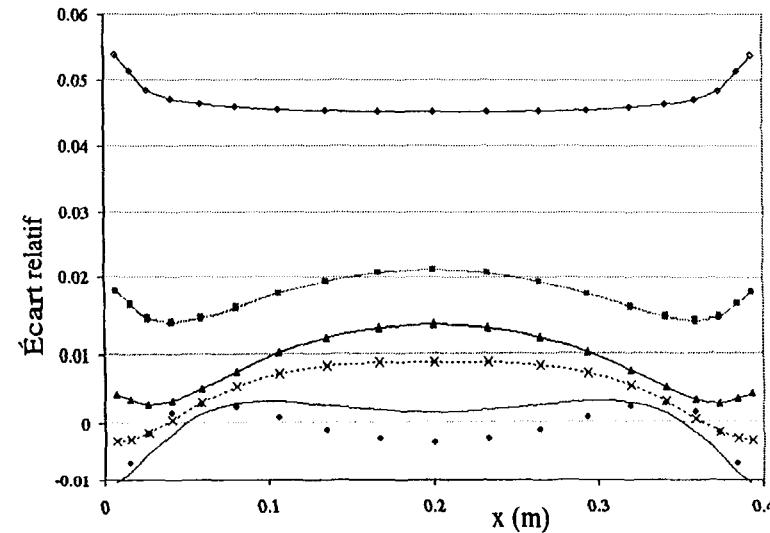
Planche 27a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=0,4$ m)



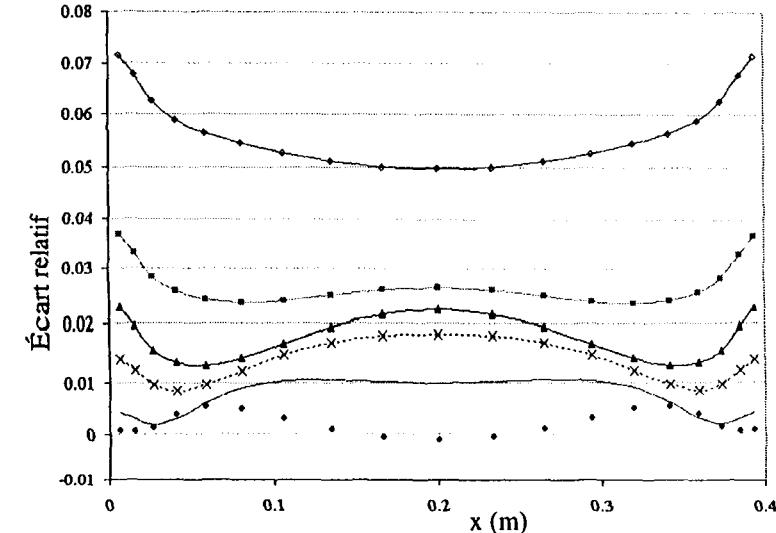
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

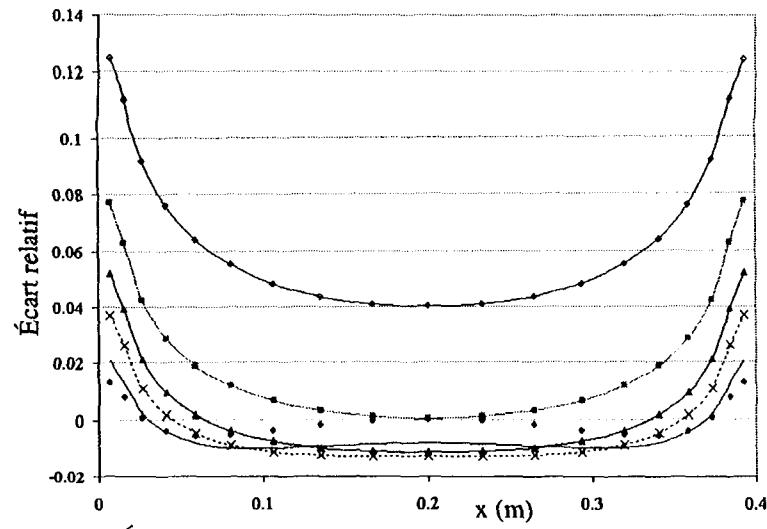


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

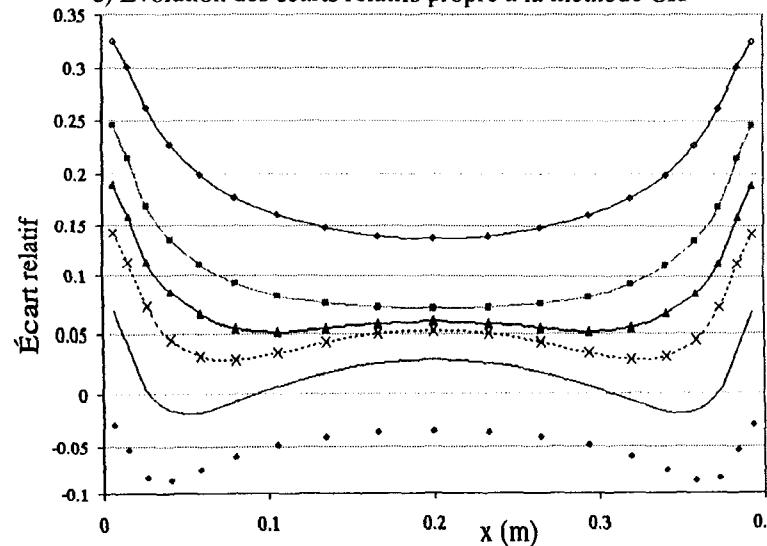


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

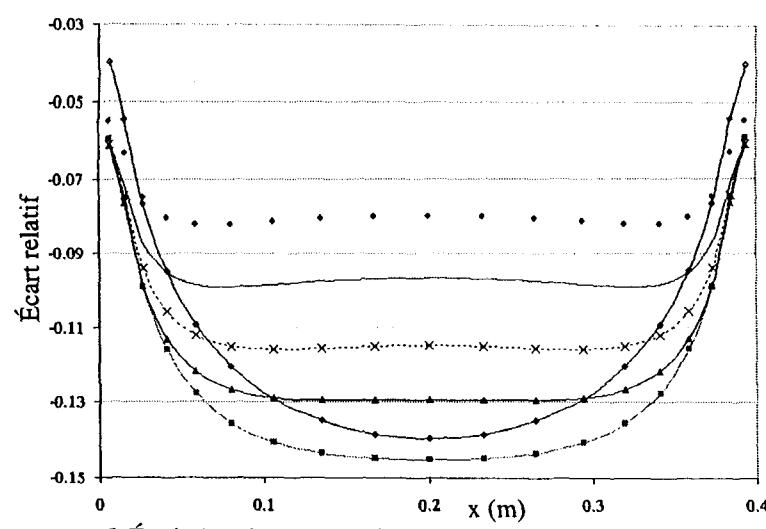
Planche 27b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=0,4$ m)



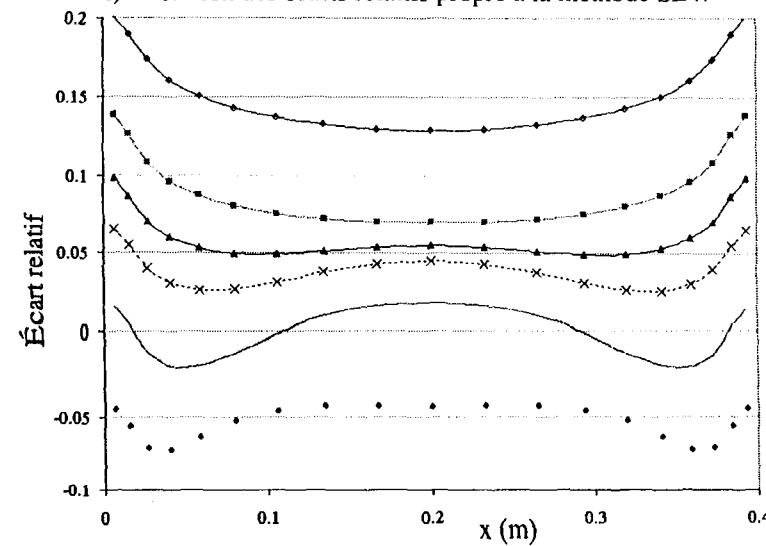
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

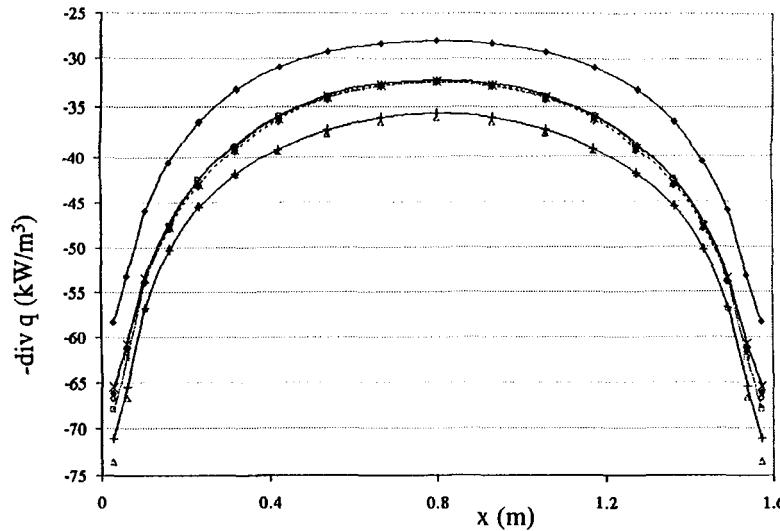


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

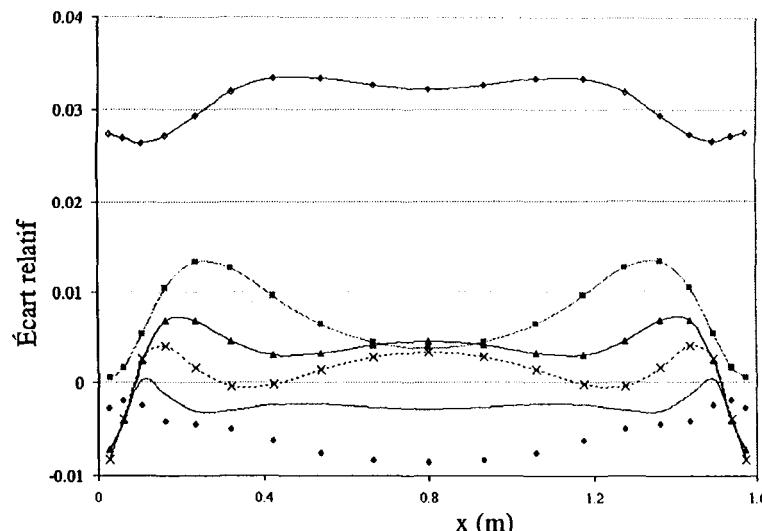


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

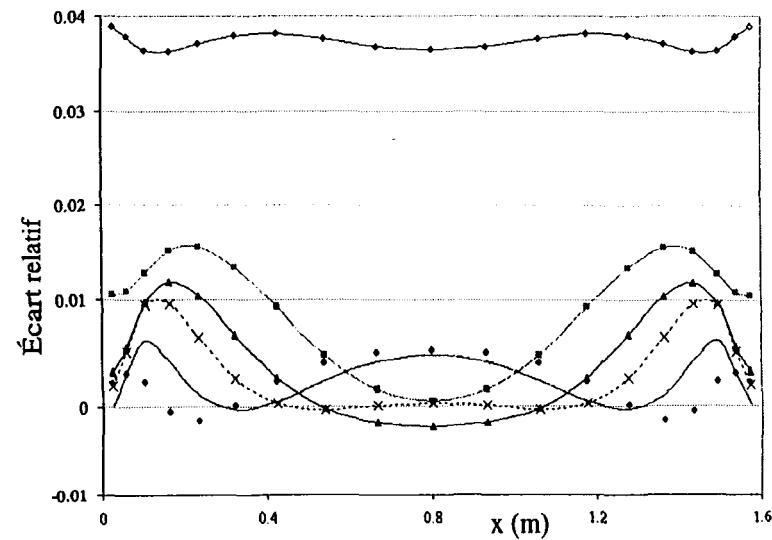
Planche 28a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=1,6$ m)



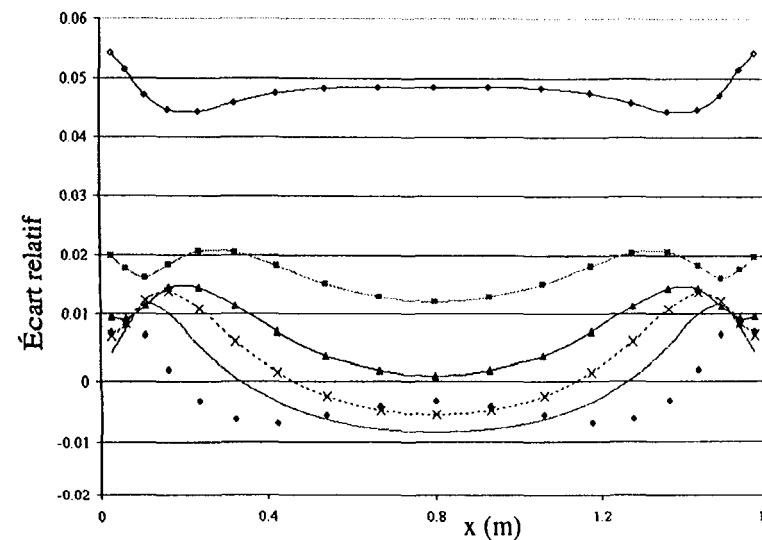
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

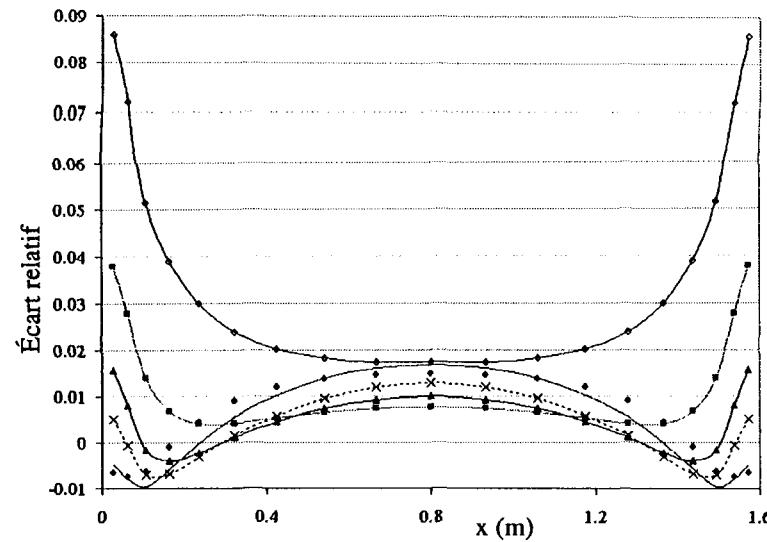


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

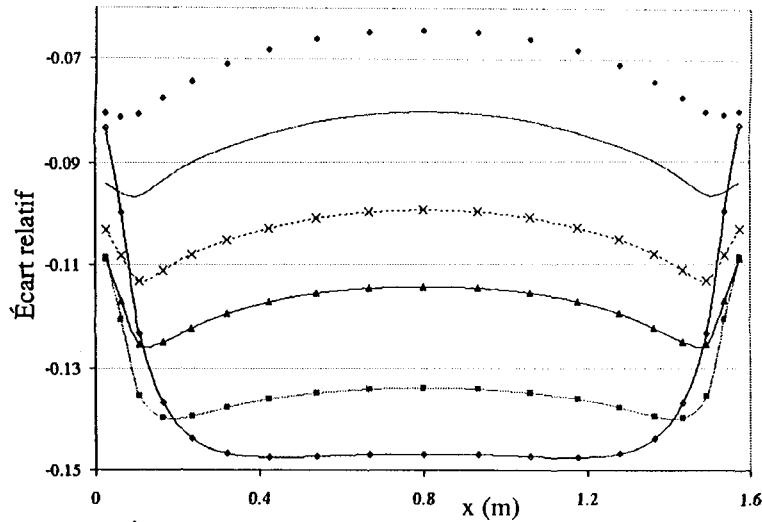


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

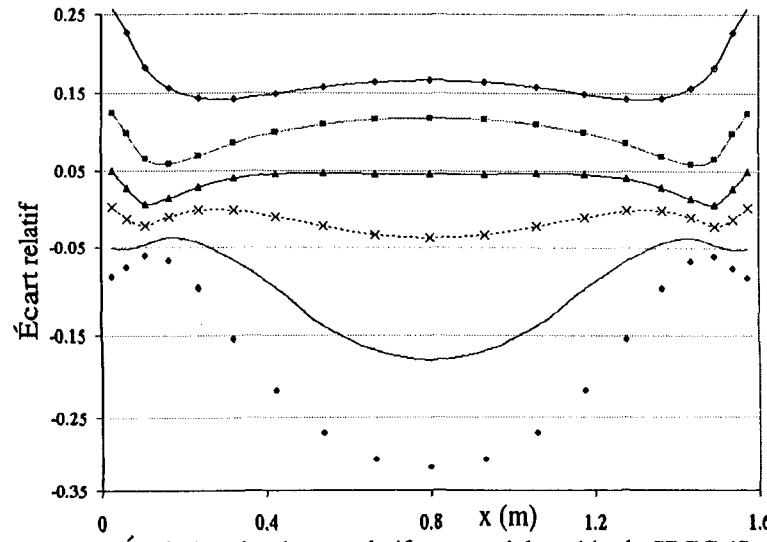
Planche 28b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=1,6$ m)



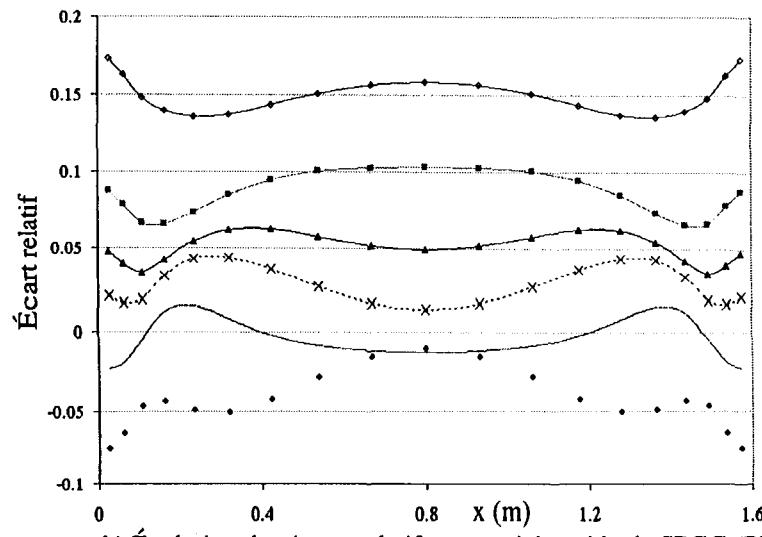
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

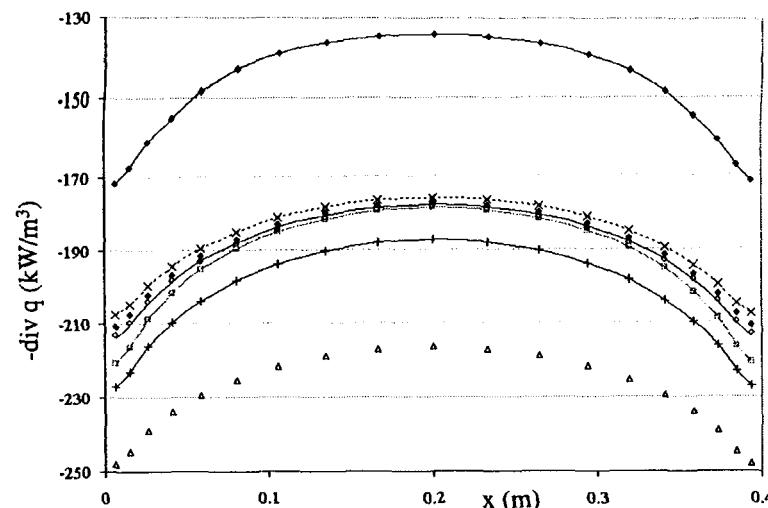


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

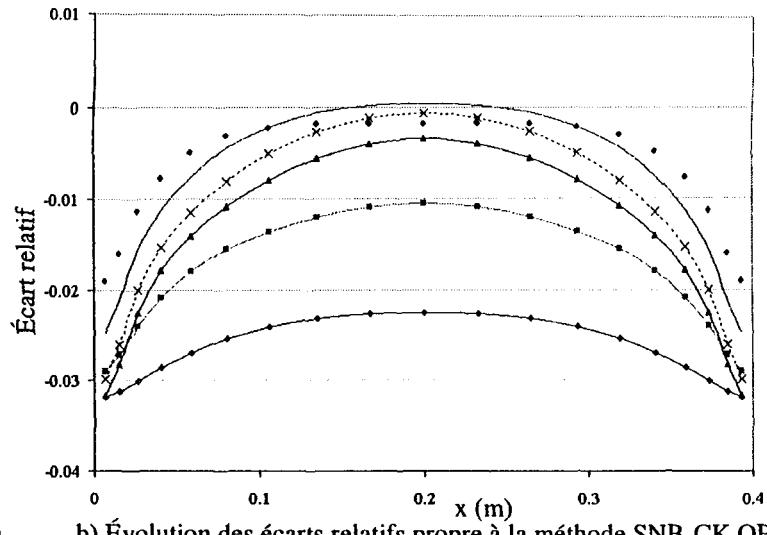


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

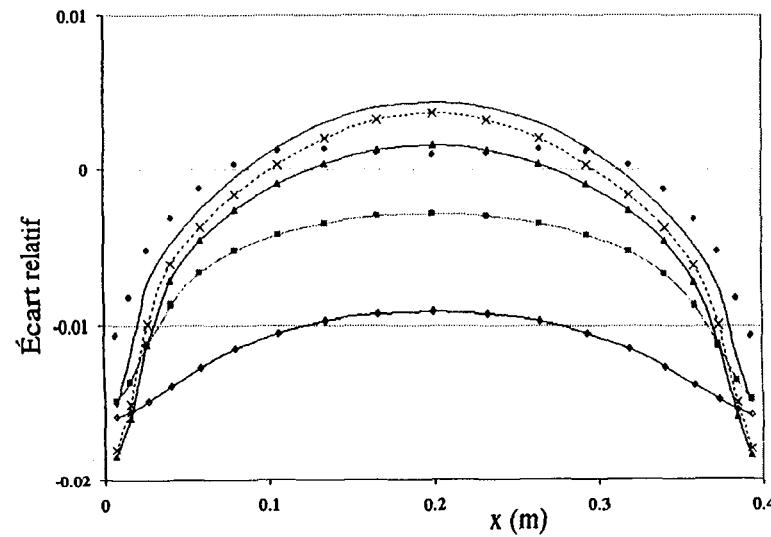
Planche 29a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=0,4$ m)



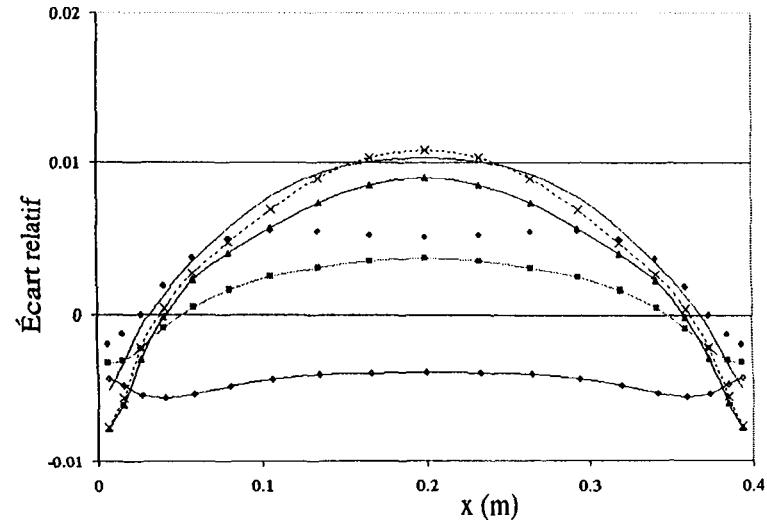
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

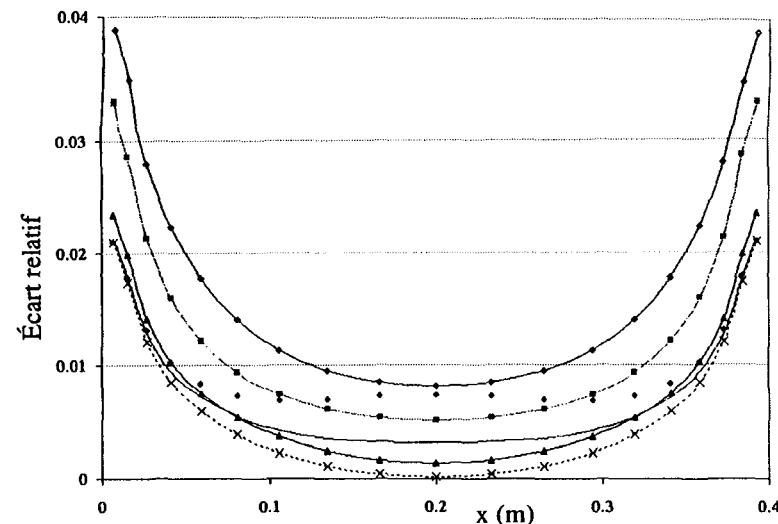


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

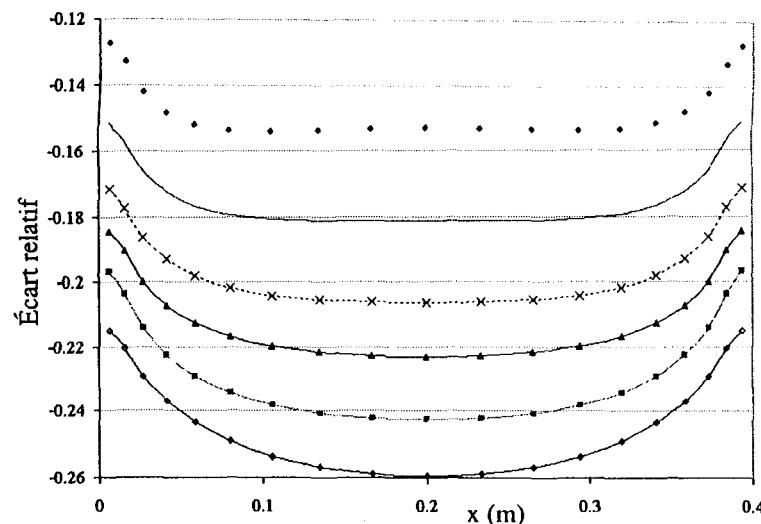


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

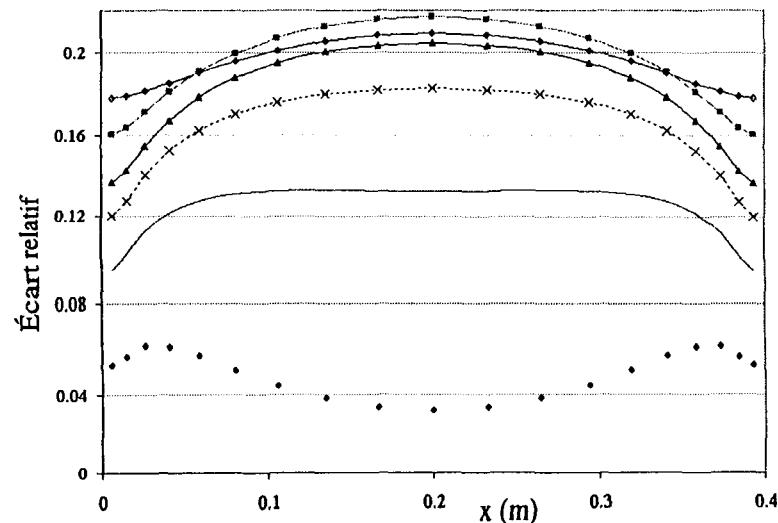
Planche 29b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=0,4$ m)



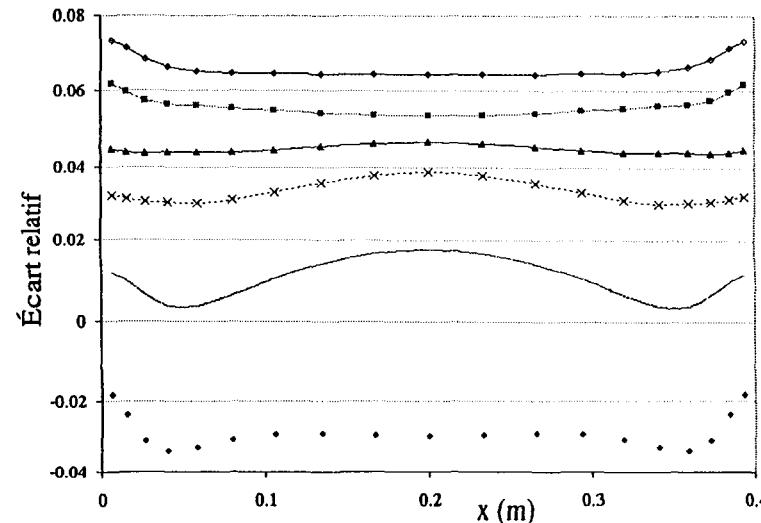
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

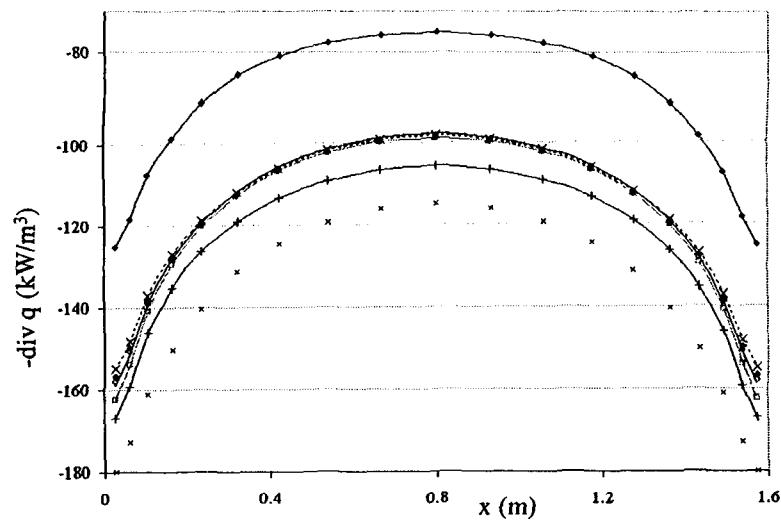


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

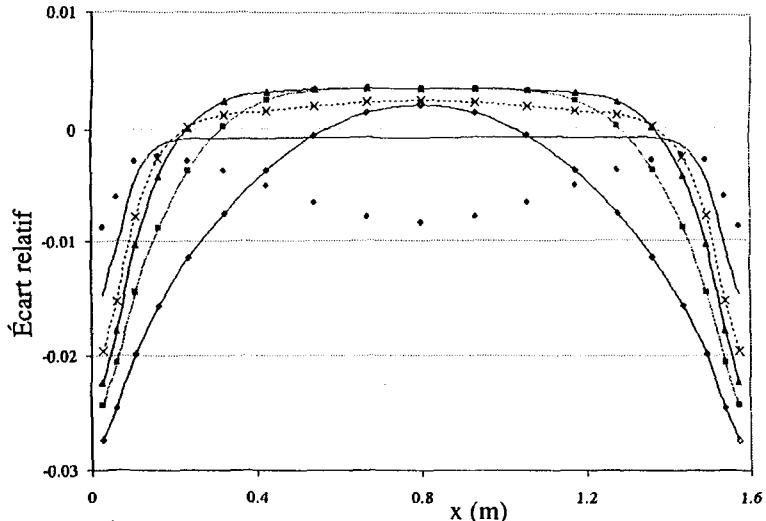


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

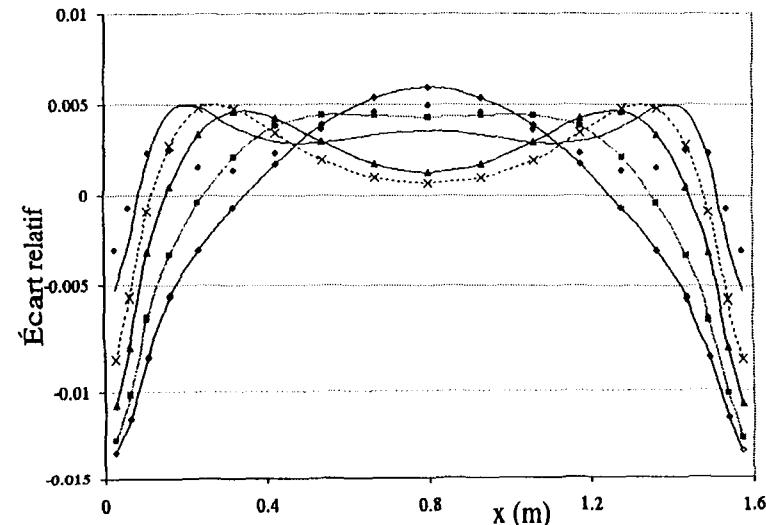
Planche 30a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=1,6$ m)



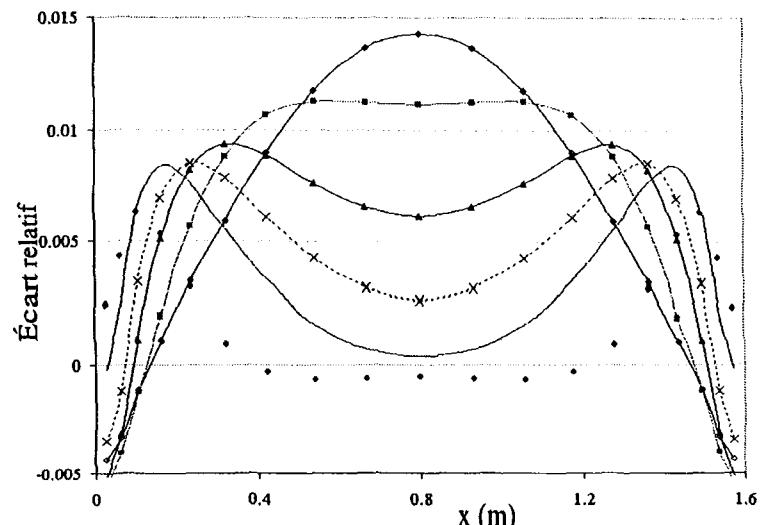
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

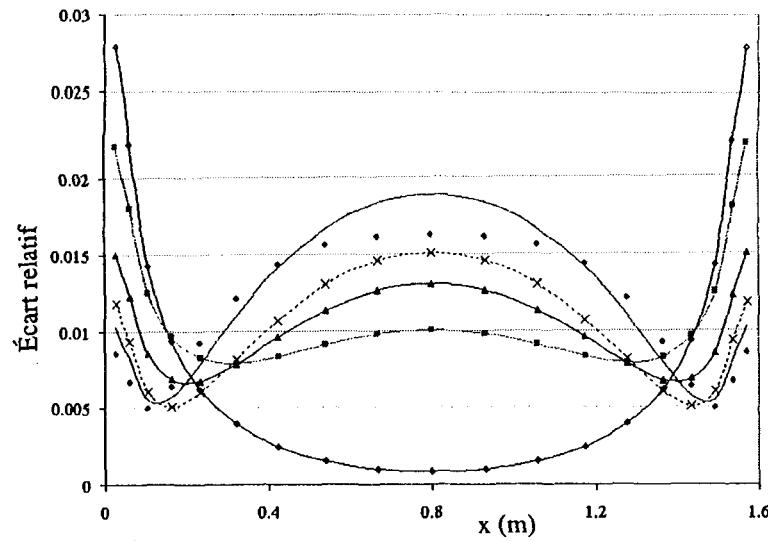


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

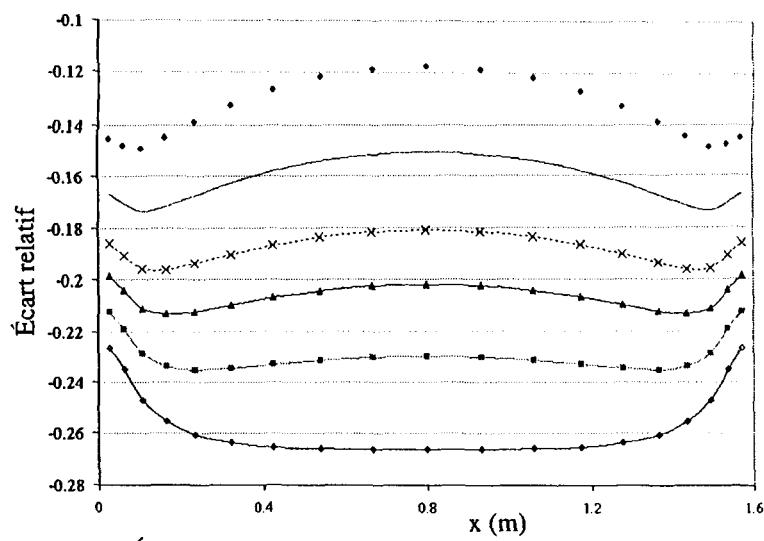


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

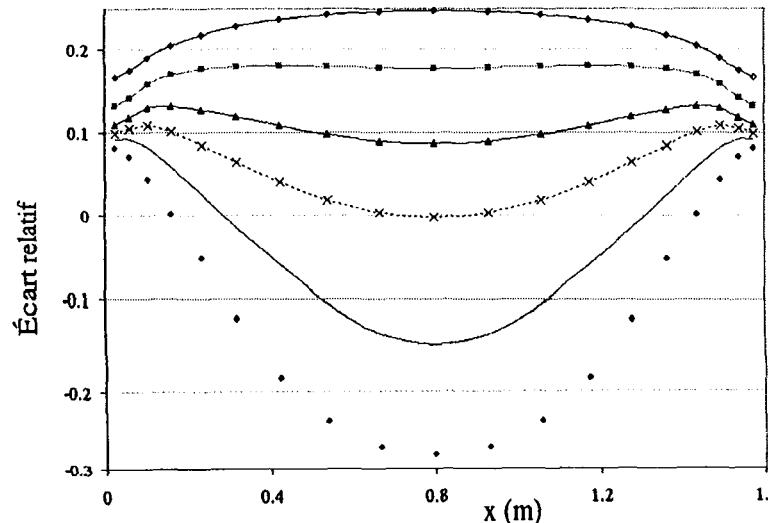
Planche 30b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=1,6$ m)



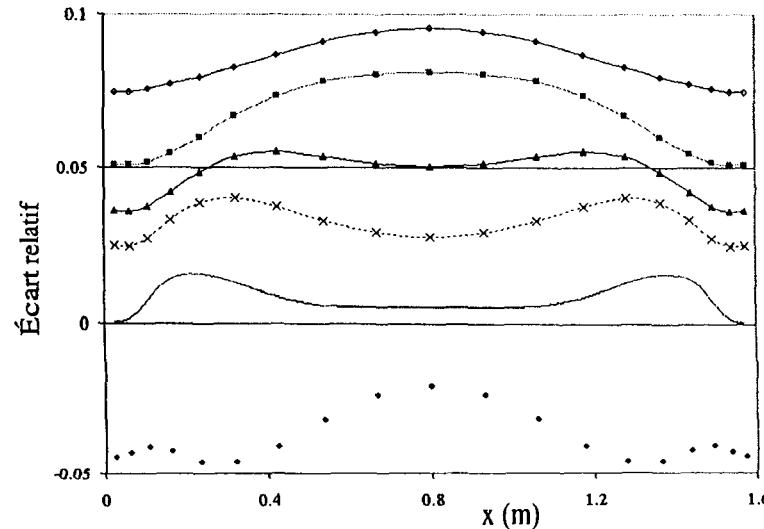
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

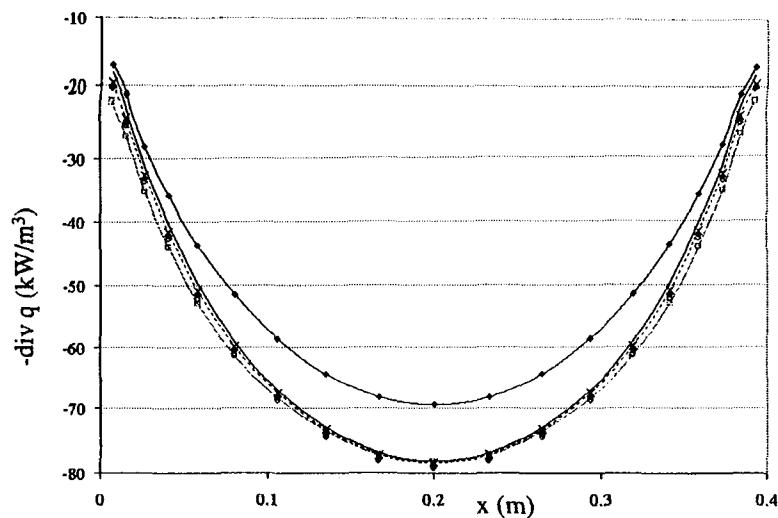


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

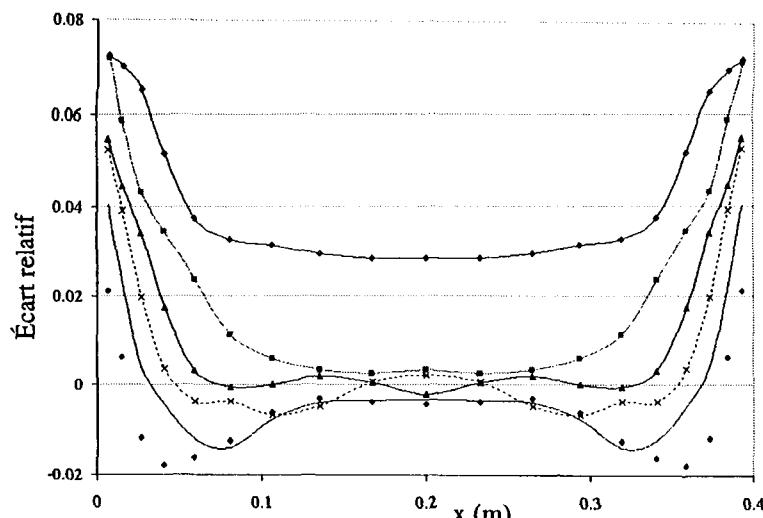


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

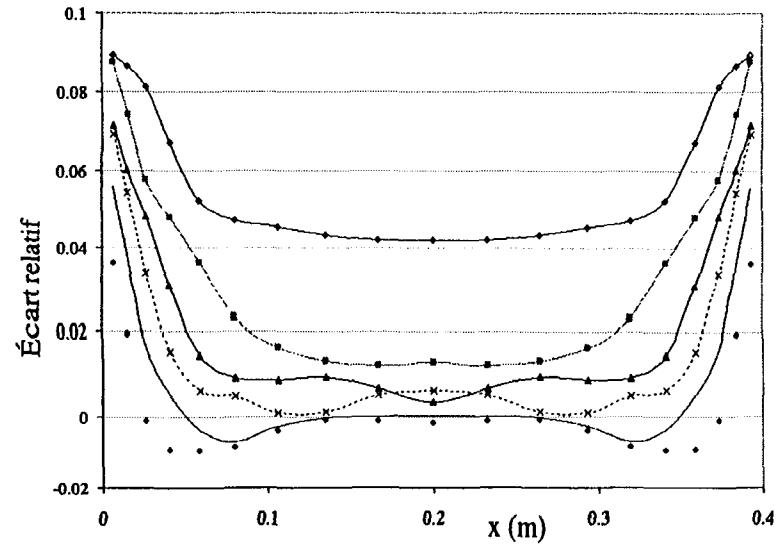
Planche 31a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=0,4$ m)



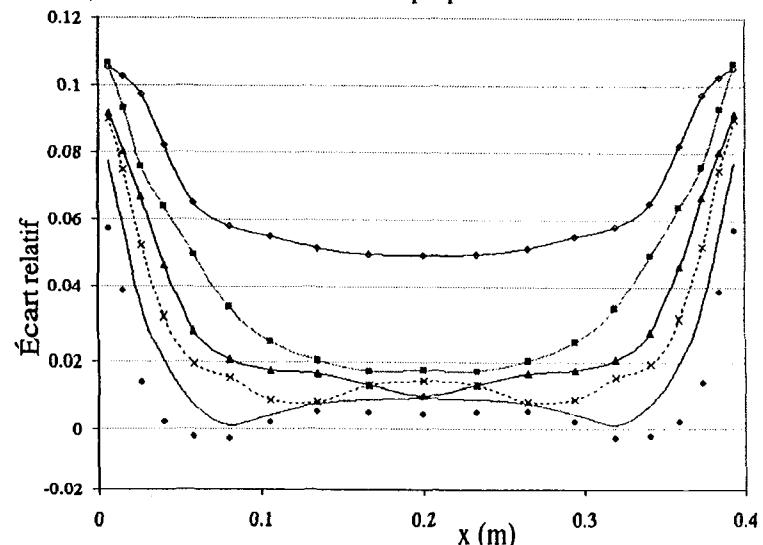
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

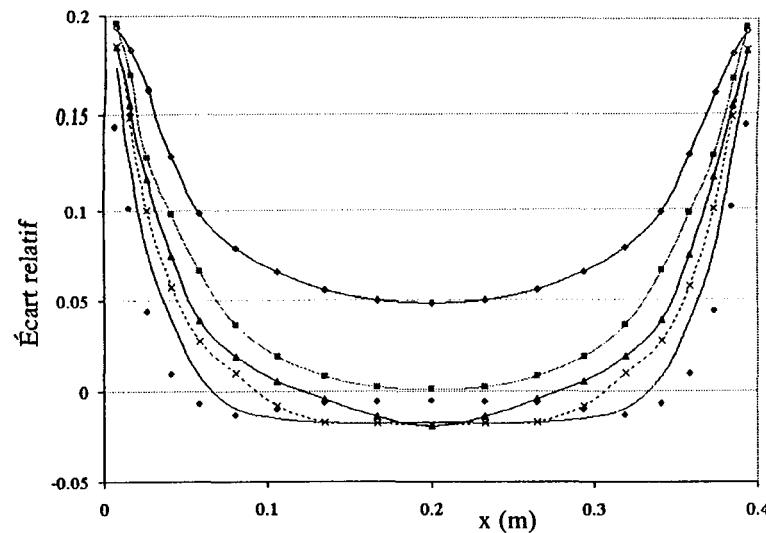


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

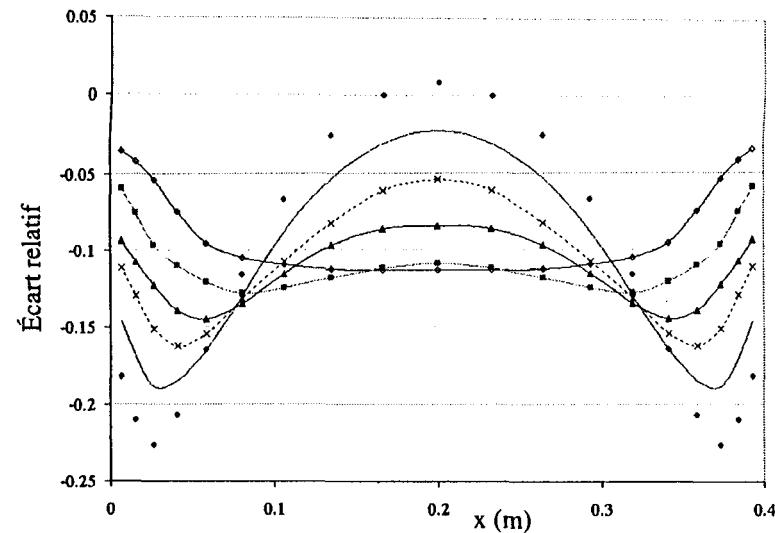


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 31b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=0,4$ m)

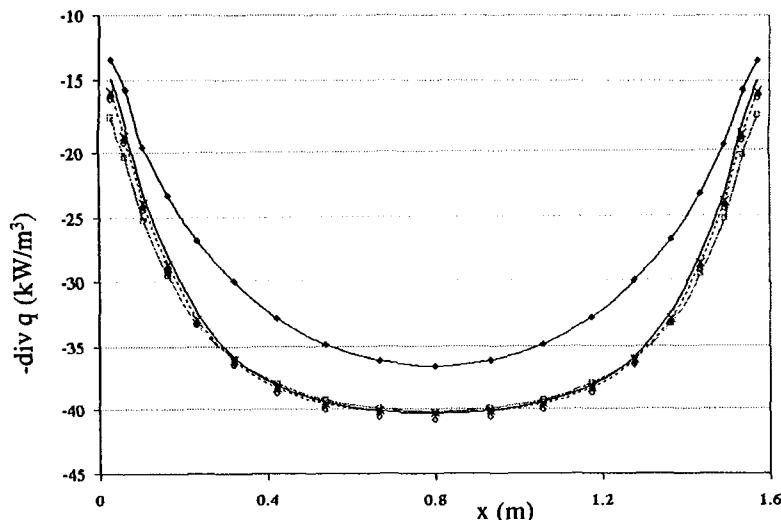


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

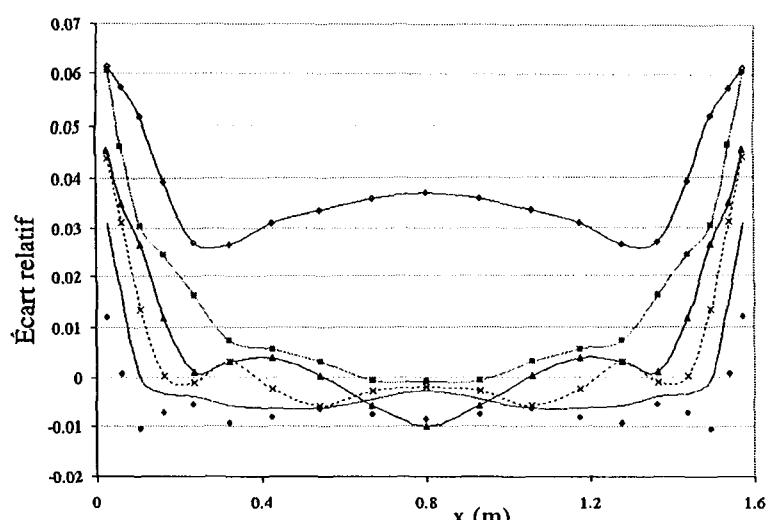


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

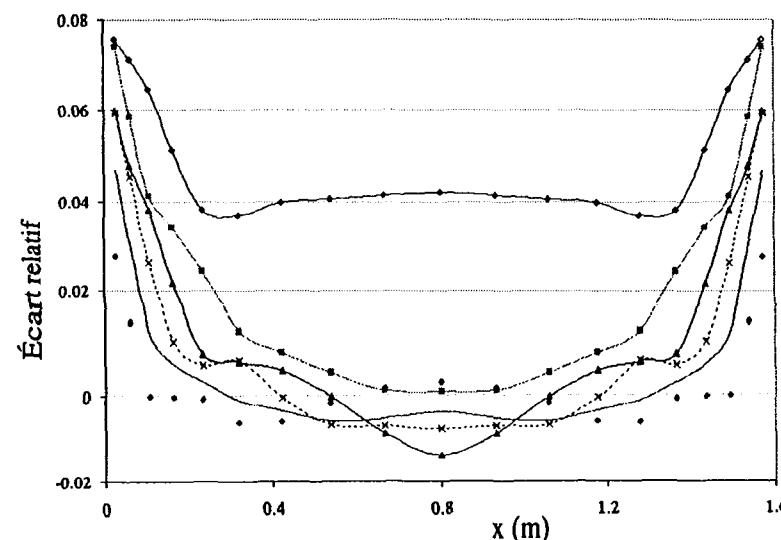
Planche 32a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=1,6$ m)



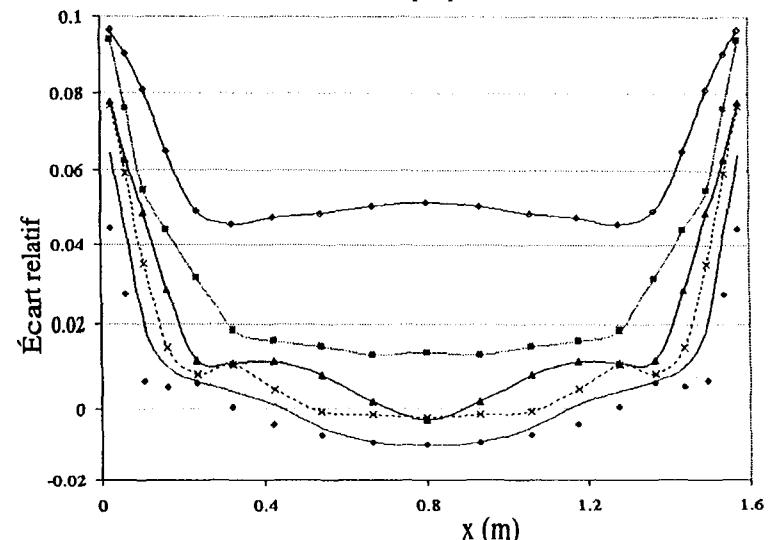
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

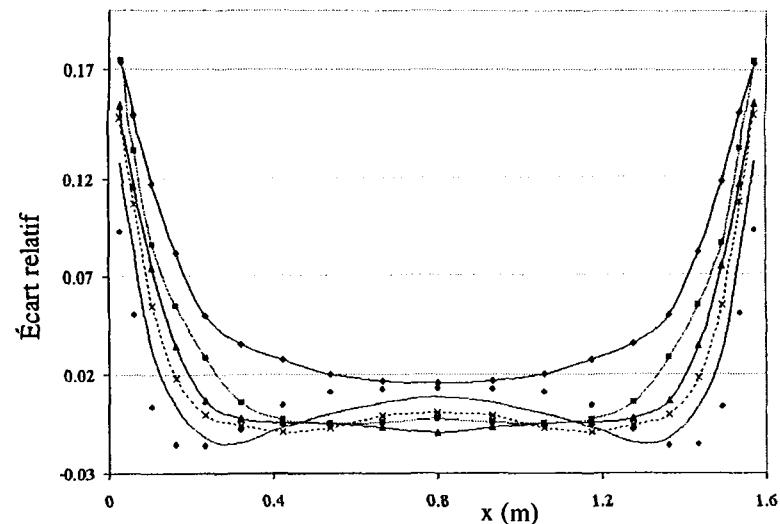


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

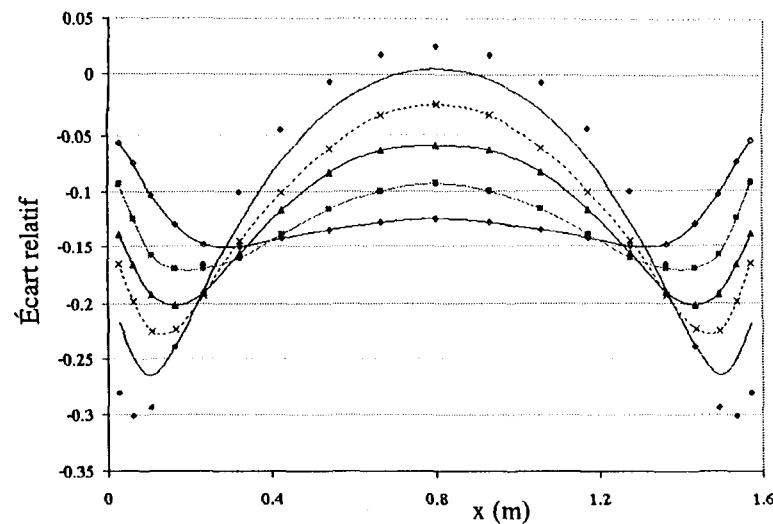


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 32b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène ($d=1,6$ m)

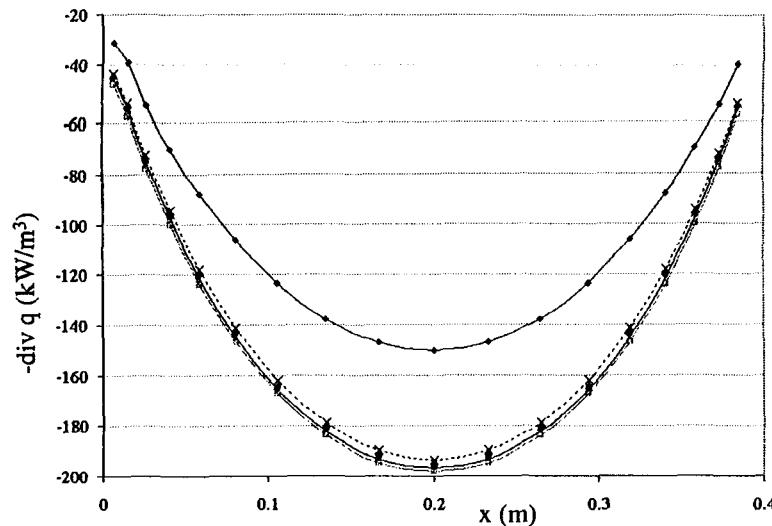


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

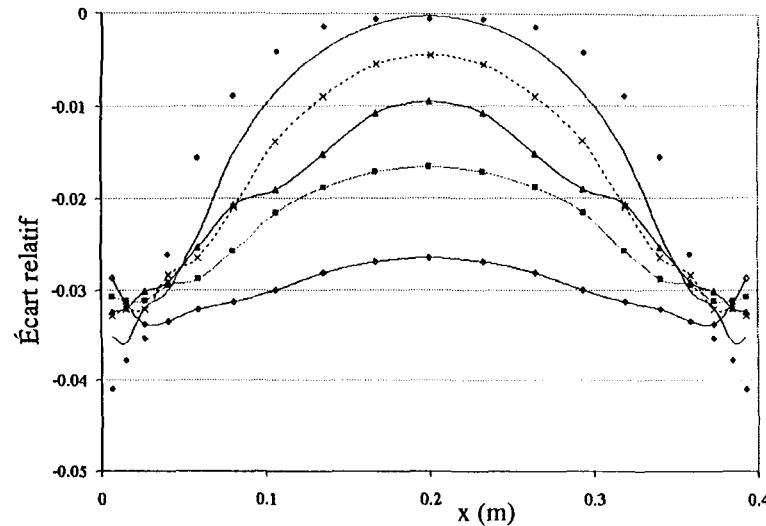


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

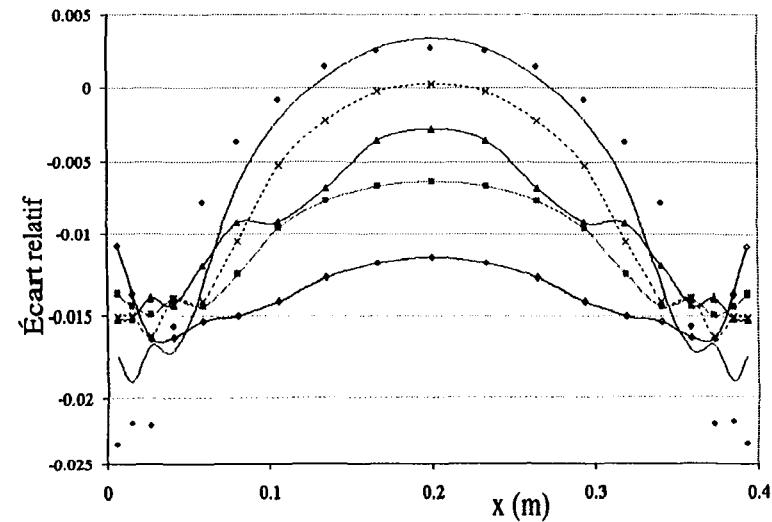
Planche 33a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=0,4$ m)



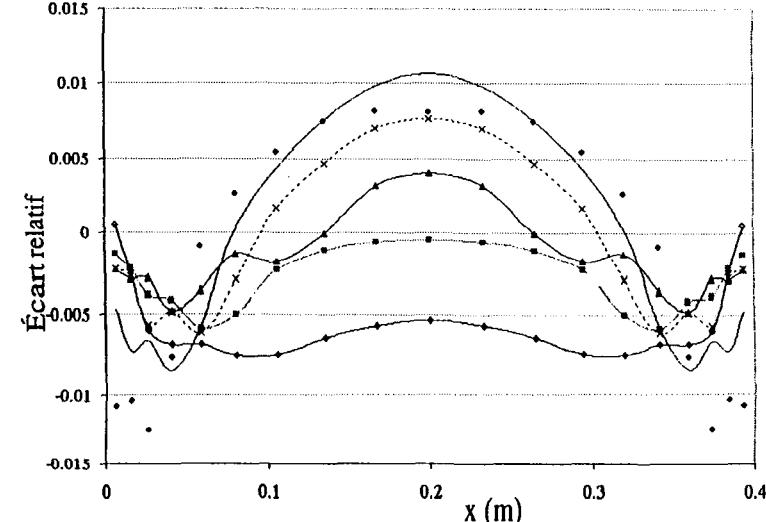
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

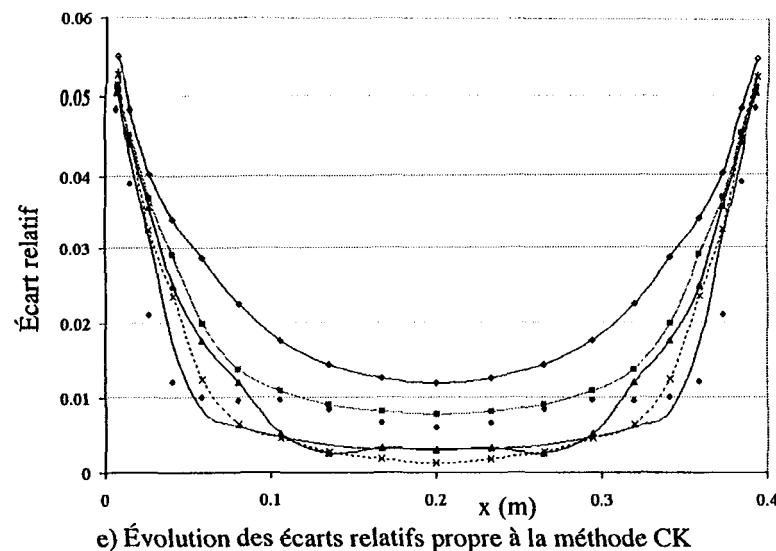


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

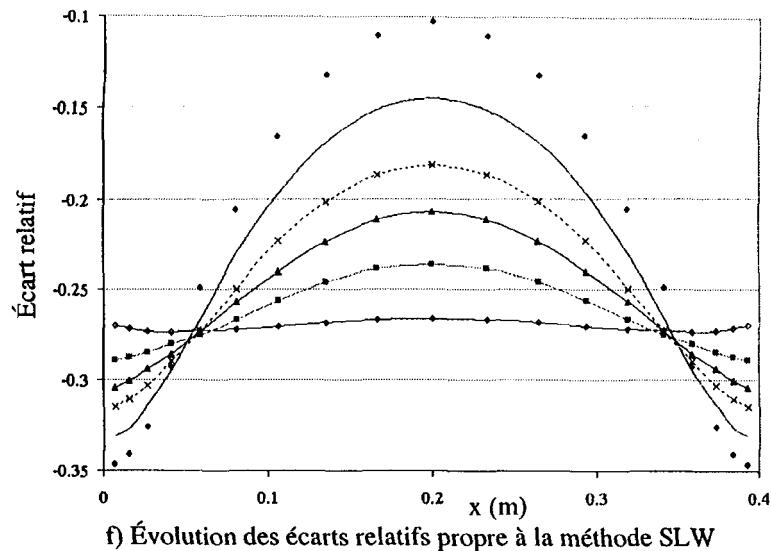


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 33b: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=0,4$ m)

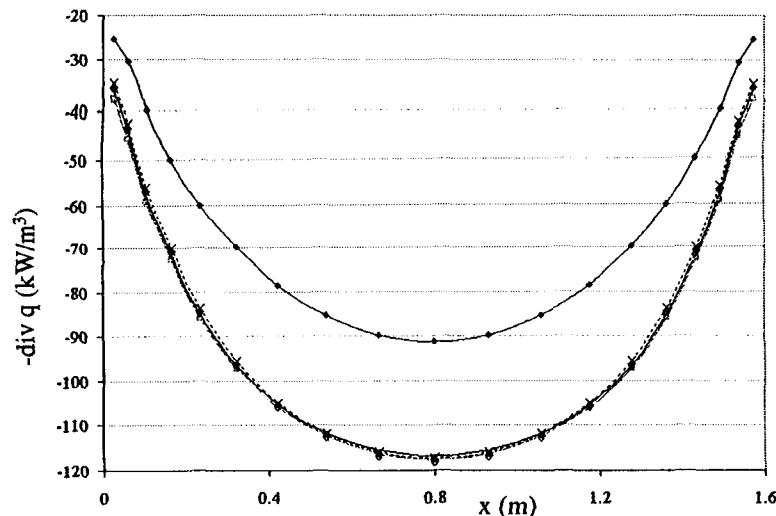


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

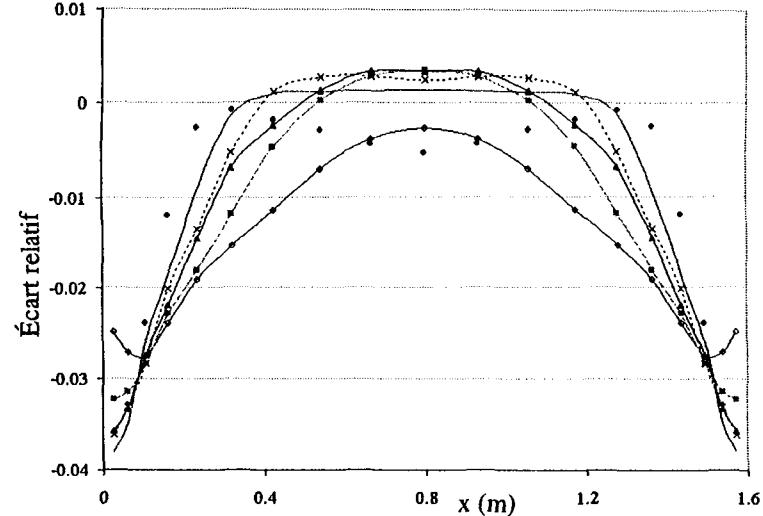


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

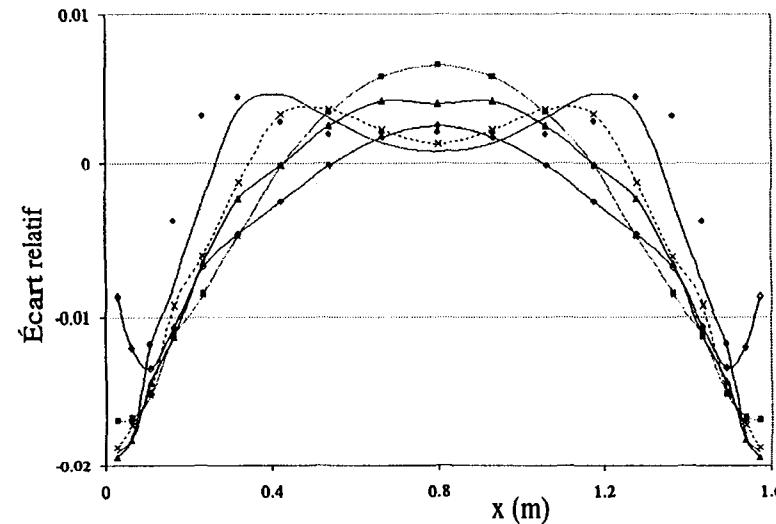
Planche 34a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène ($d=1,6$ m)



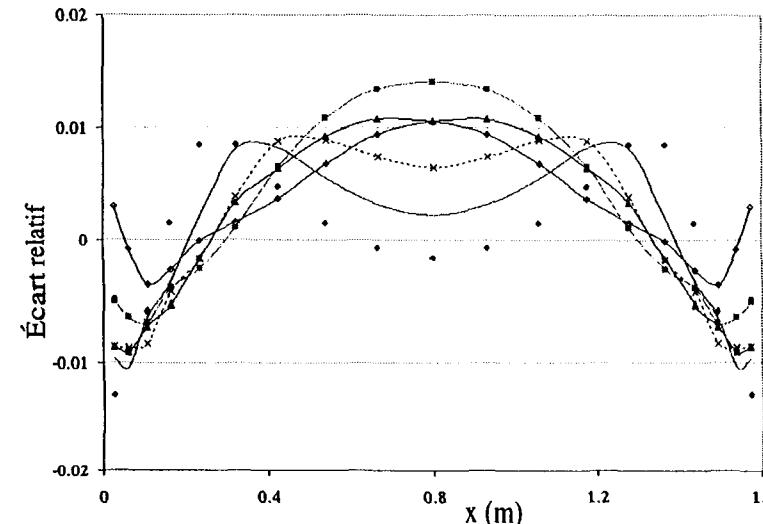
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

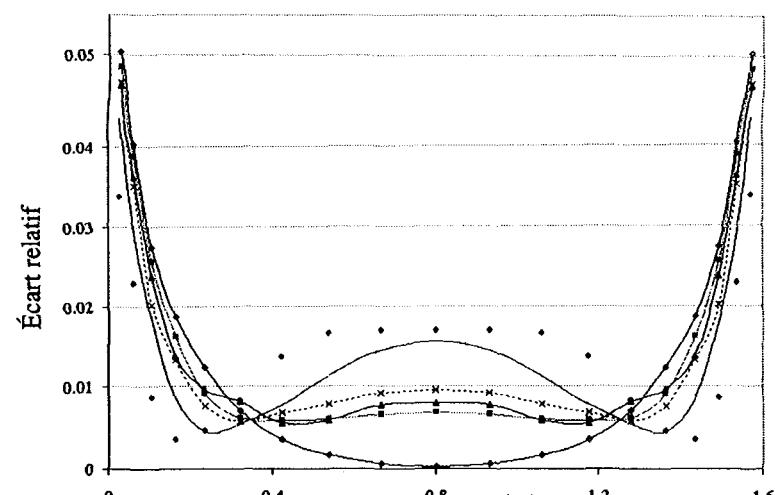


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

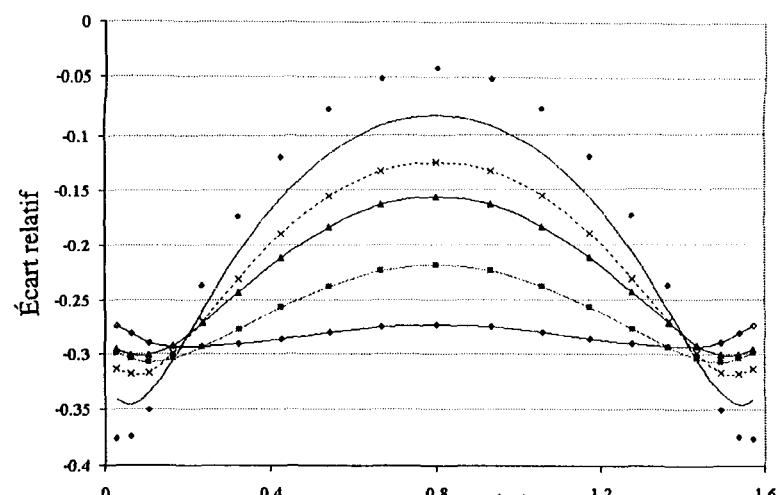


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 34b: Milieu isotherme ($1\ 800\text{K}$) et hétérogène ($d=1,6\text{ m}$)

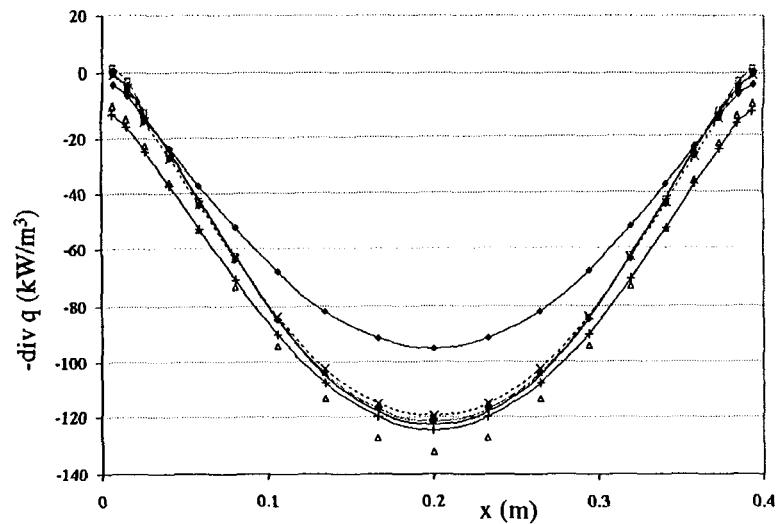


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

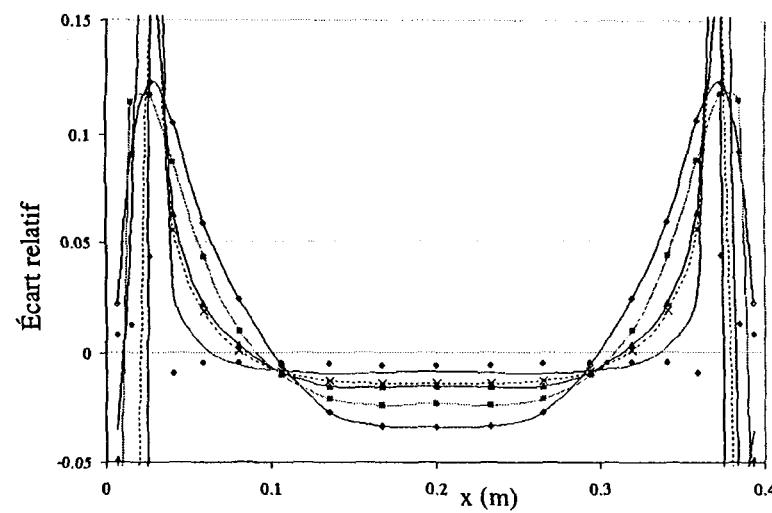


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

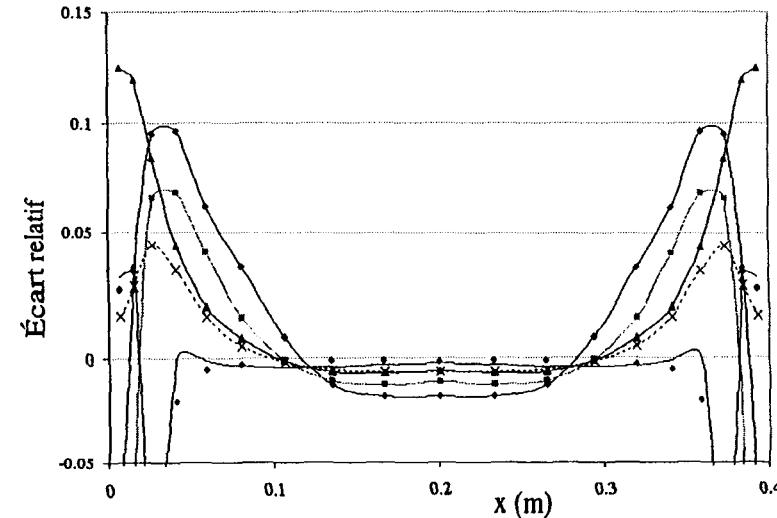
Planche 35a: Milieu anisotherme et homogène ($d=0,4$ m)



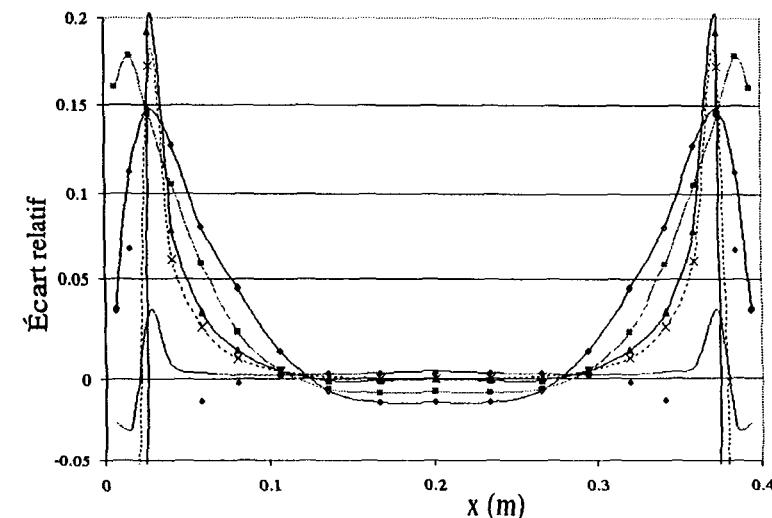
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

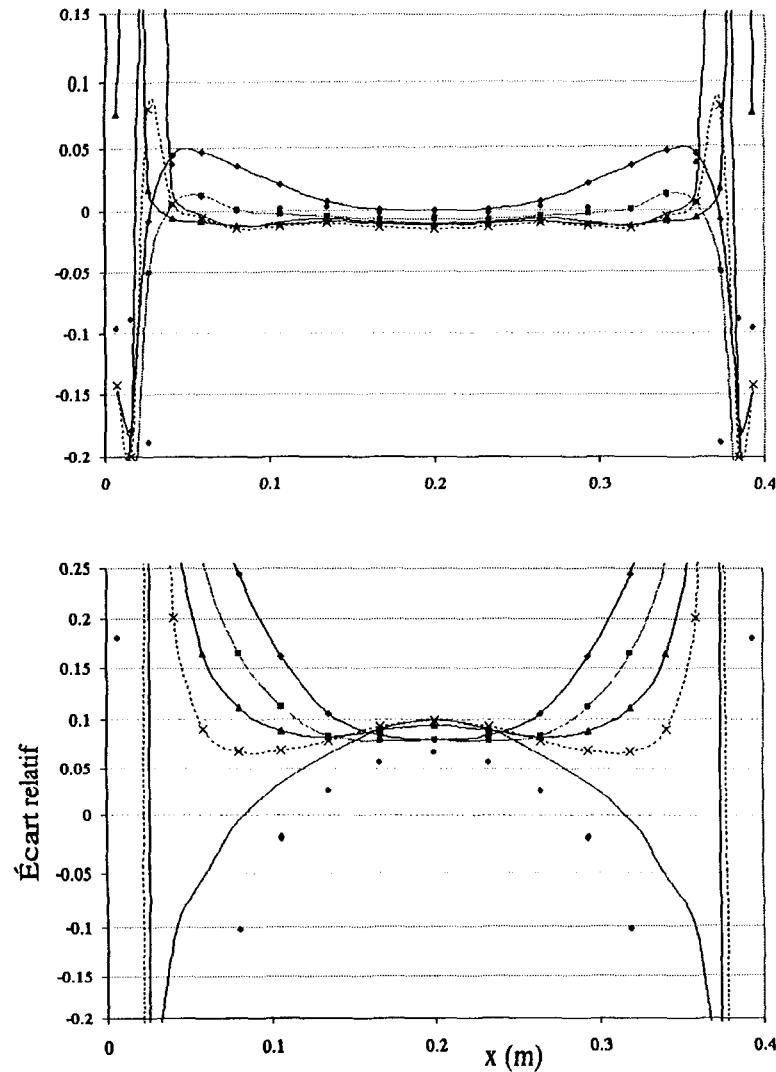


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

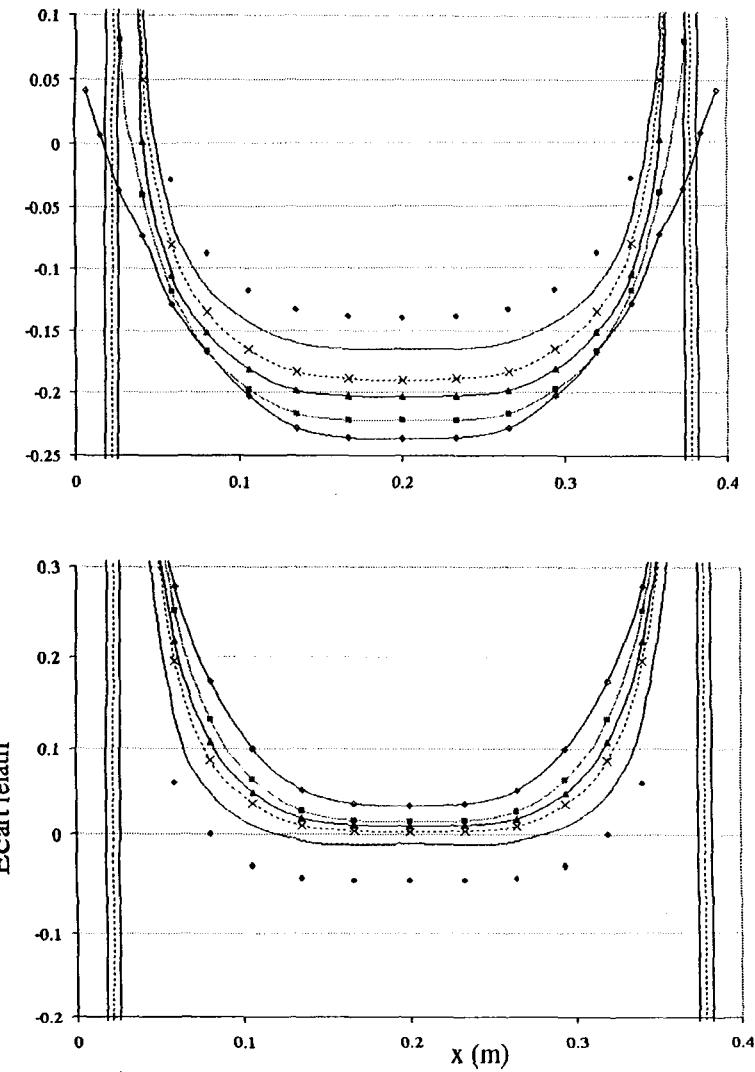


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 35b: Milieu anisotherme et homogène ($d=0,4$ m)

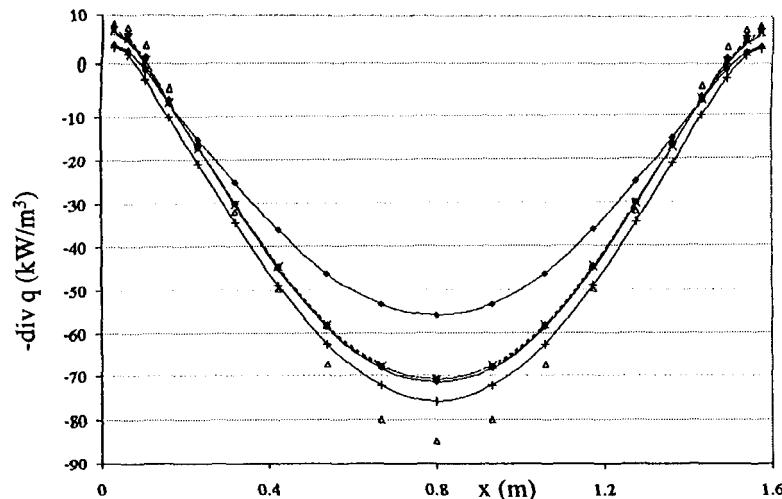


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

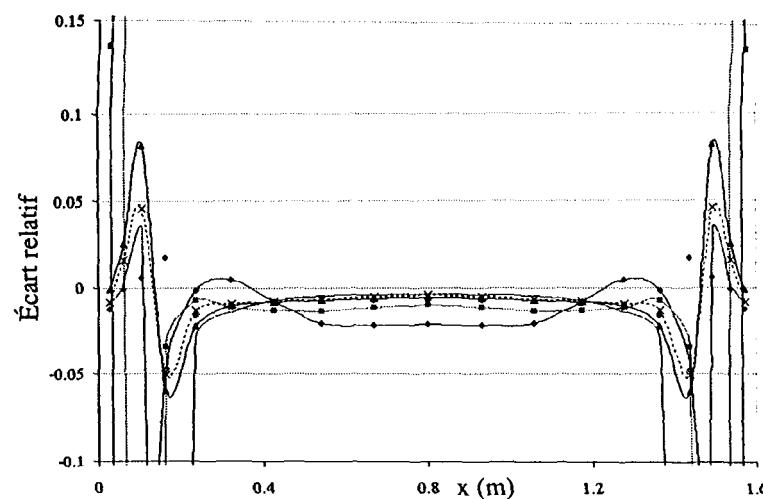


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Pierrot)

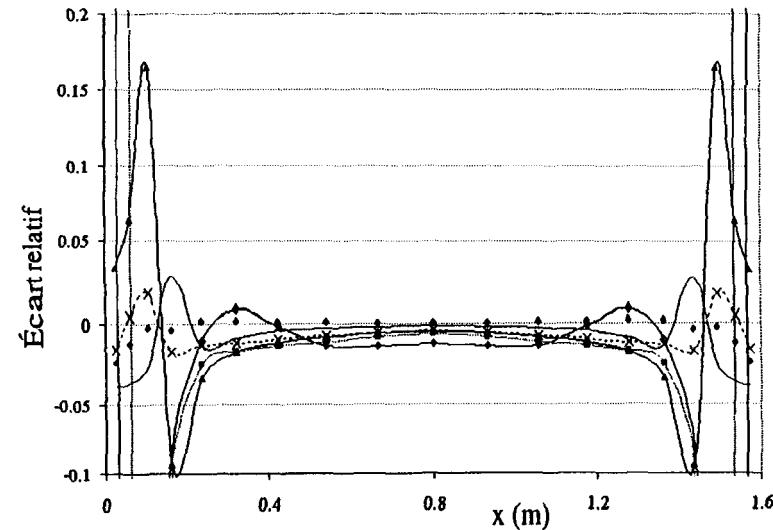
Planche 36a: Milieu anisotherme et homogène ($d=1,6$ m)



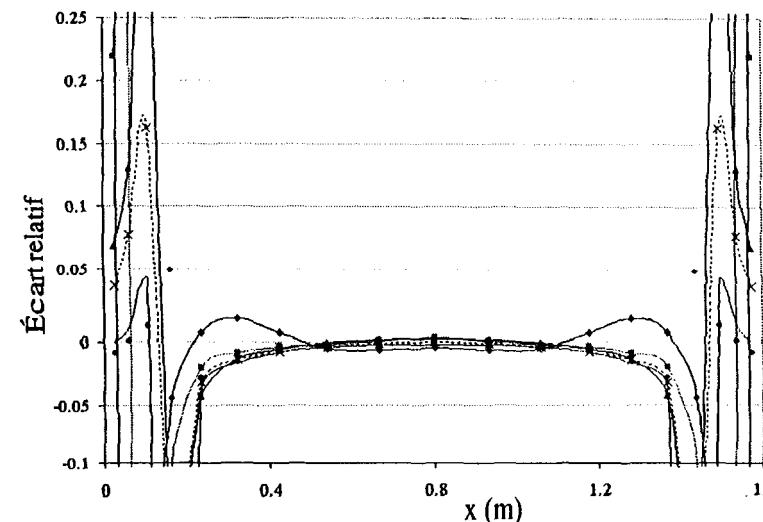
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

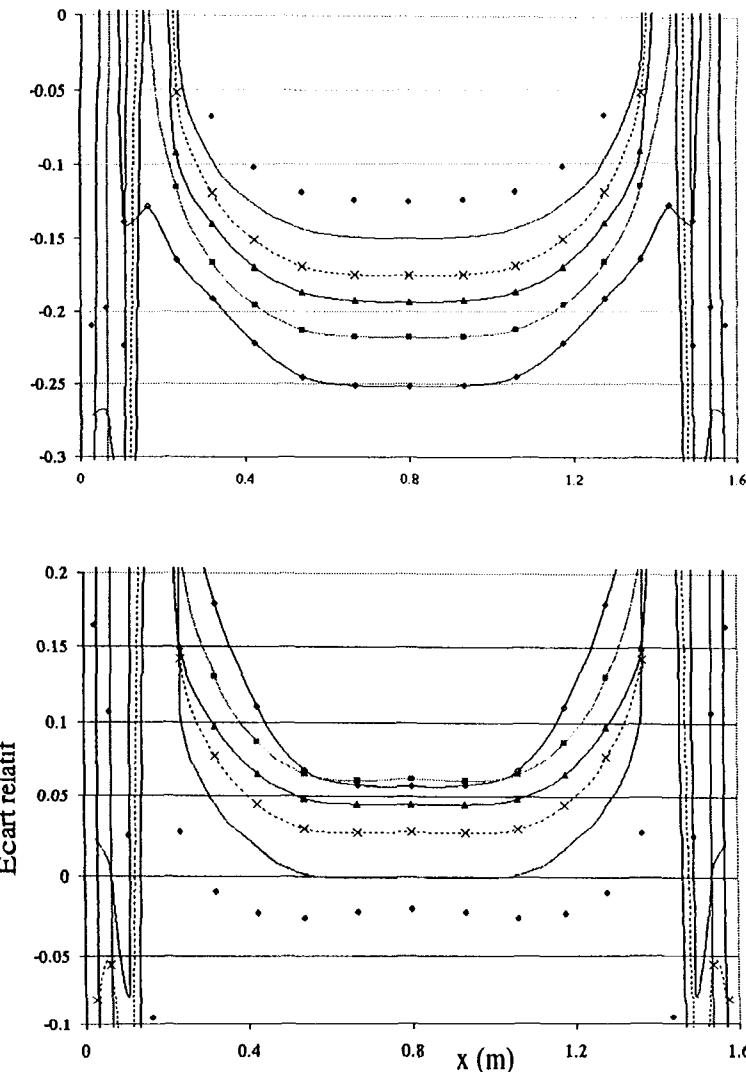
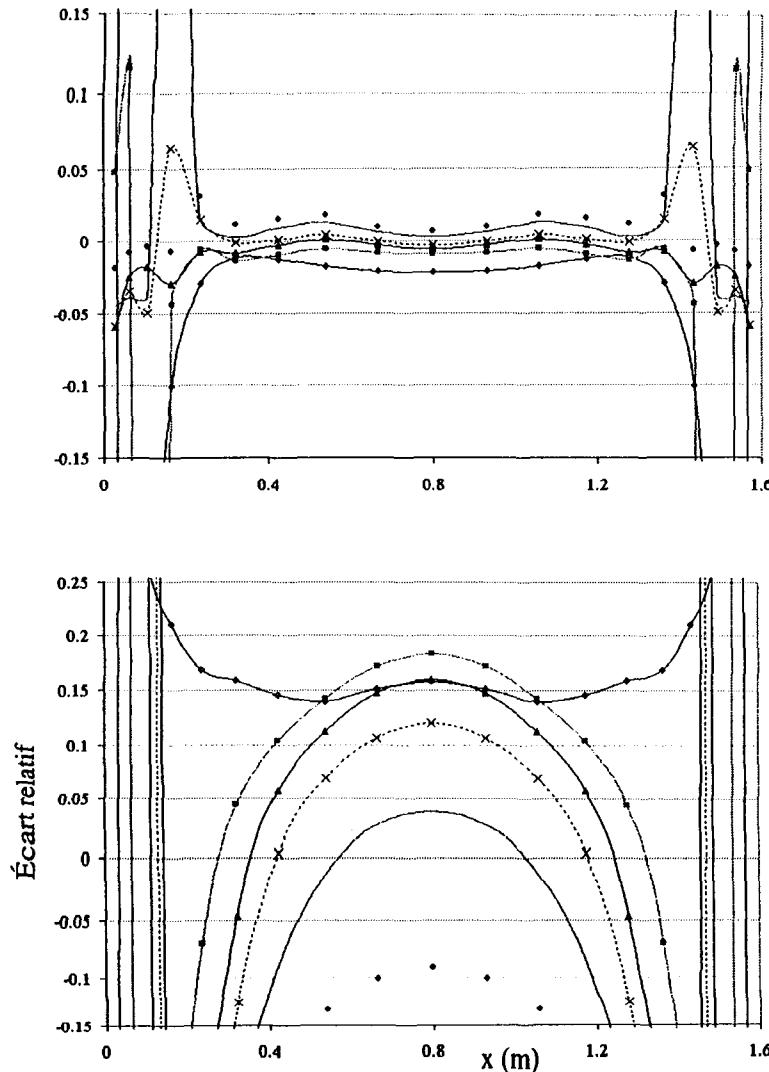


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10



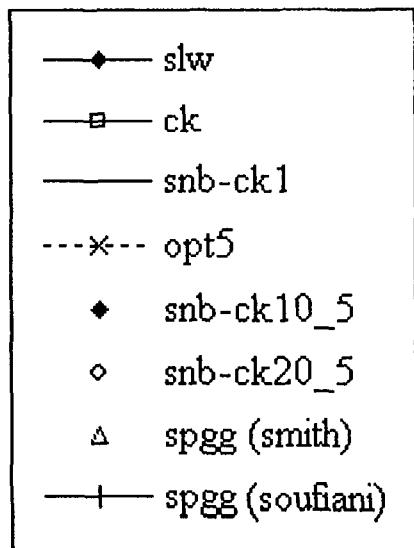
d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 36b: Milieu anisotherme et homogène ($d=1,6$ m)



Planches 37 à 54: Comparaisons avec le mélange $\text{CO}_2+\text{H}_2\text{O}$

Légende utilisée pour les résultats des flux pariétaux



Légende utilisée pour les résultats de la divergence du flux

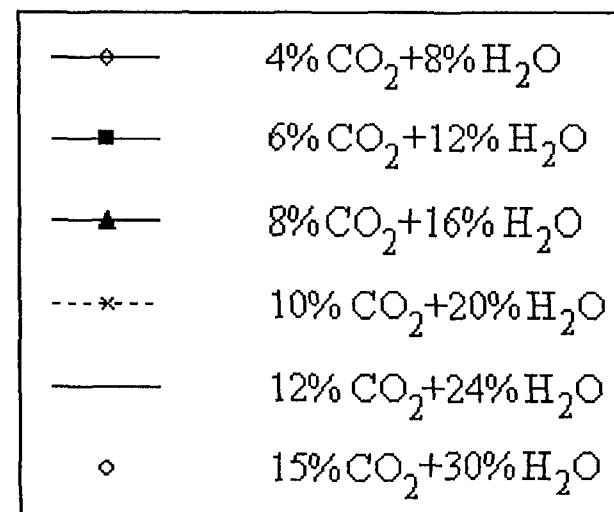
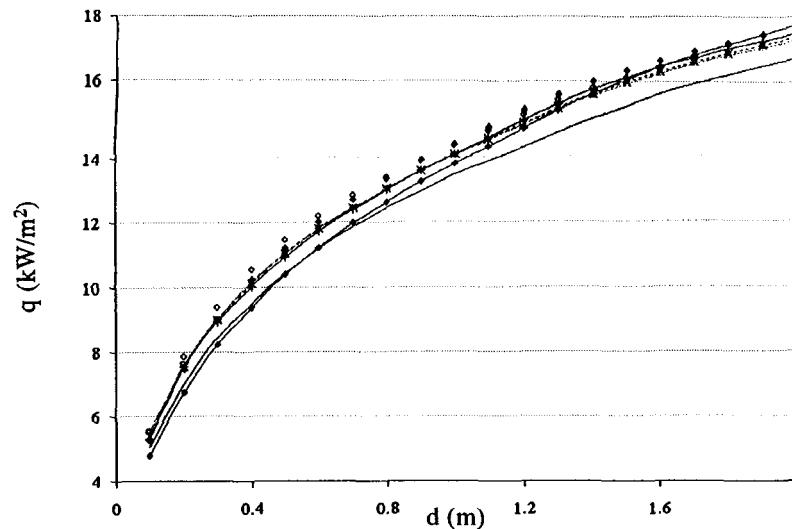
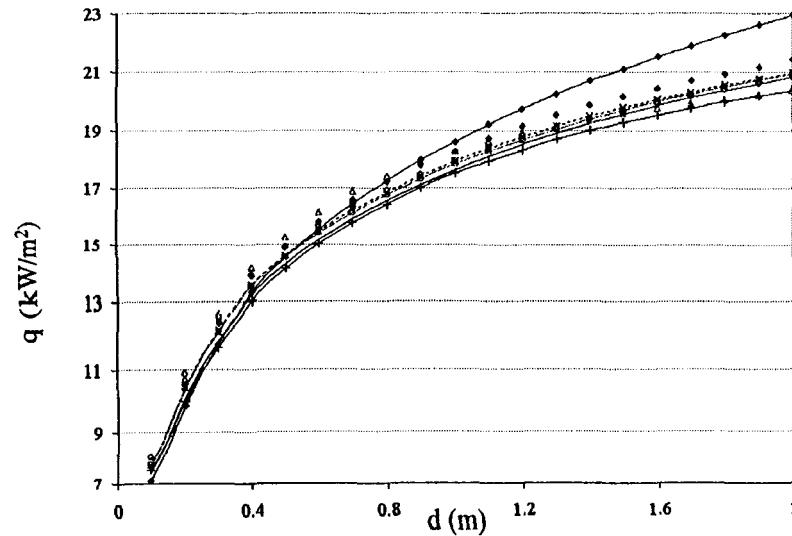


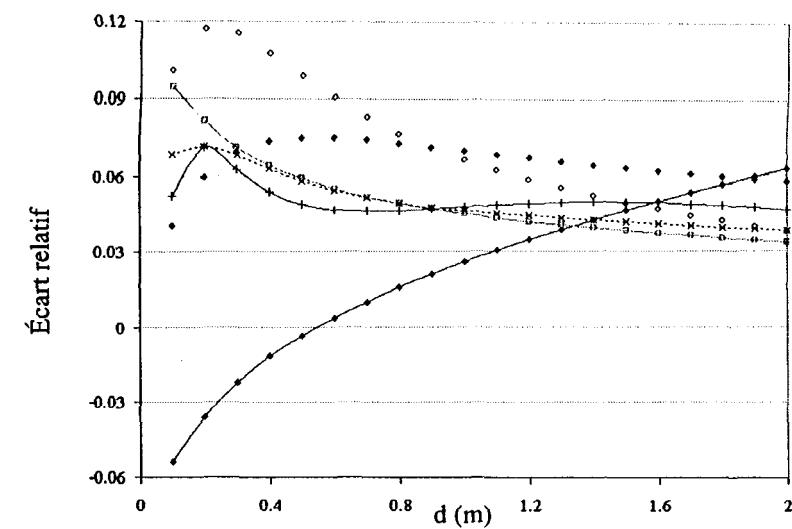
Planche 37a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène



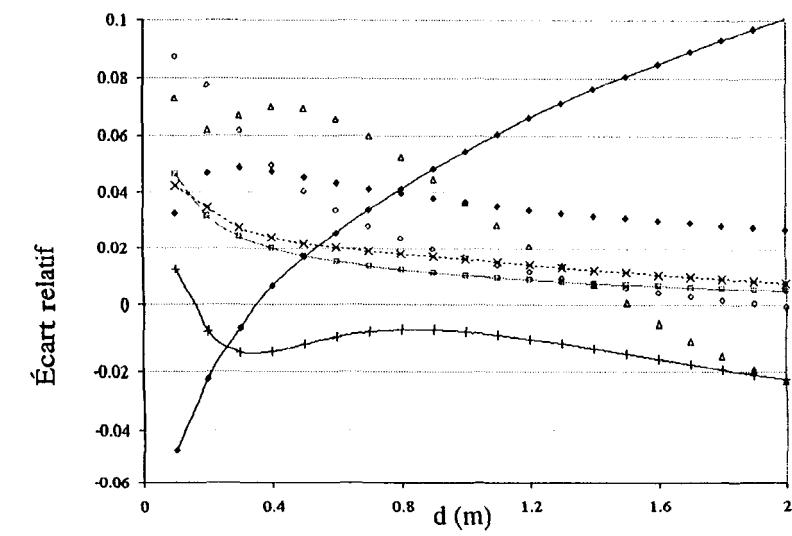
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% $\text{CO}_2+10\% \text{H}_2\text{O}$



c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% $\text{CO}_2+20\% \text{H}_2\text{O}$

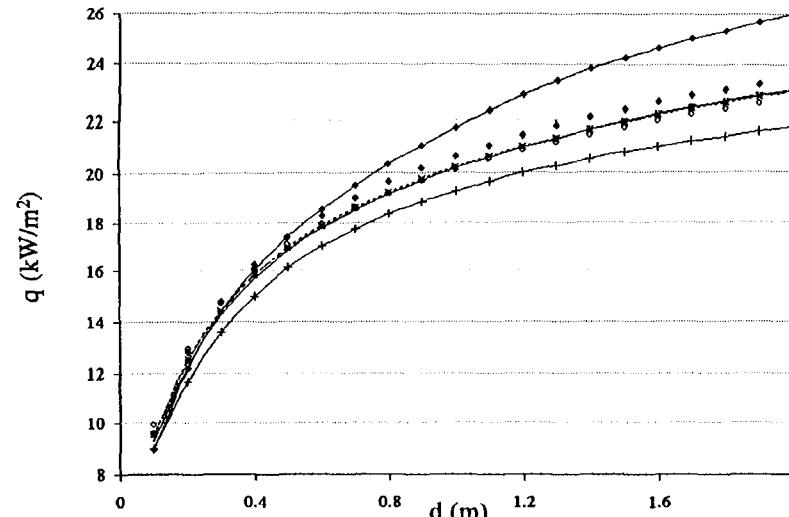


b) Évolution des écarts relatifs avec 5% $\text{CO}_2+10\% \text{H}_2\text{O}$

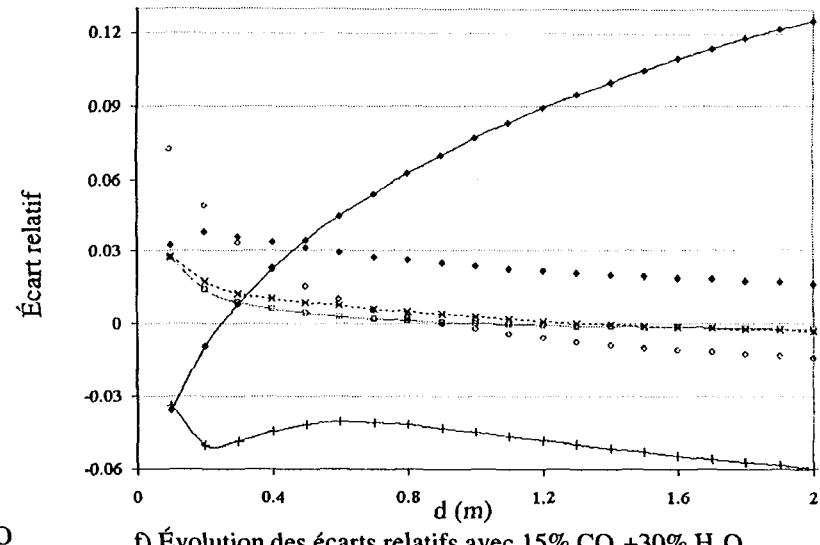


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% $\text{CO}_2+20\% \text{H}_2\text{O}$

Planche 37b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène

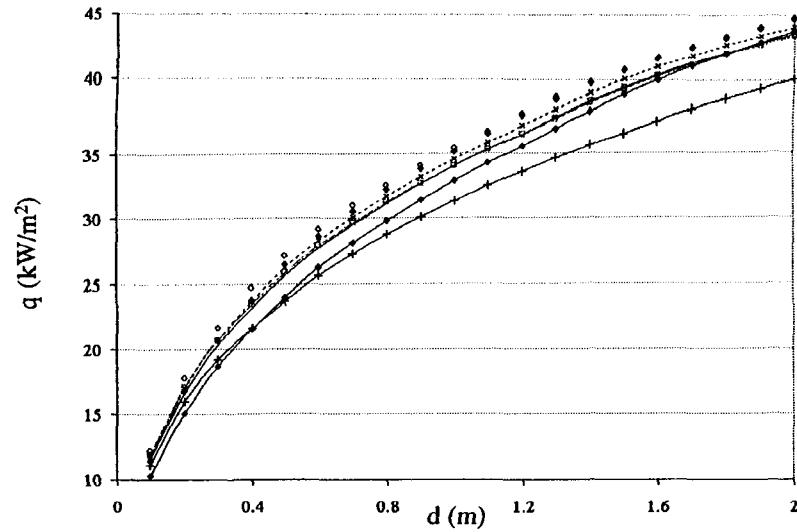


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 15% CO_2 +30% H_2O

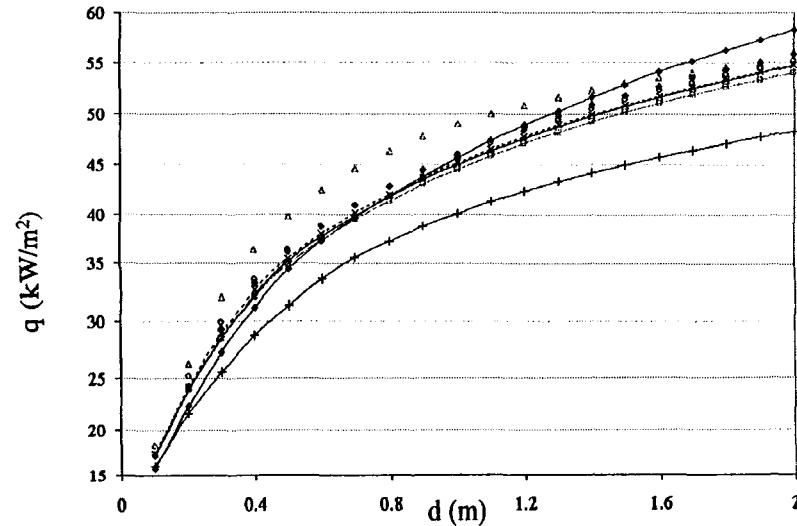


f) Évolution des écarts relatifs avec 15% CO_2 +30% H_2O

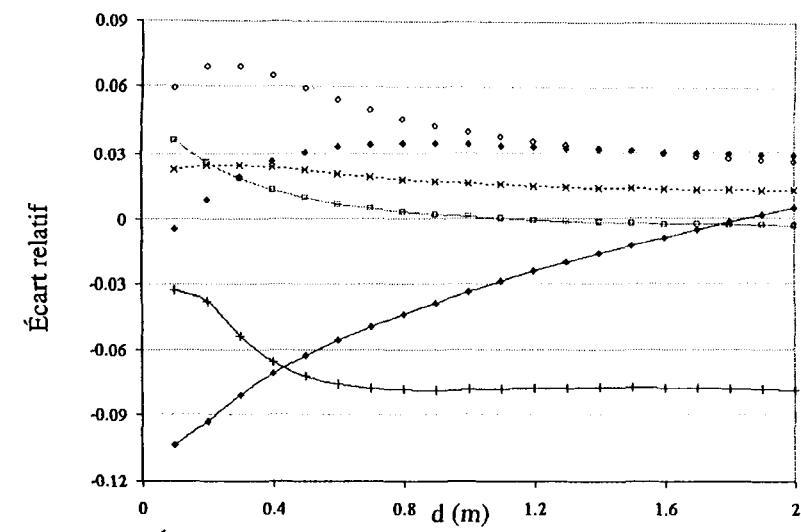
Planche 38a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène



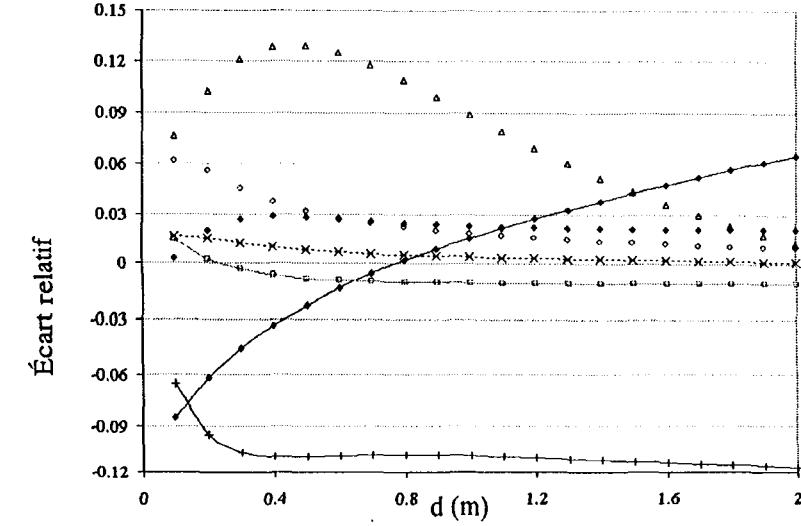
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% $\text{CO}_2+10\%$ H_2O



c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% $\text{CO}_2+20\%$ H_2O

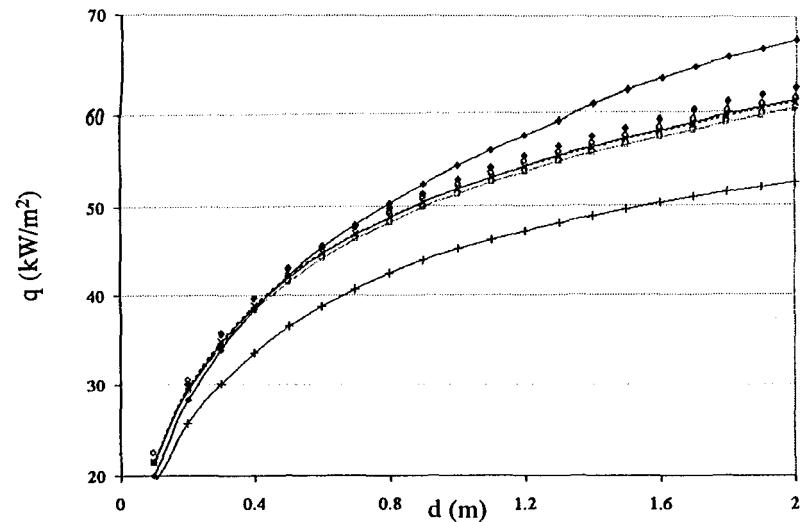


b) Évolution des écarts relatifs avec 5% $\text{CO}_2+10\%$ H_2O

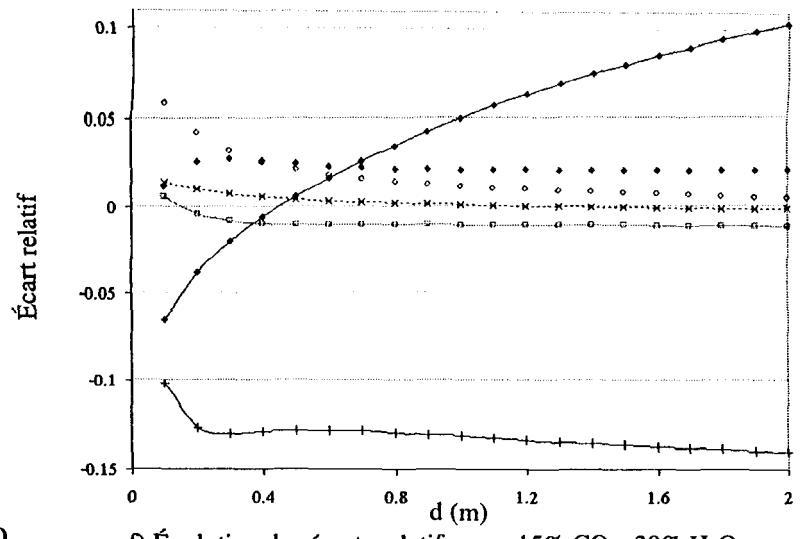


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% $\text{CO}_2+20\%$ H_2O

Planche 38b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène

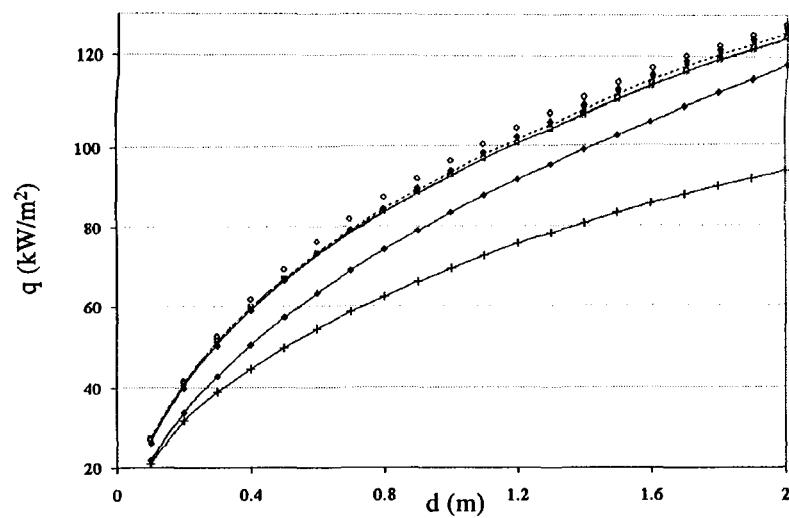


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 15% CO_2 +30% H_2O

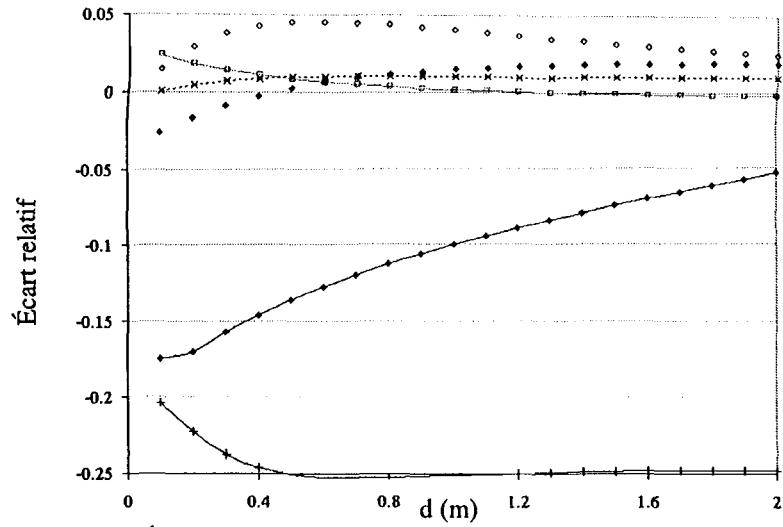


f) Évolution des écarts relatifs avec 15% CO_2 +30% H_2O

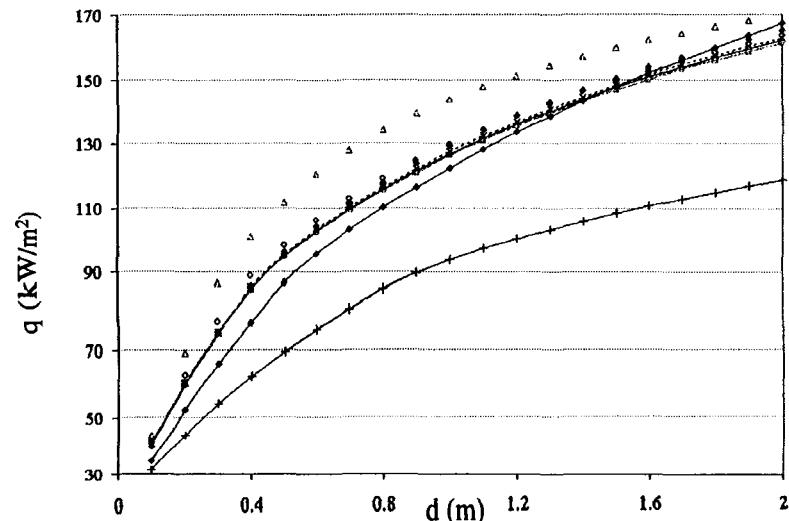
Planche 39a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène



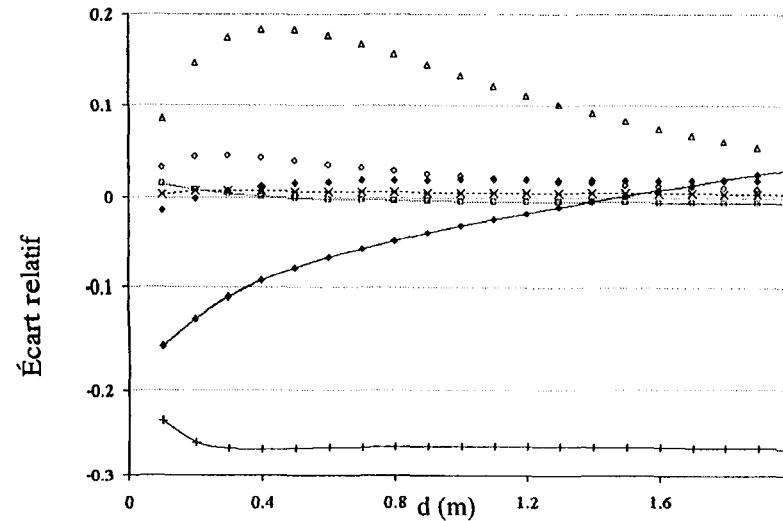
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% $\text{CO}_2+10\%$ H_2O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% $\text{CO}_2+10\%$ H_2O

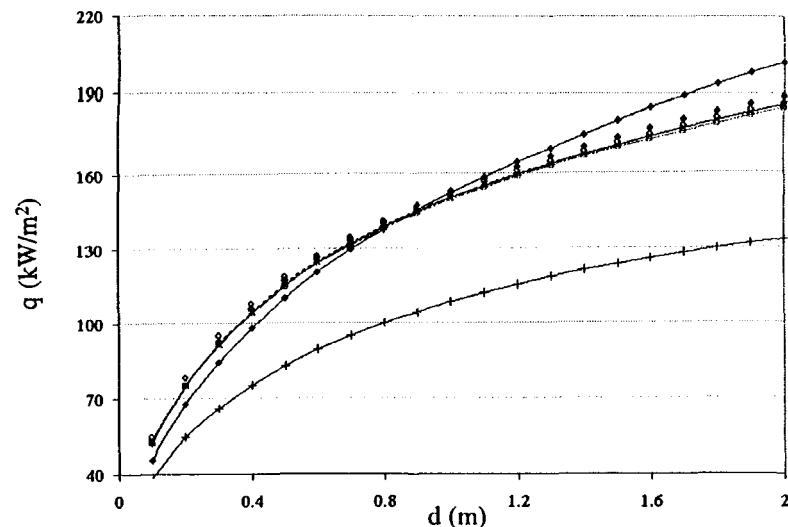


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% $\text{CO}_2+20\%$ H_2O

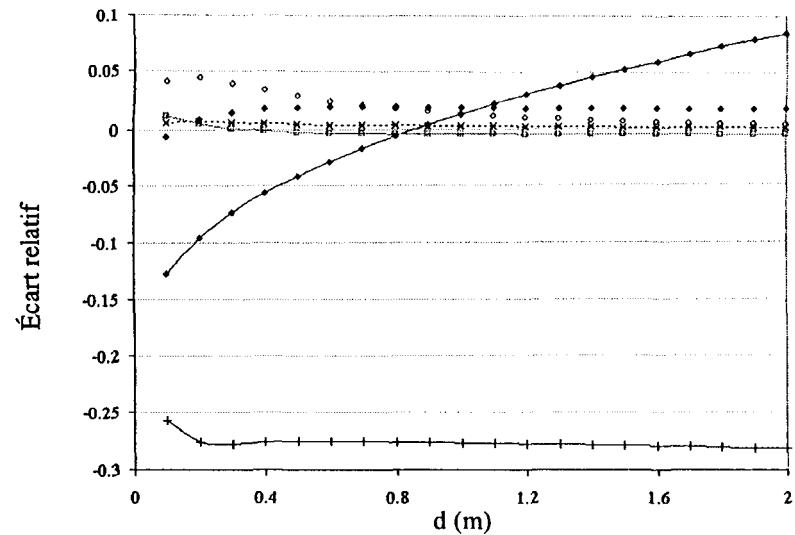


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% $\text{CO}_2+20\%$ H_2O

Planche 39b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène

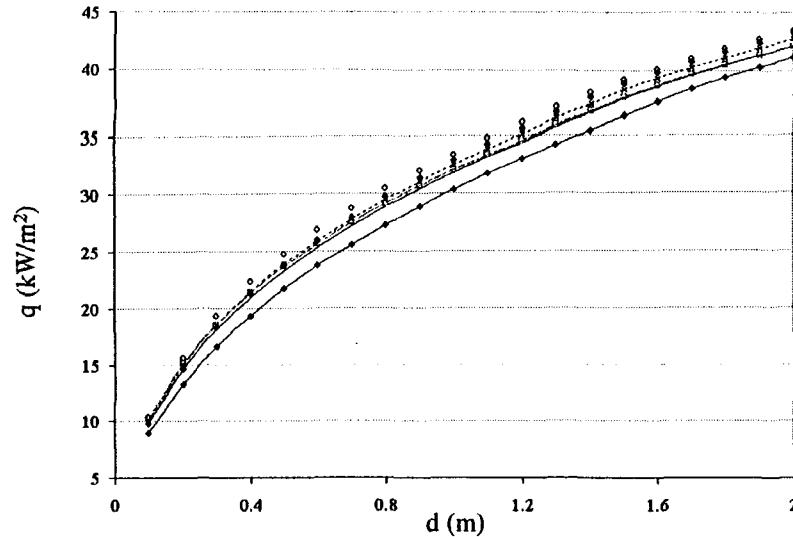


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 15% $\text{CO}_2 + 30\%$ H_2O

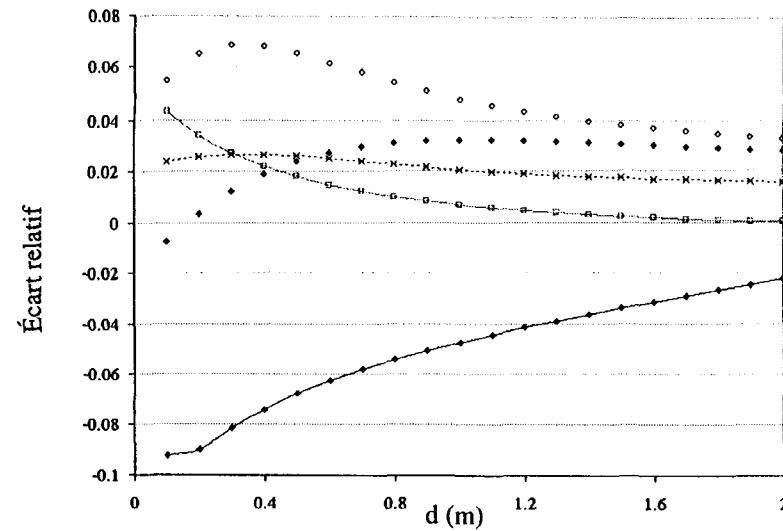


f) Évolution des écarts relatifs avec 15% $\text{CO}_2 + 30\%$ H_2O

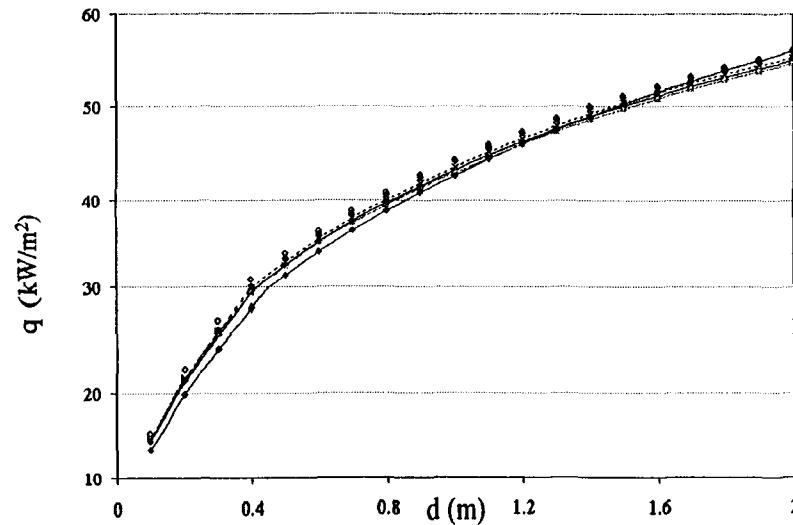
Planche 40a: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène



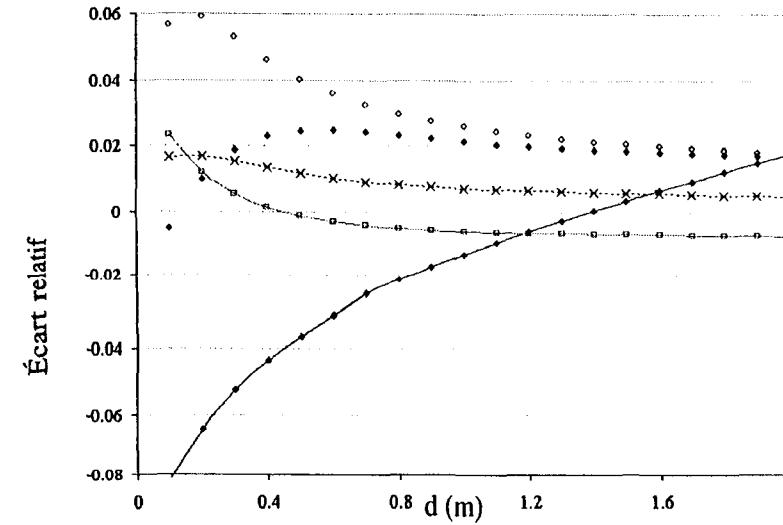
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec $5\% \text{CO}_2 + 10\% \text{H}_2\text{O}$



b) Évolution des écarts relatifs avec $5\% \text{CO}_2 + 10\% \text{H}_2\text{O}$

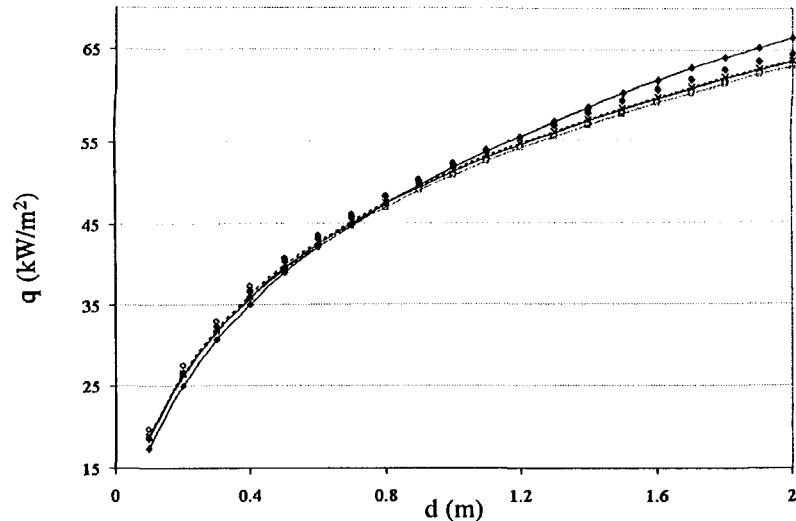


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec $10\% \text{CO}_2 + 20\% \text{H}_2\text{O}$

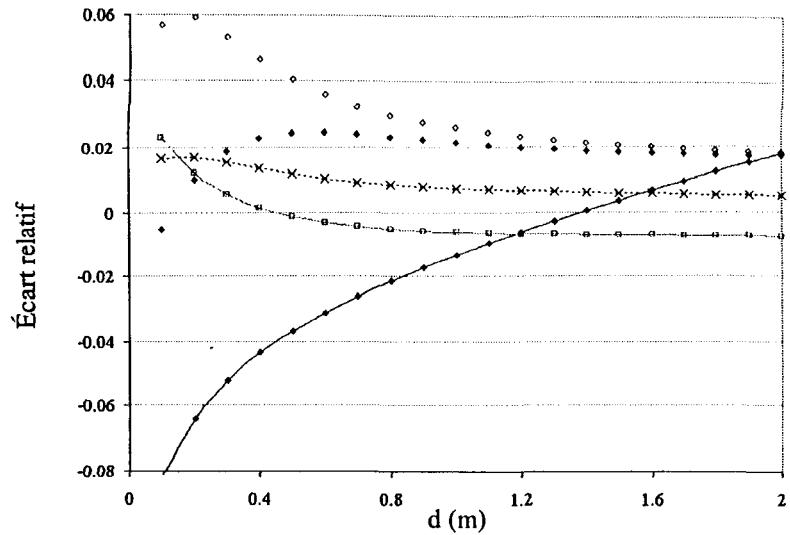


d) Évolution des écarts relatifs avec $10\% \text{CO}_2 + 20\% \text{H}_2\text{O}$

Planche 40b: Milieu isotherme (1 300K) et hétérogène

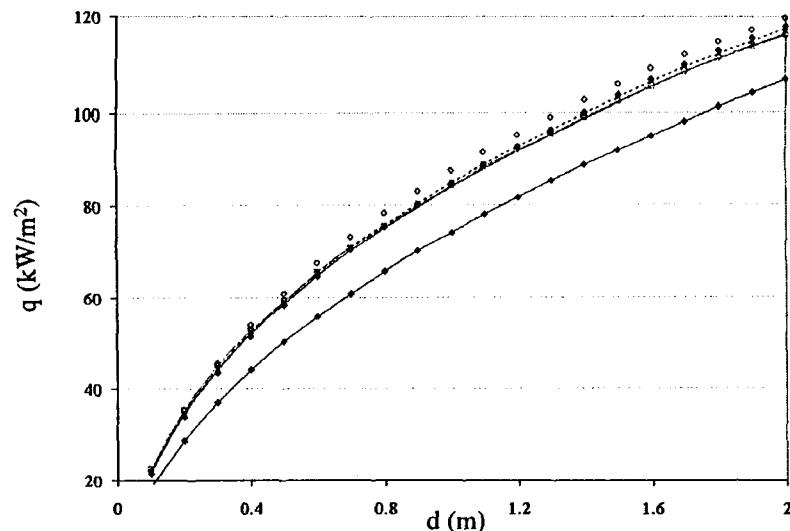


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 15% $\text{CO}_2+30\%$ H_2O

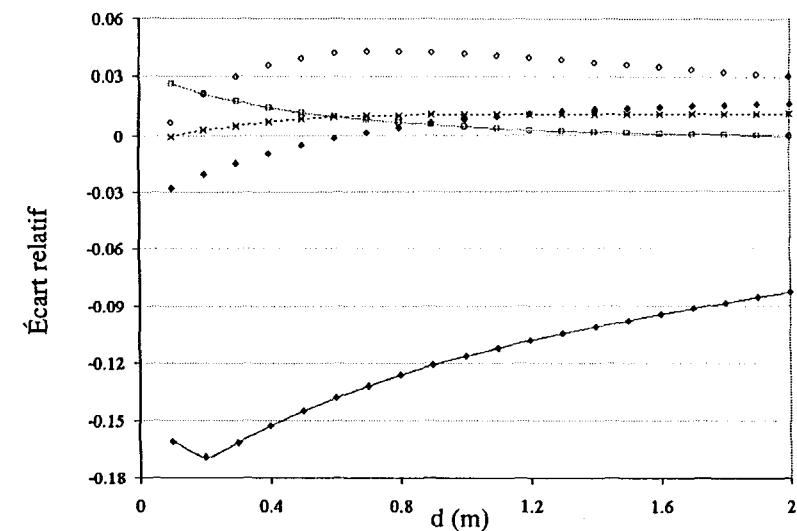


f) Évolution des écarts relatifs avec 15% $\text{CO}_2+30\%$ H_2O

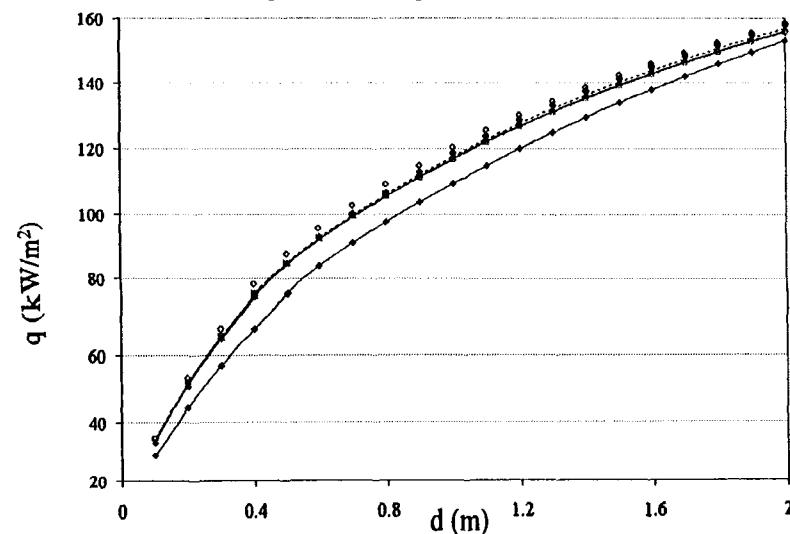
Planche 41a: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène



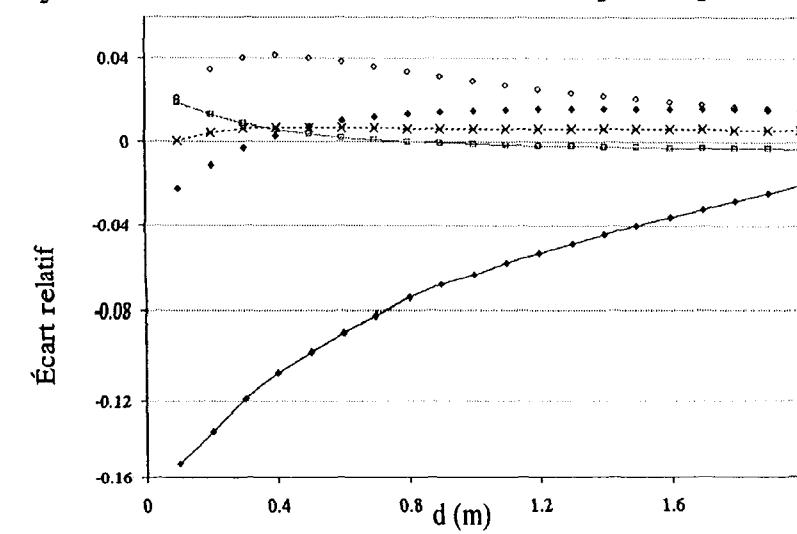
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO_2 +10% H_2O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO_2 +10% H_2O

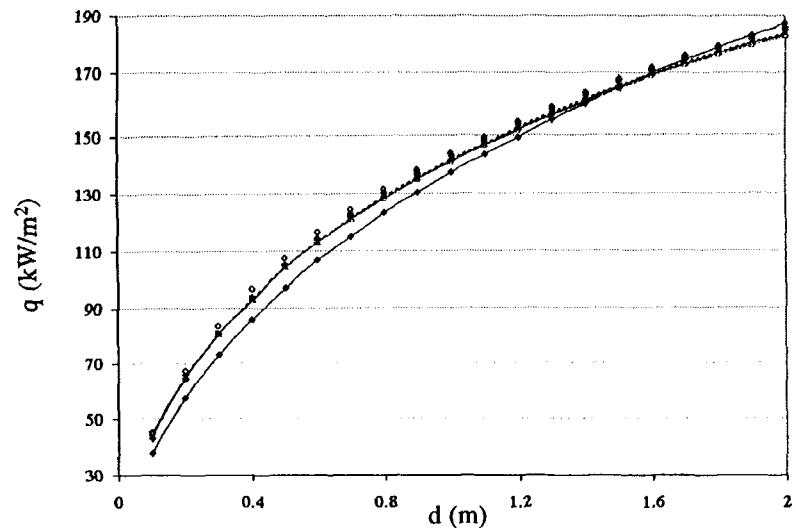


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO_2 +20% H_2O

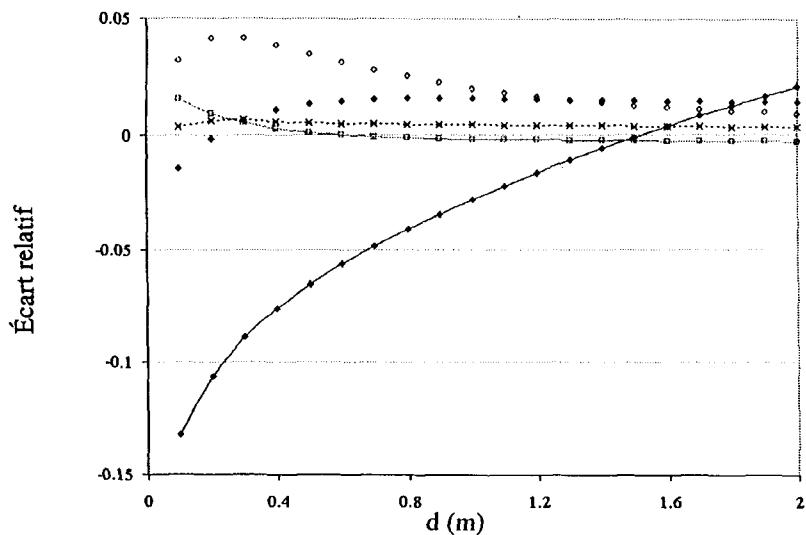


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO_2 +20% H_2O

Planche 41b: Milieu isotherme (1 800K) et hétérogène

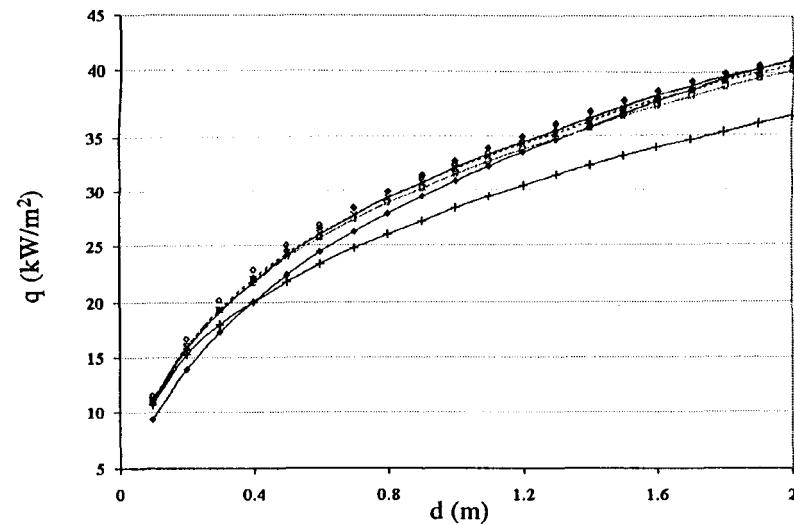


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 15% CO_2 +30% H_2O

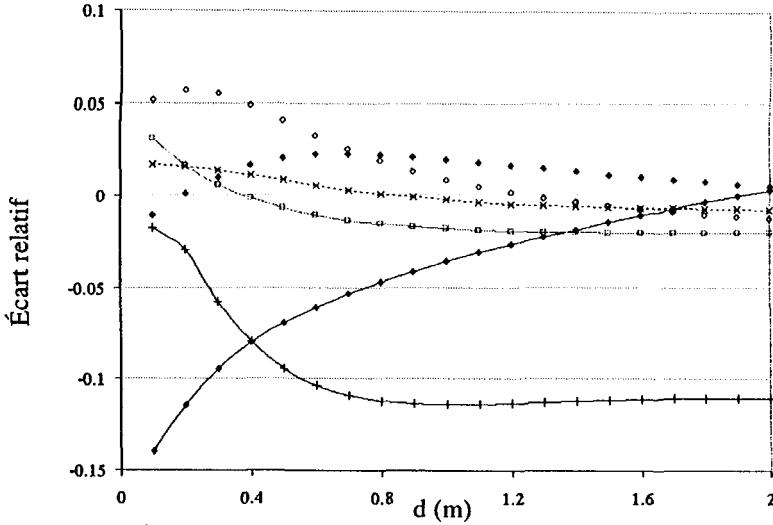


f) Évolution des écarts relatifs avec 15% CO_2 +30% H_2O

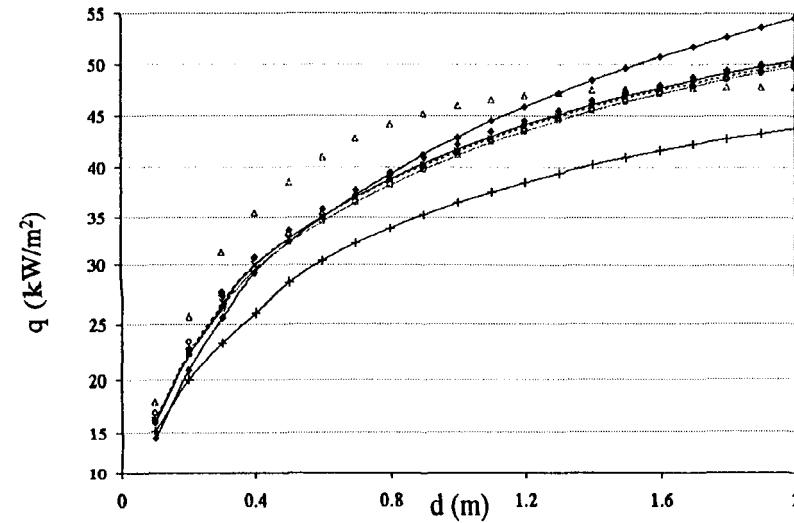
Planche 42a: Milieu anisotherme et homogène



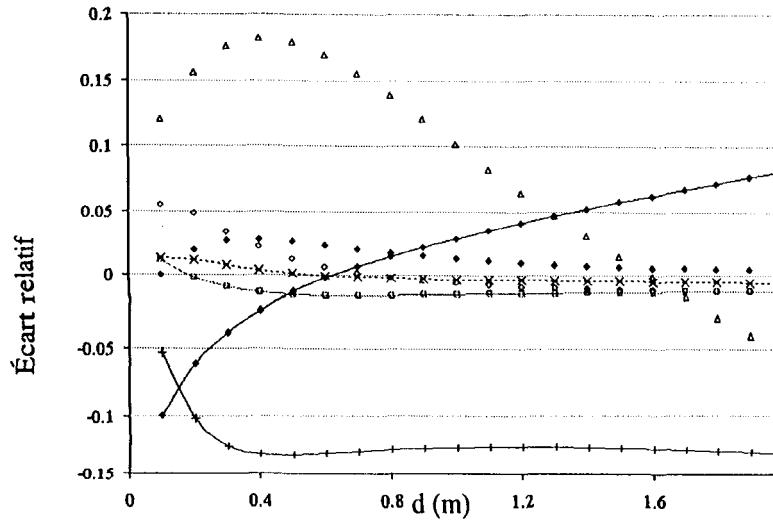
a) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 5% CO₂+10% H₂O



b) Évolution des écarts relatifs avec 5% CO₂+10% H₂O

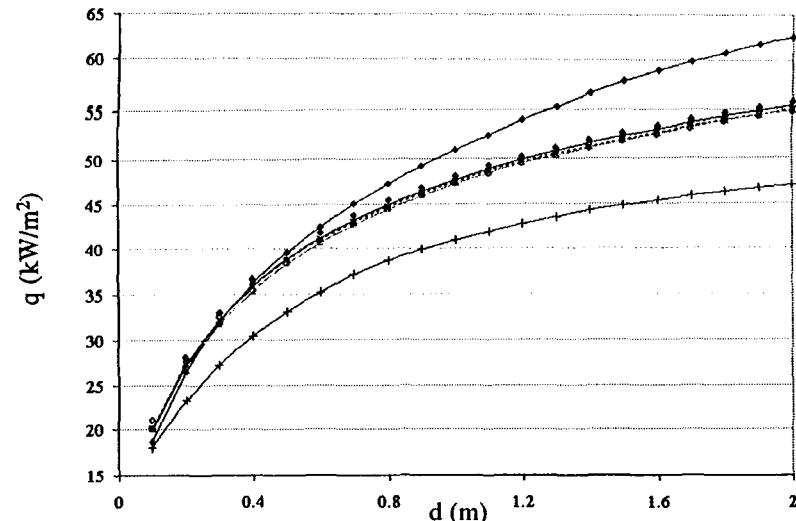


c) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 10% CO₂+20% H₂O

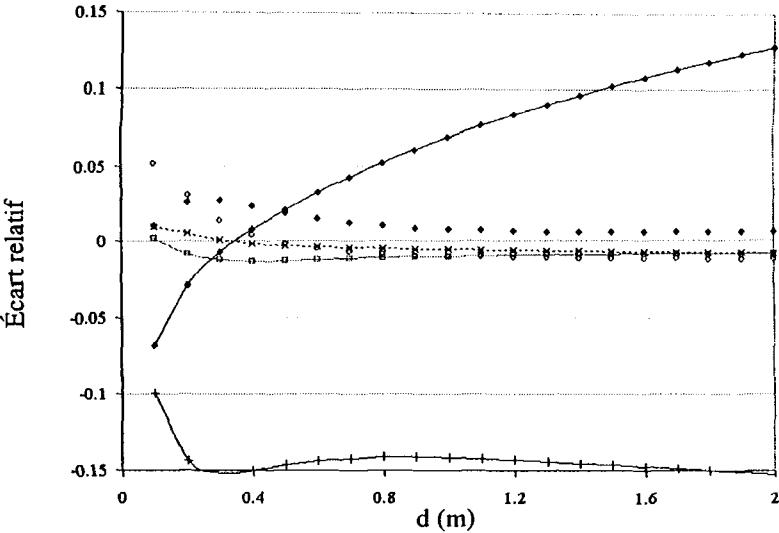


d) Évolution des écarts relatifs avec 10% CO₂+20% H₂O

Planche 42b: Milieu anisotherme et homogène

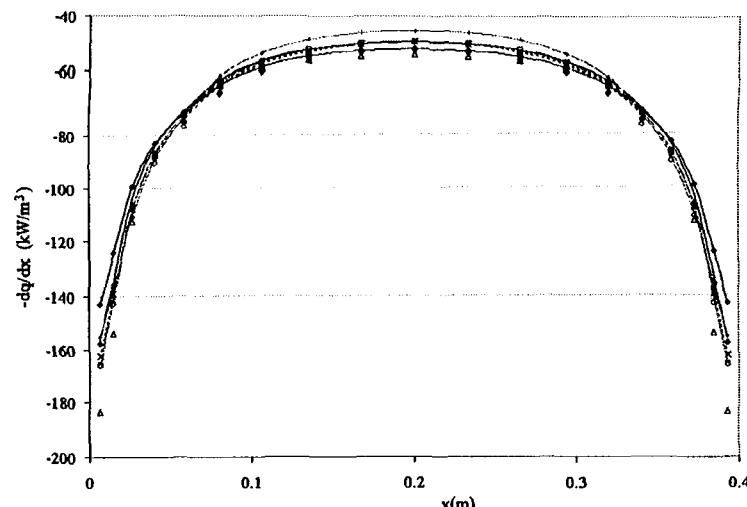


e) Variation du flux pariétal vs l'épaisseur de l'enceinte avec 15% $\text{CO}_2 + 30\% \text{H}_2\text{O}$

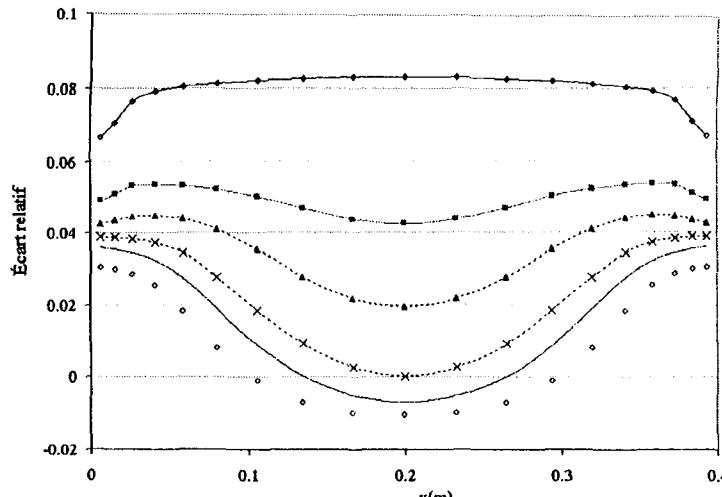


f) Évolution des écarts relatifs avec 15% $\text{CO}_2 + 30\% \text{H}_2\text{O}$

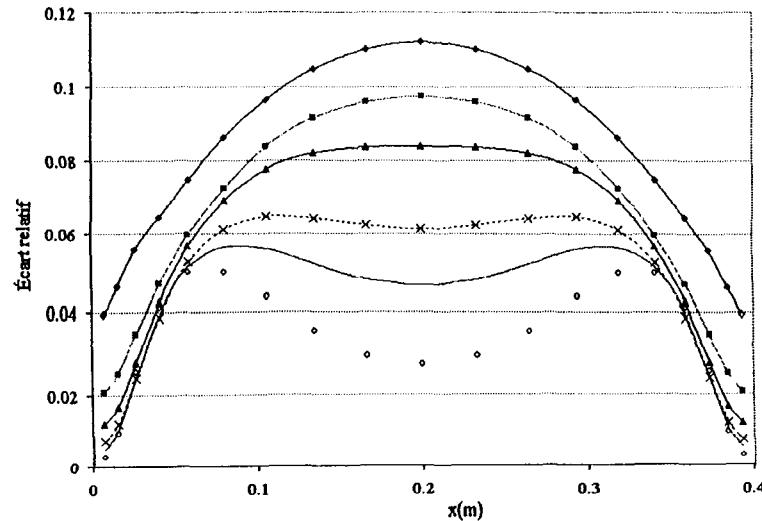
Planche 43a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=0,4$ m)



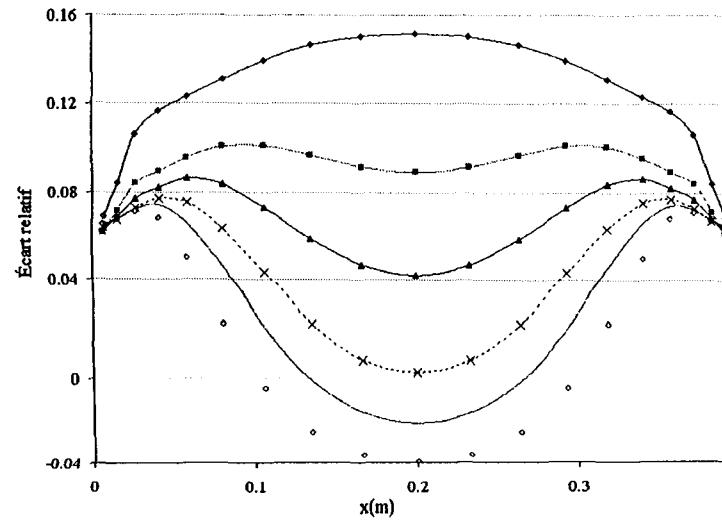
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

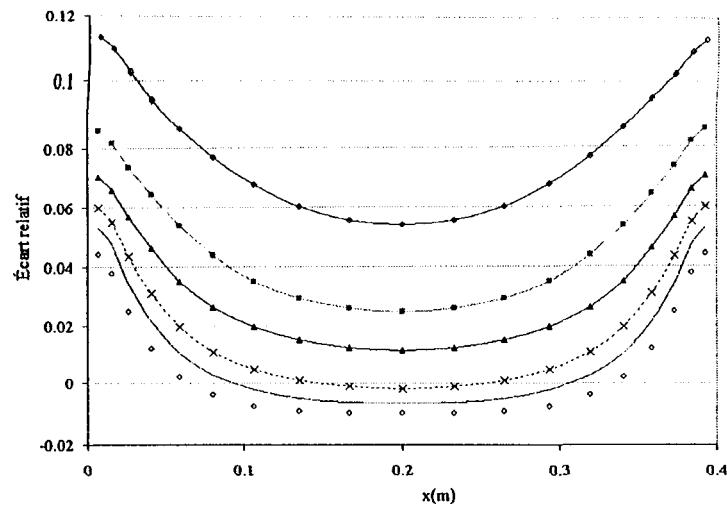


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

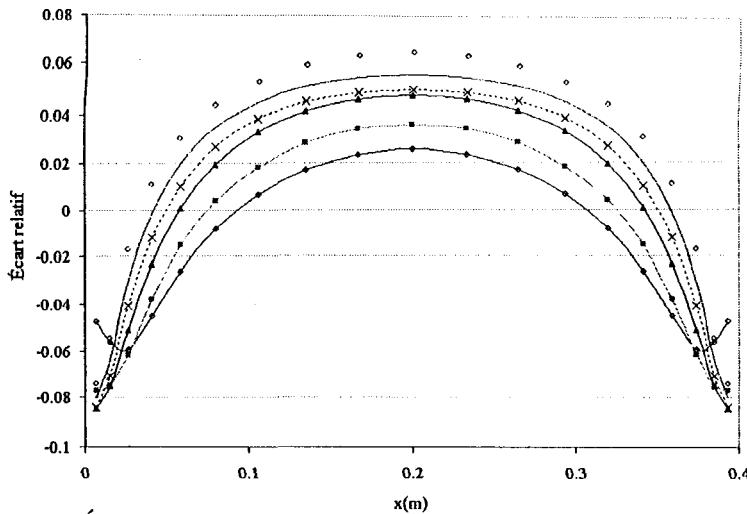


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

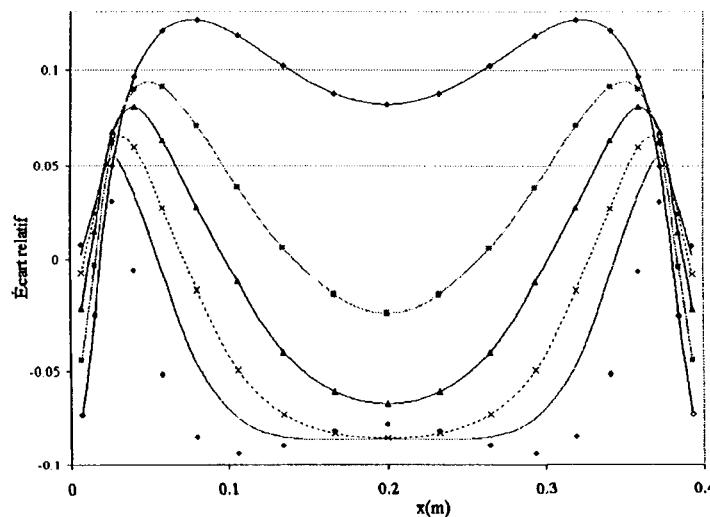
Planche 43b: Milieu isotherme (1 000 K) et homogène ($d=0,4$ m)



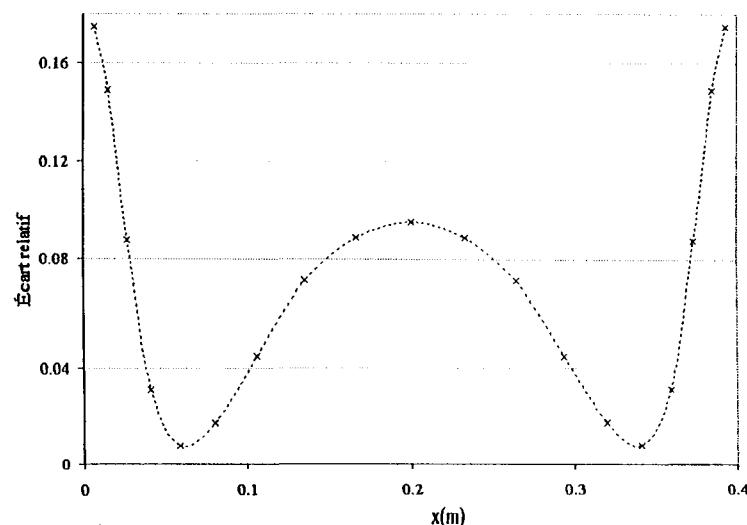
e) Évolution des écarts relatifs propres à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propres à la méthode SLW

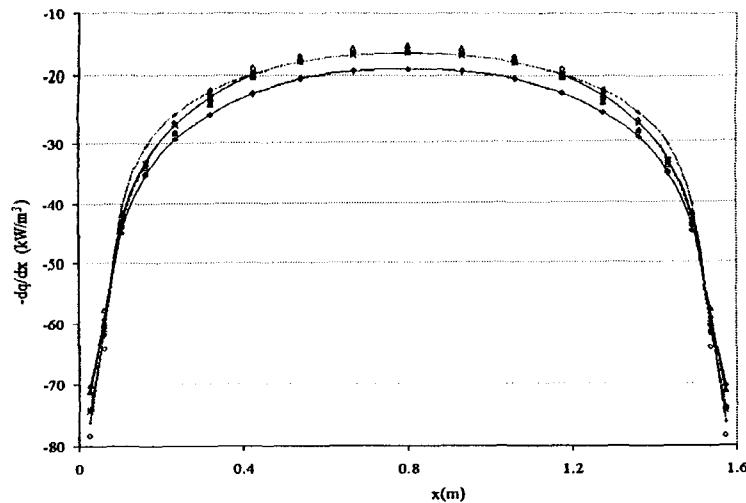


g) Évolution des écarts relatifs propres à la méthode SPGG (Soufiani)

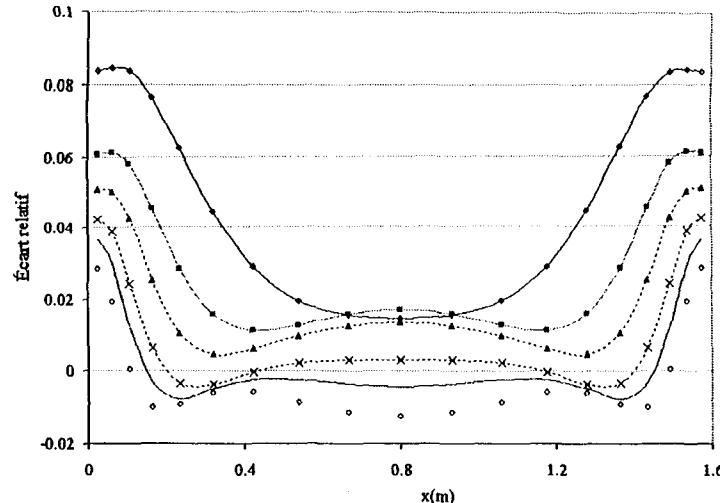


h) Évolution des écarts relatifs propres à la méthode SPGG (Smith)

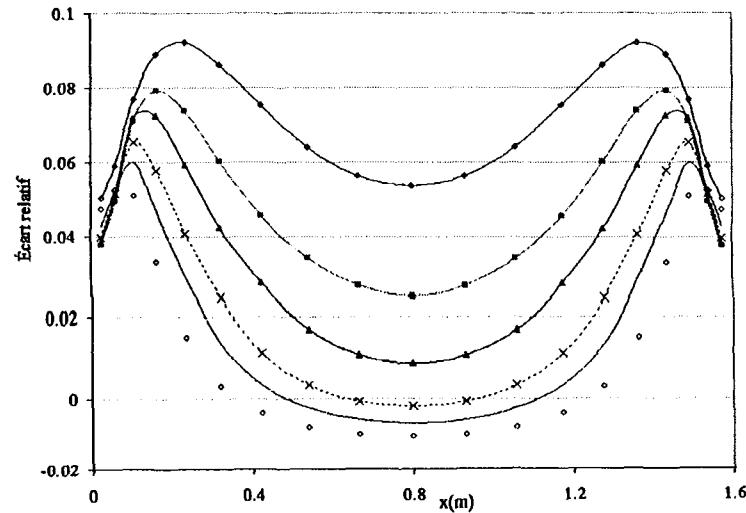
Planche 44a: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=1,6$ m)



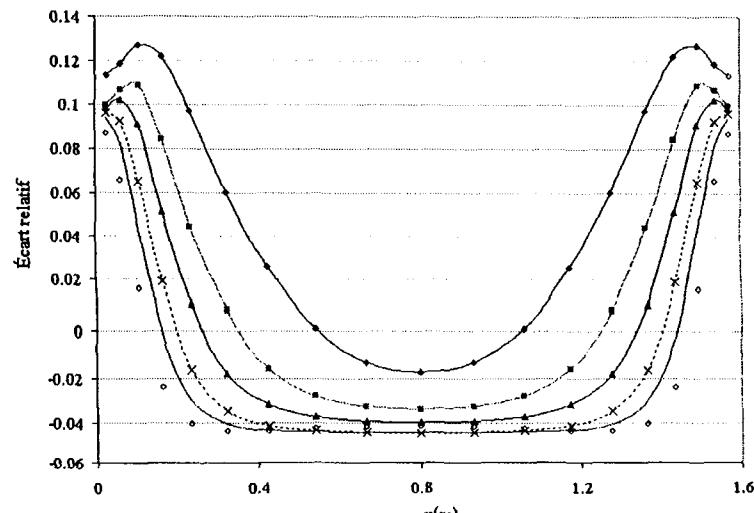
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

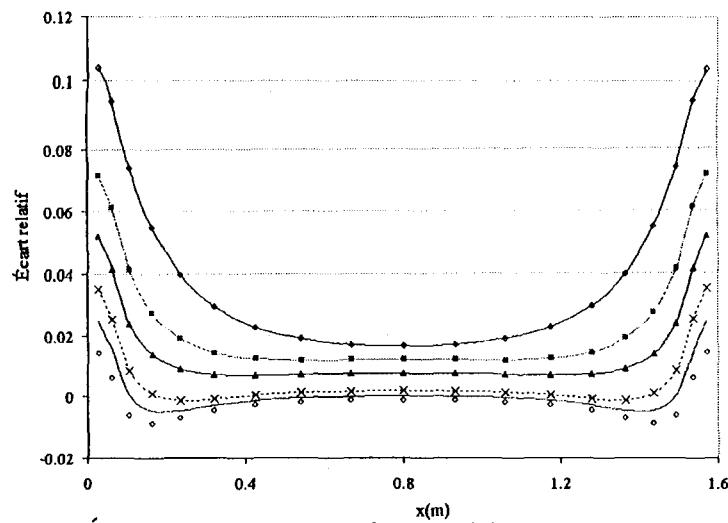


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

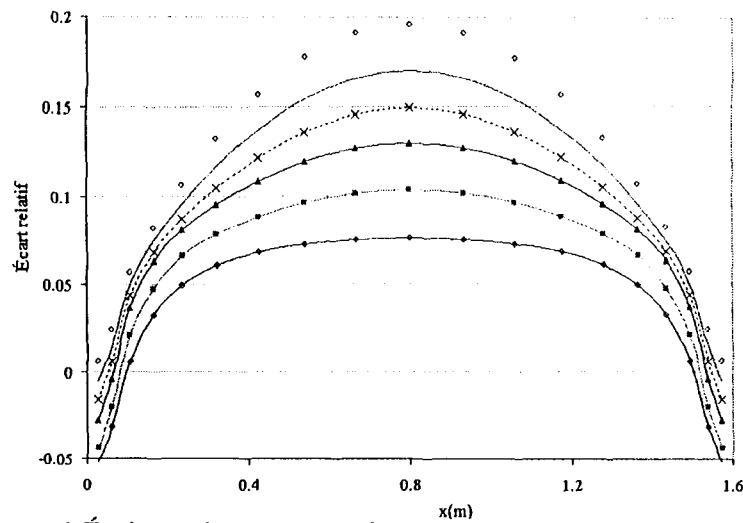


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

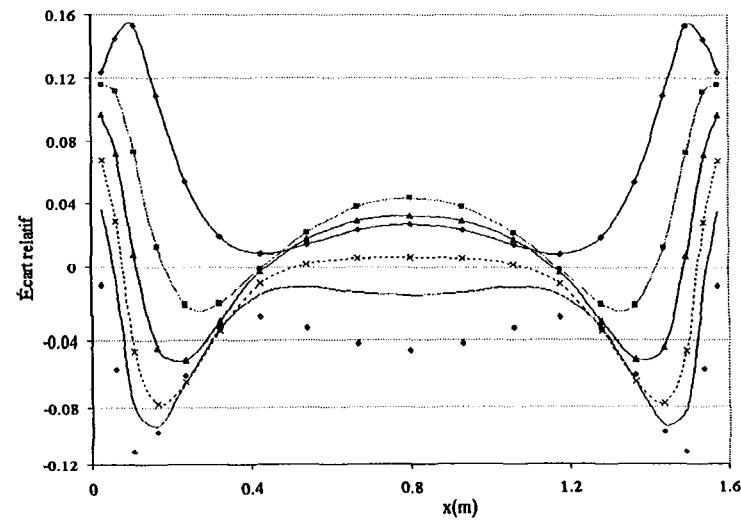
Planche 44b: Milieu isotherme (1 000K) et homogène ($d=1,6$ m)



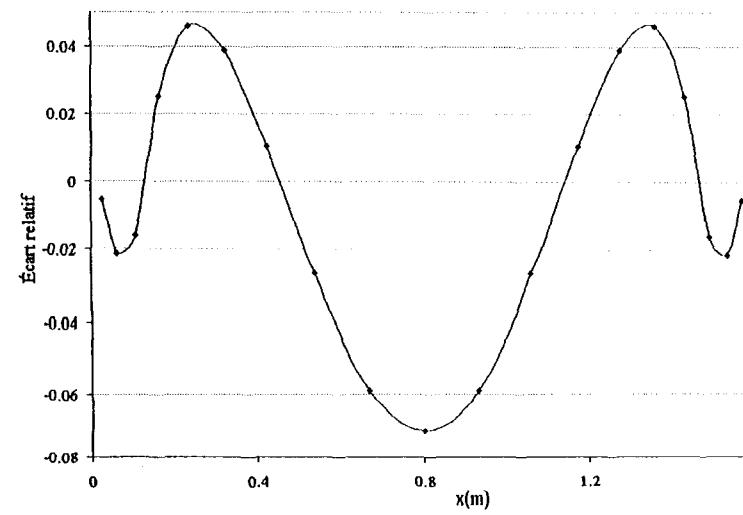
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

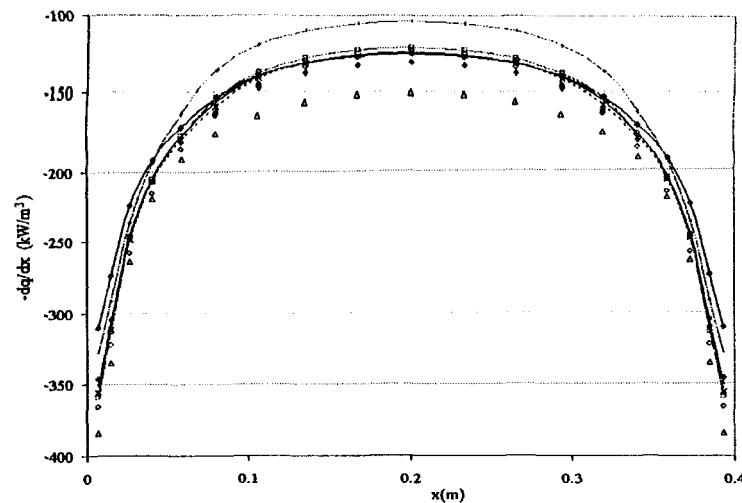


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Soufiani)

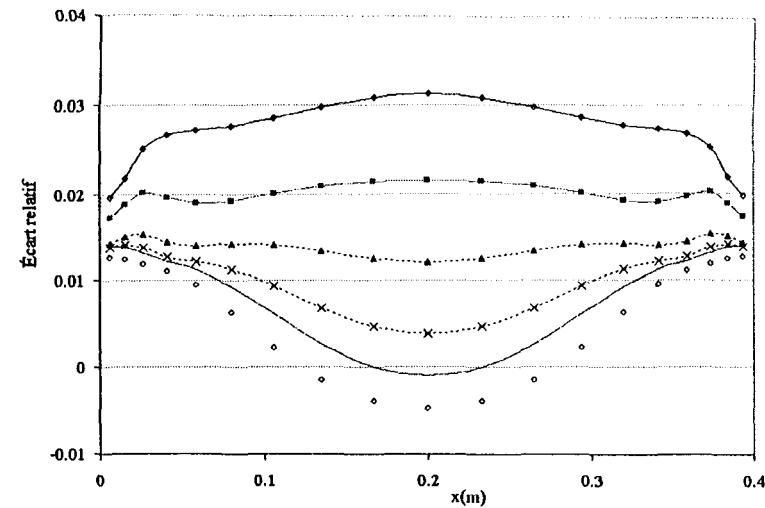


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

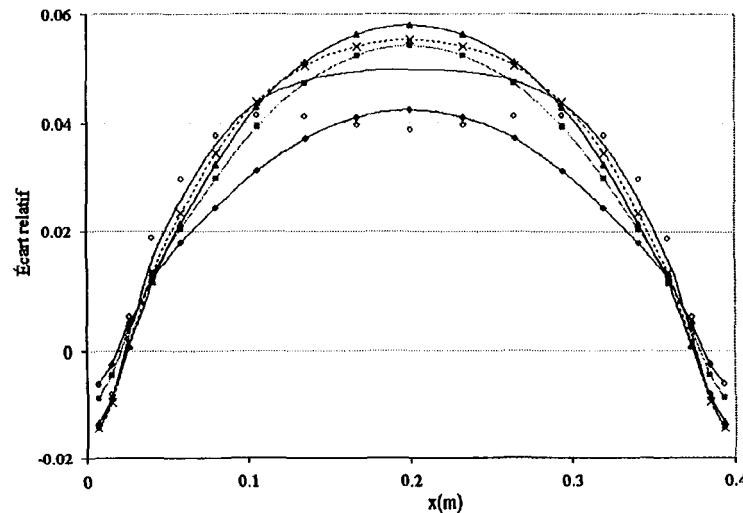
Planche 45a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=0,4$ m)



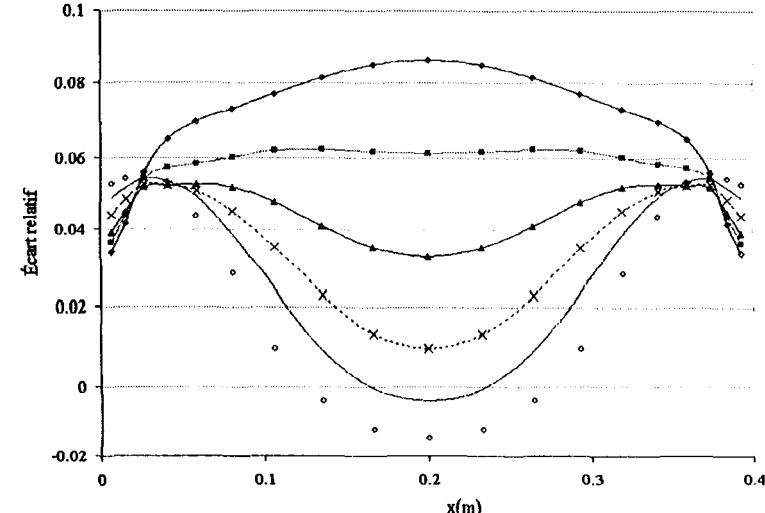
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

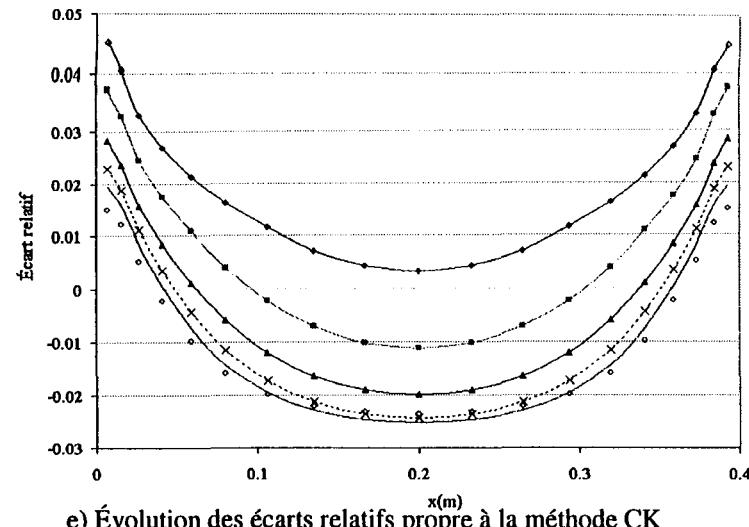


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

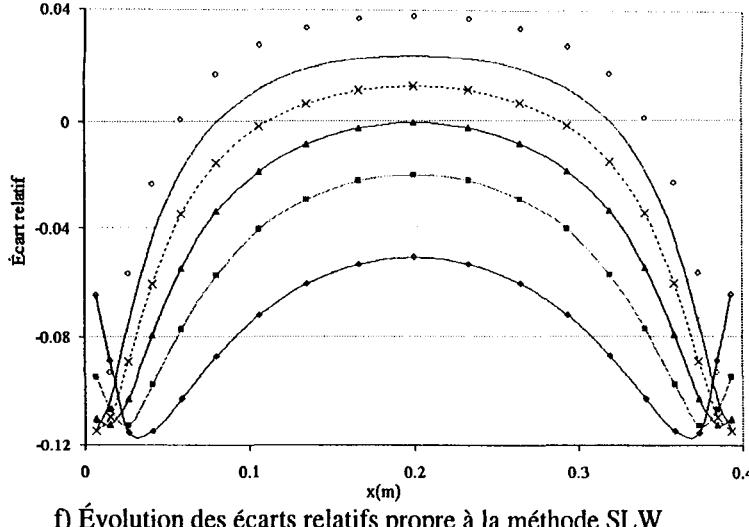


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

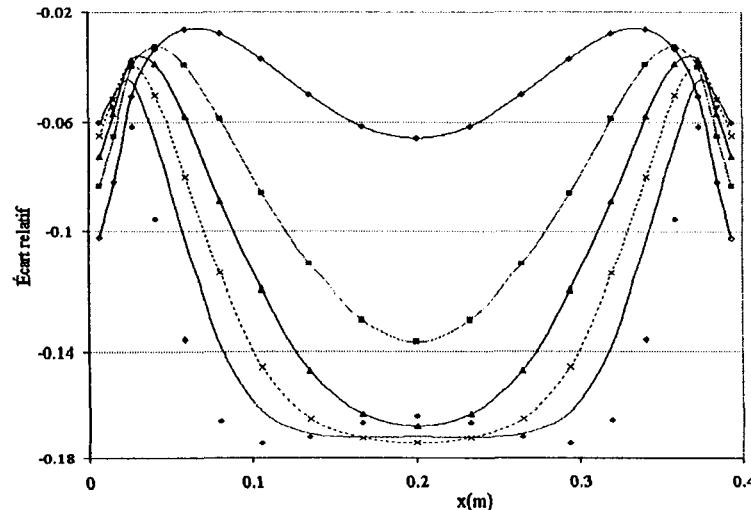
Planche 45b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=0,4$ m)



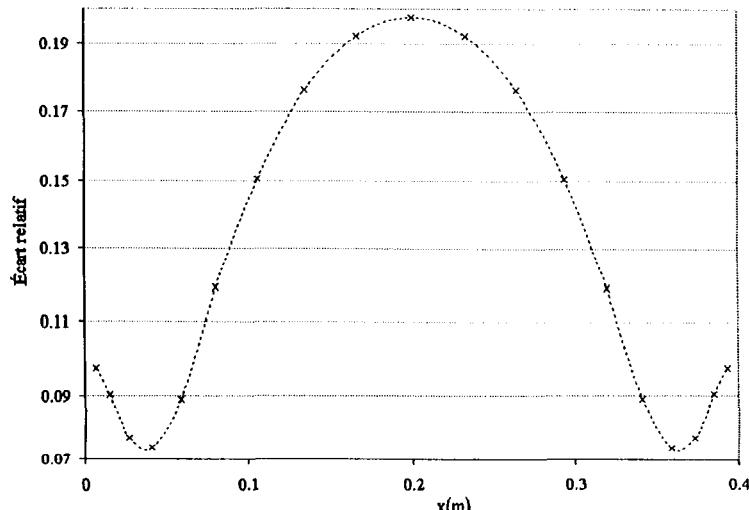
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

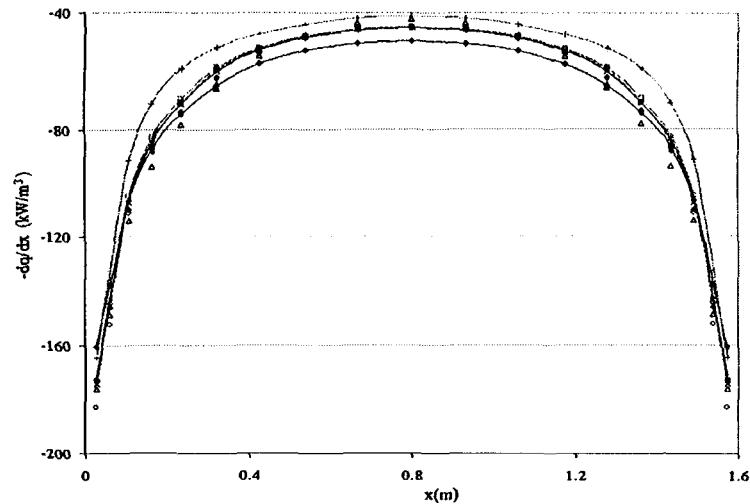


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Djavadan)

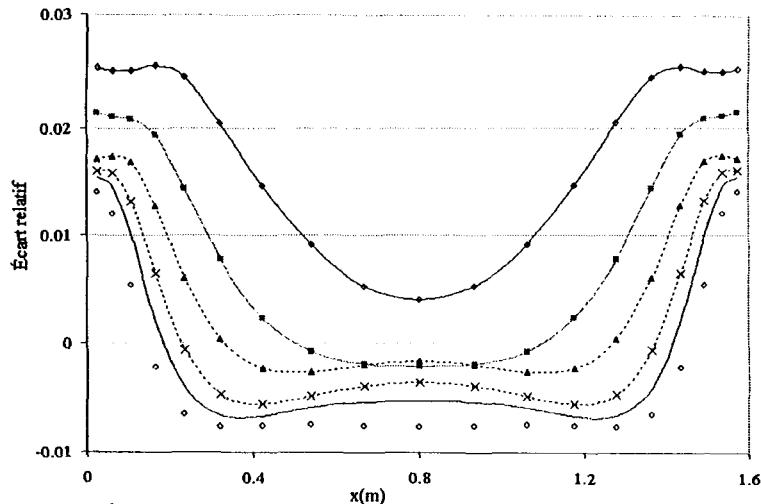


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

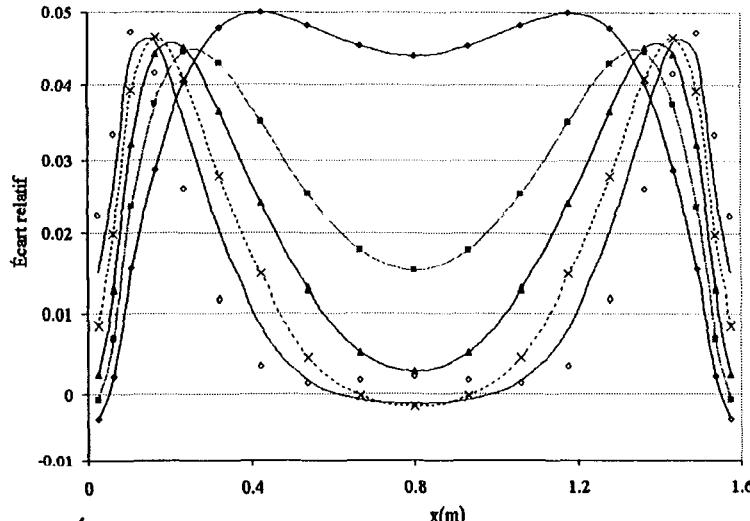
Planche 46a: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=1,6$ m)



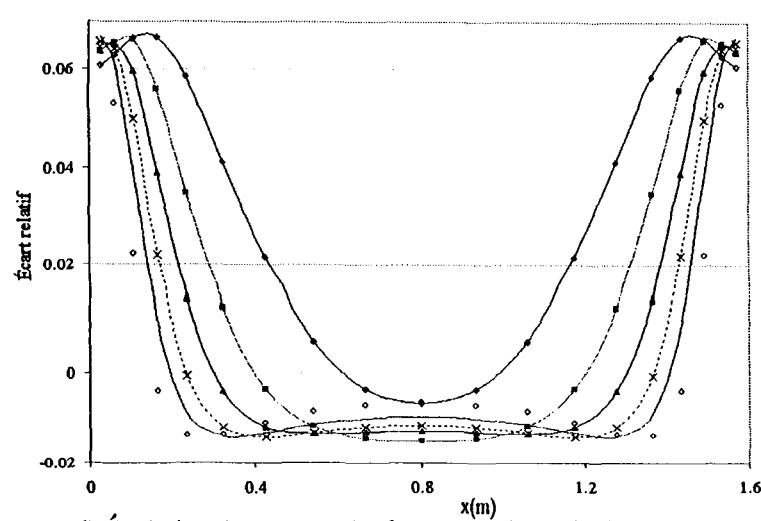
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

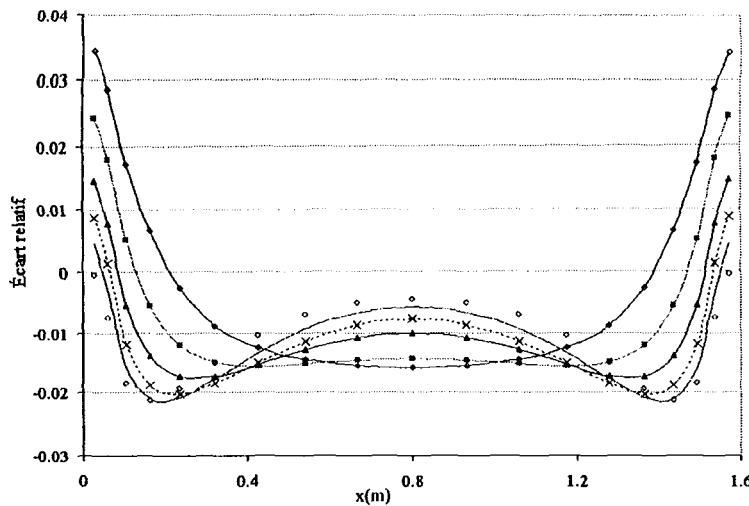


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

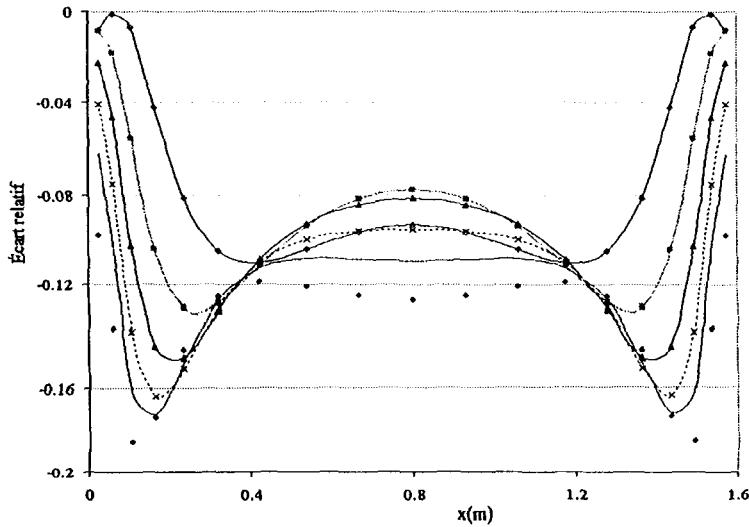


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

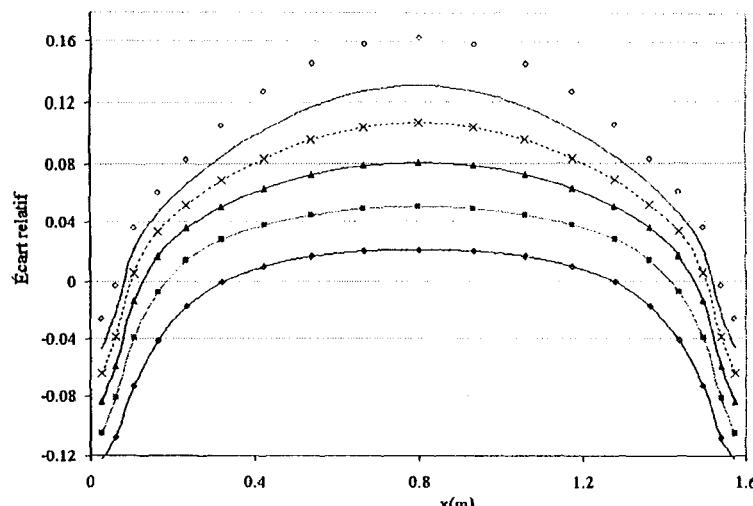
Planche 46b: Milieu isotherme (1 300K) et homogène ($d=1,6$ m)



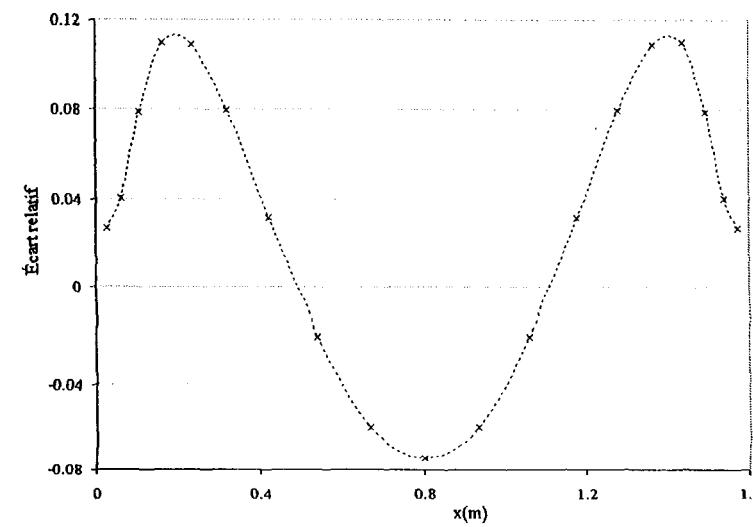
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Soufiani)

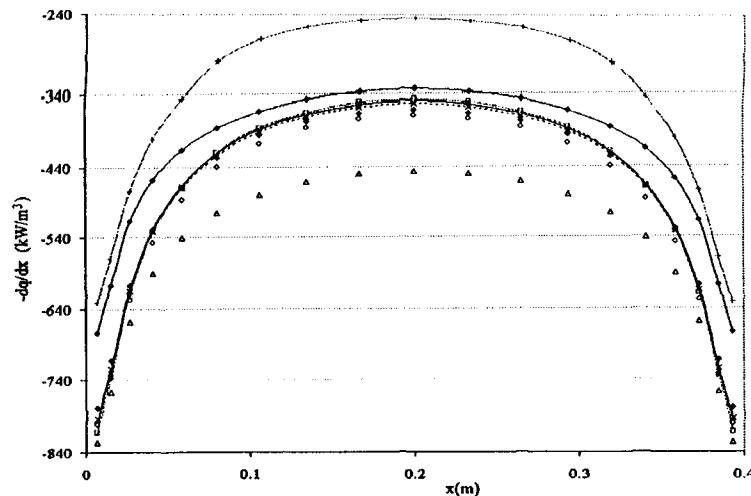


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

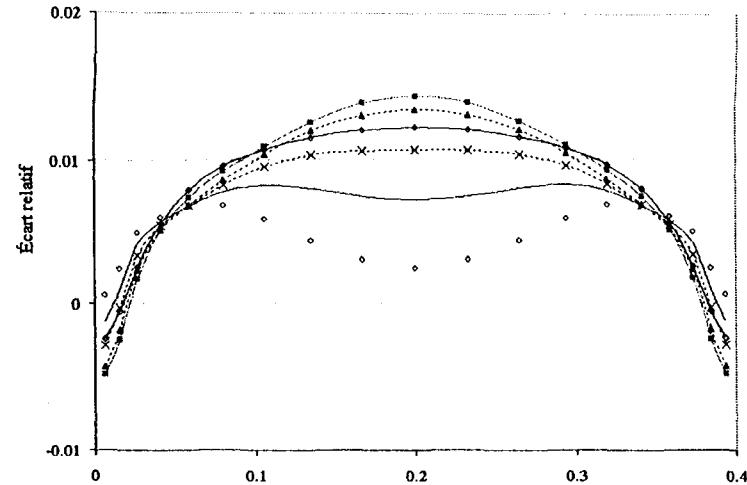


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

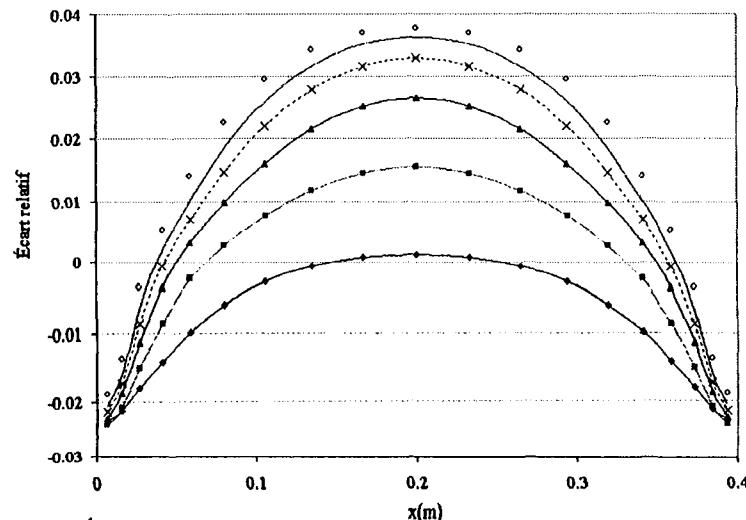
Planche 47a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=0,4$ m)



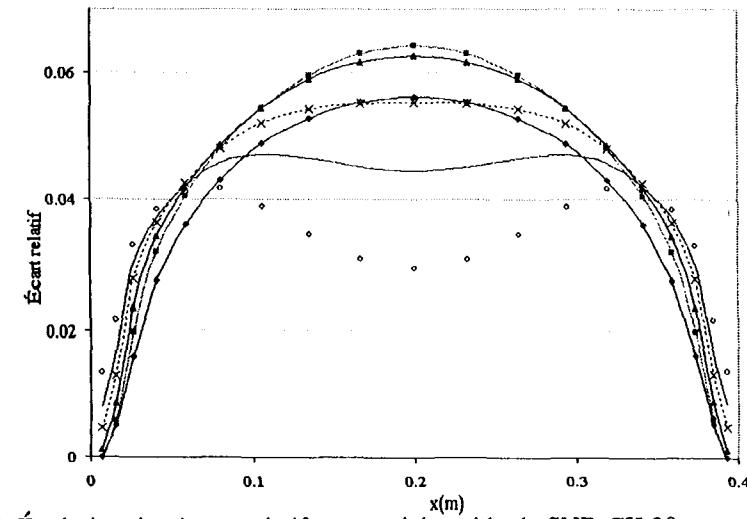
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

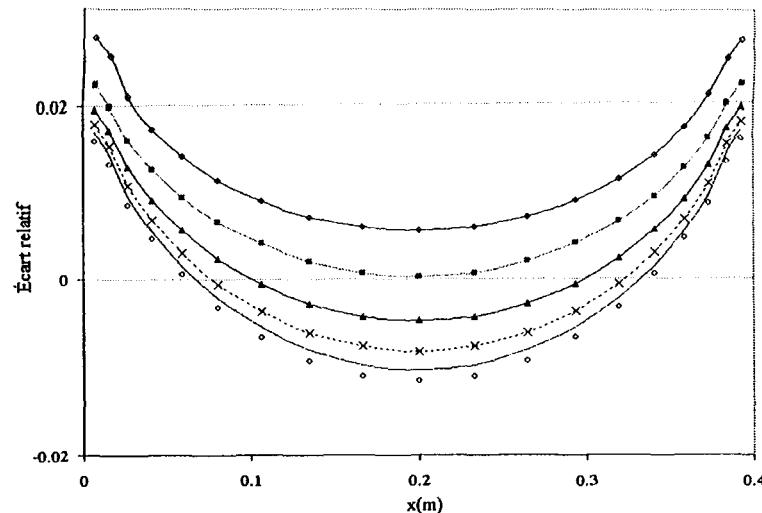


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

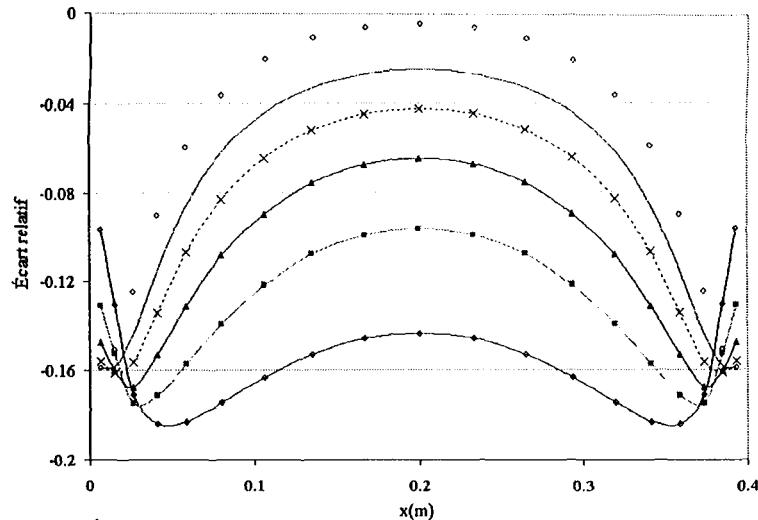


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

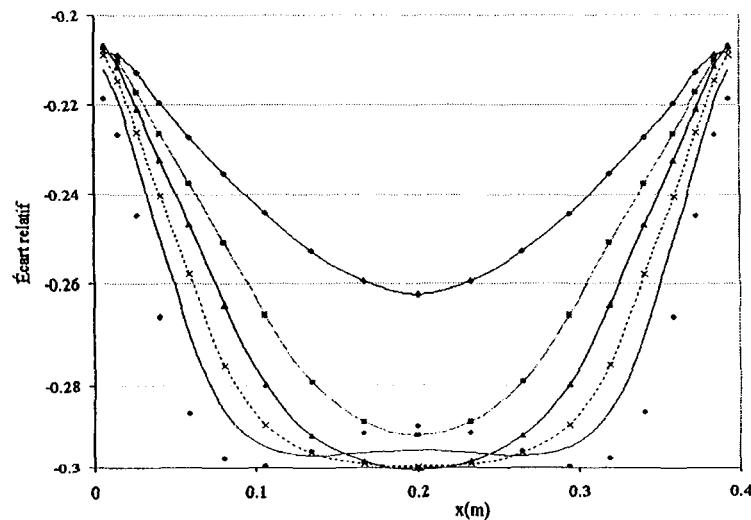
Planche 47b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=0,4$ m)



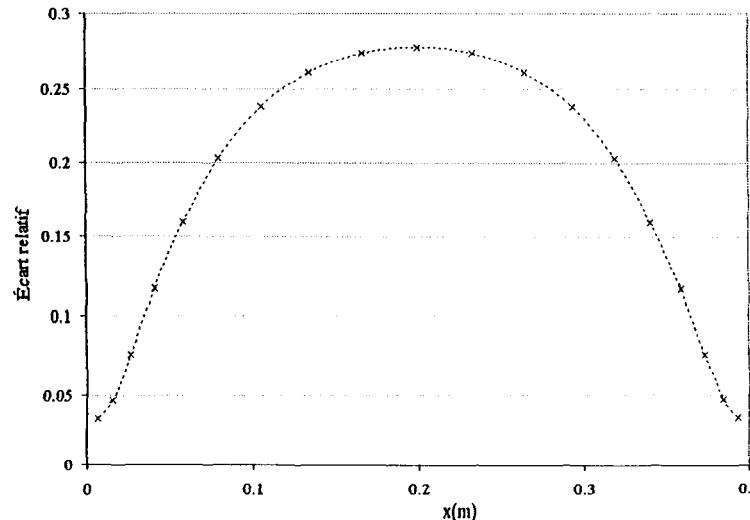
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

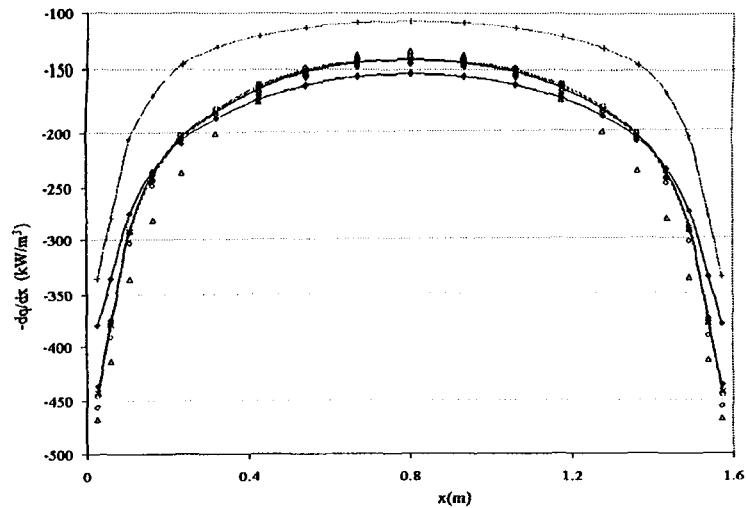


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Soufiani)

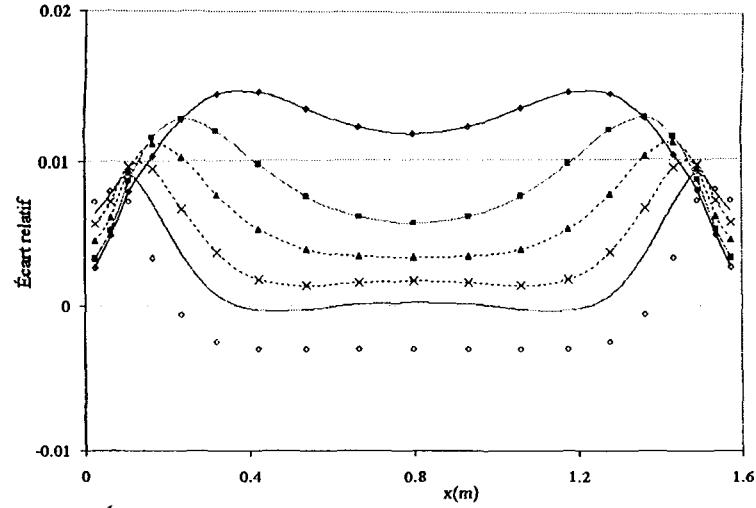


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

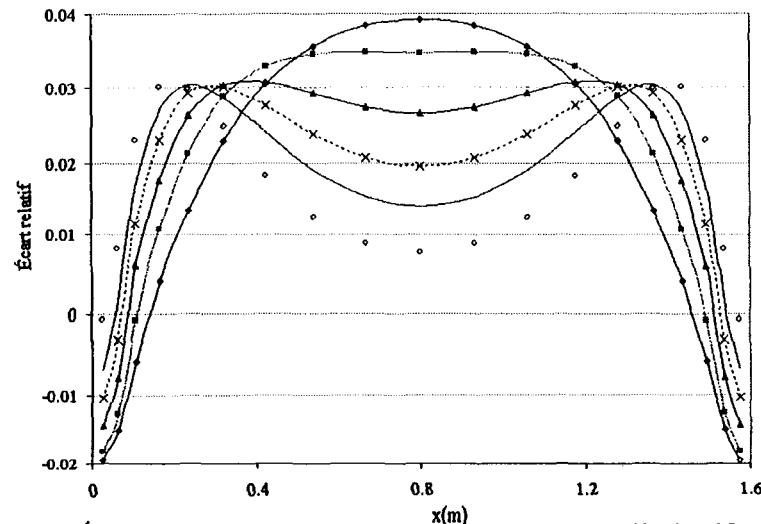
Planche 48a: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=1,6$ m)



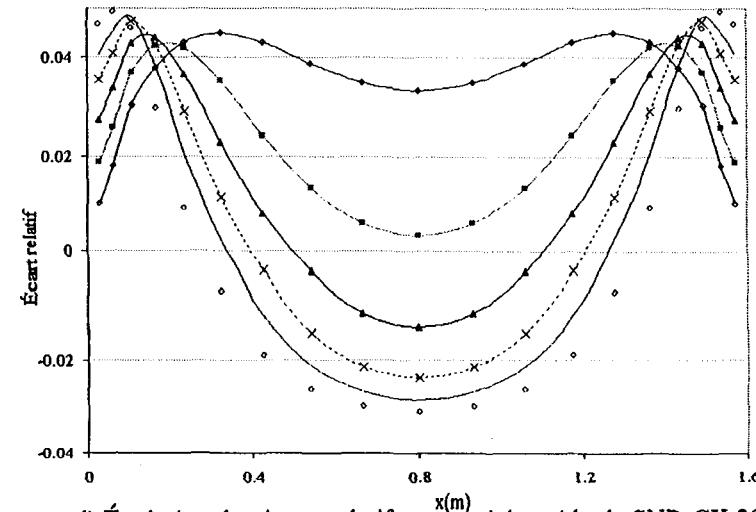
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

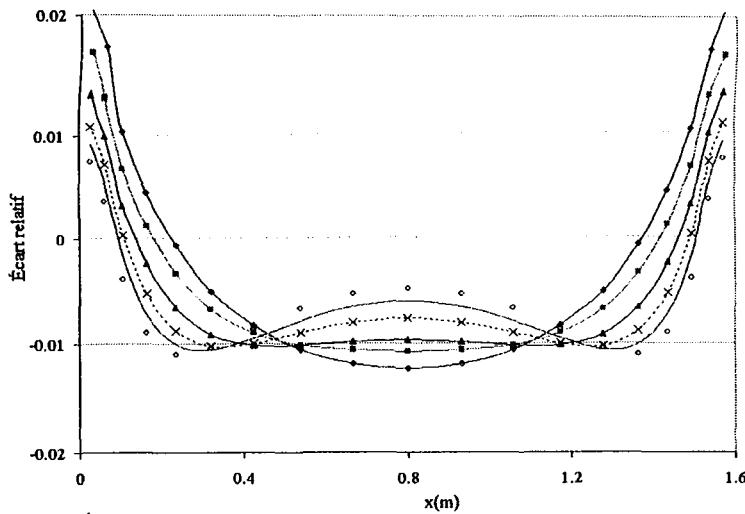


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

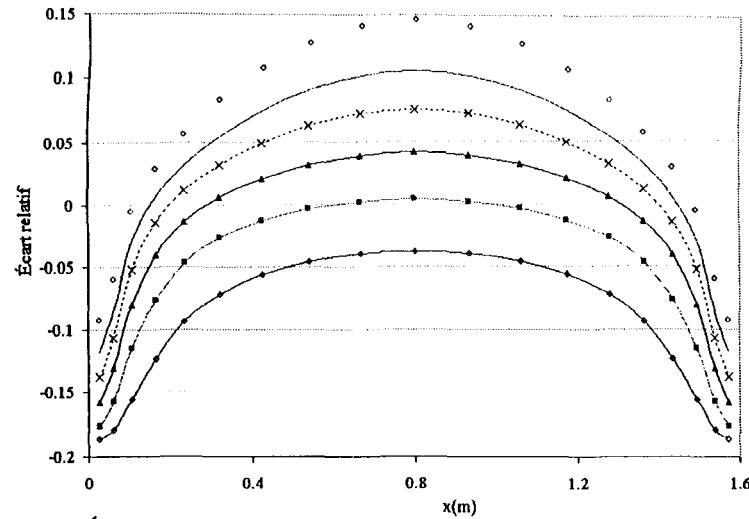


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

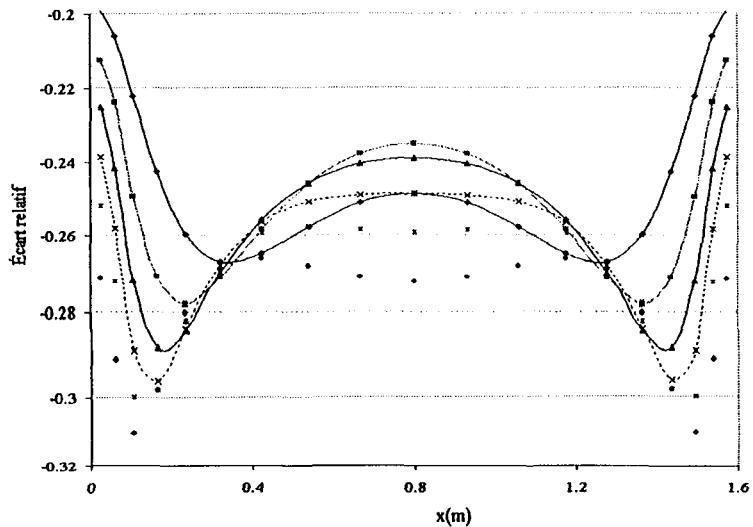
Planche 48b: Milieu isotherme (1 800K) et homogène ($d=1,6$ m)



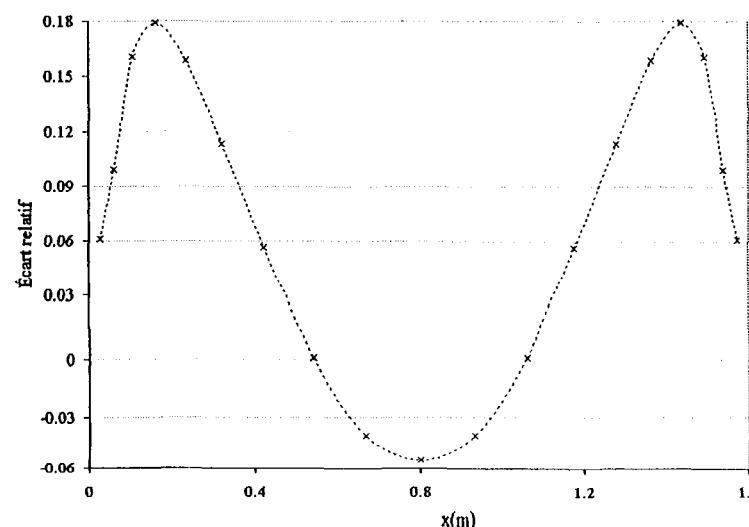
e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK



f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

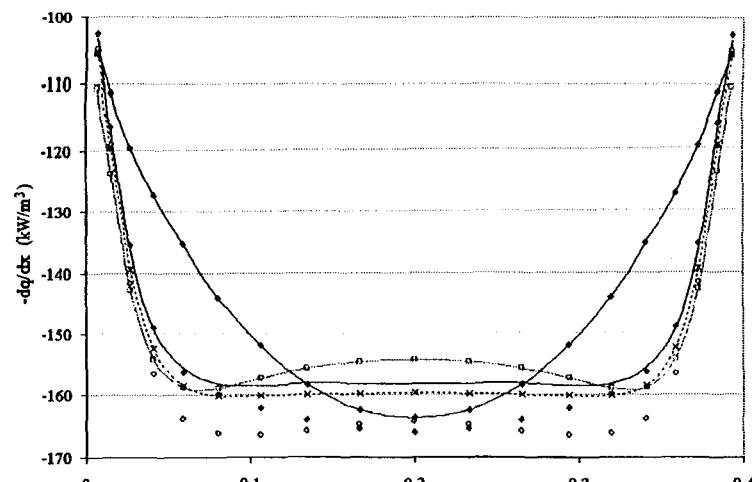


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Soufiani)

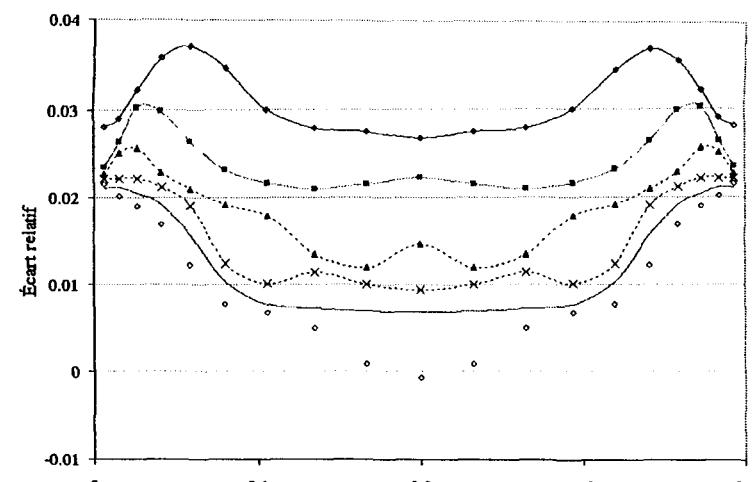


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

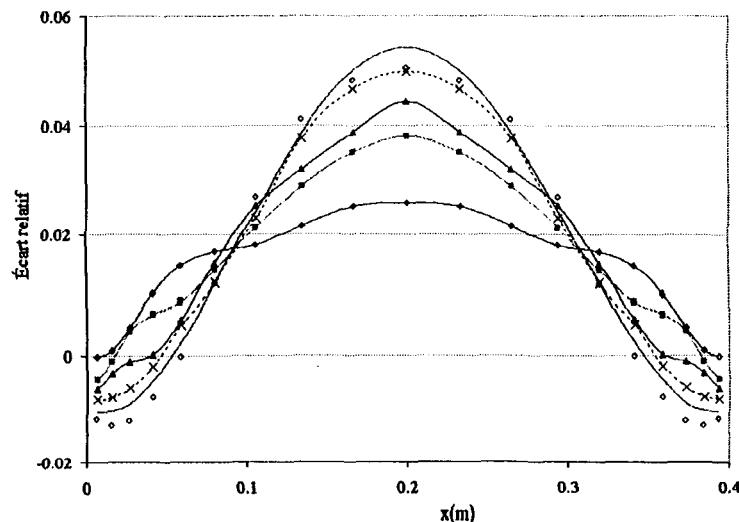
Planche 49a: Milieu isotherme (1 300K) et inhomogène ($d=0,4$ m)



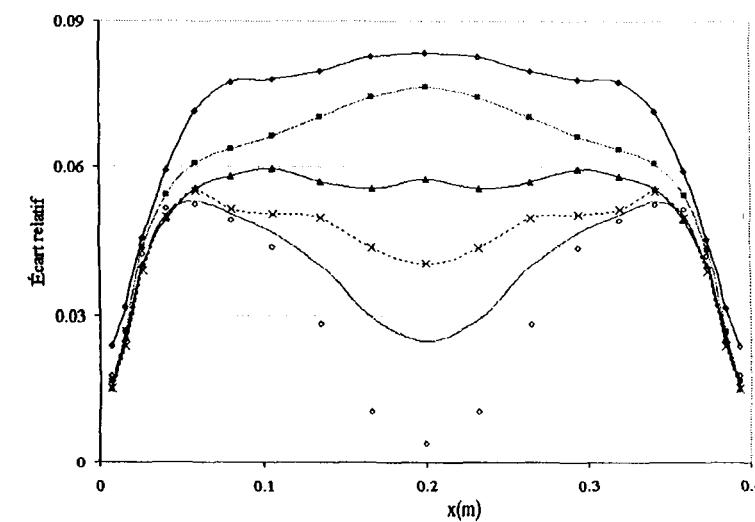
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

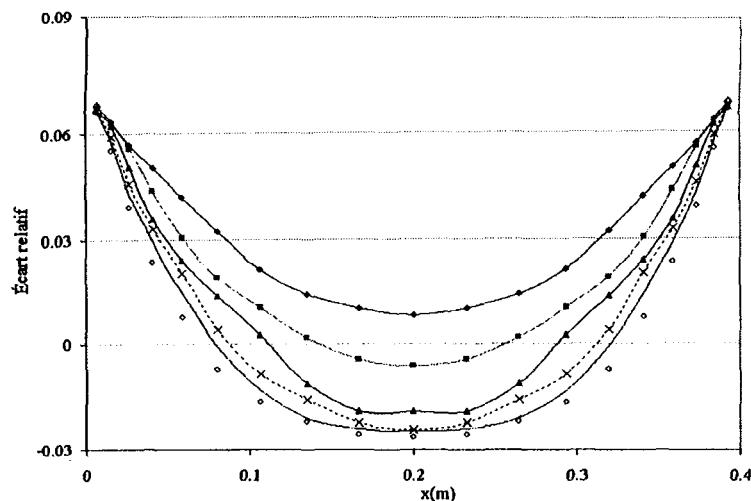


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

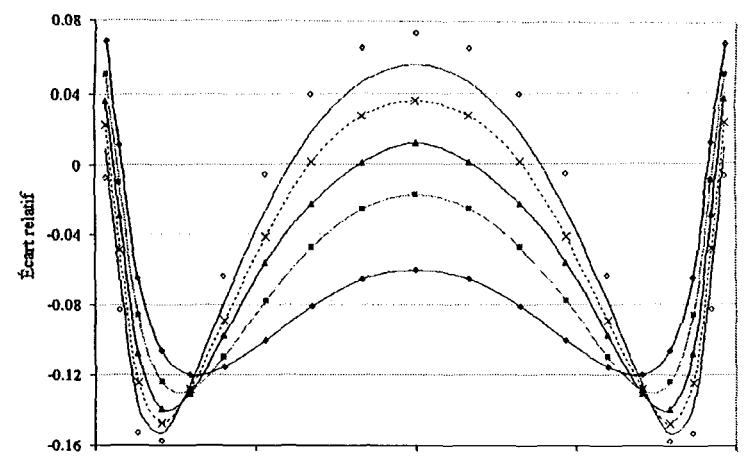


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 49b: Milieu isotherme (1 300K) et inhomogène ($d=0,4$ m)

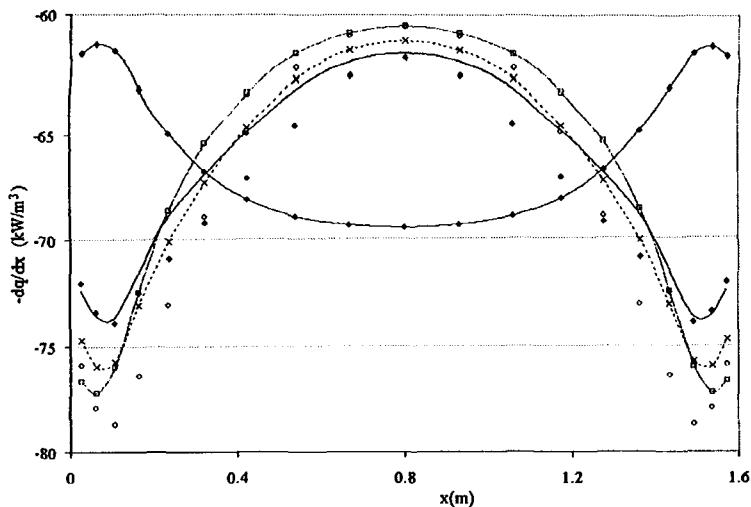


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

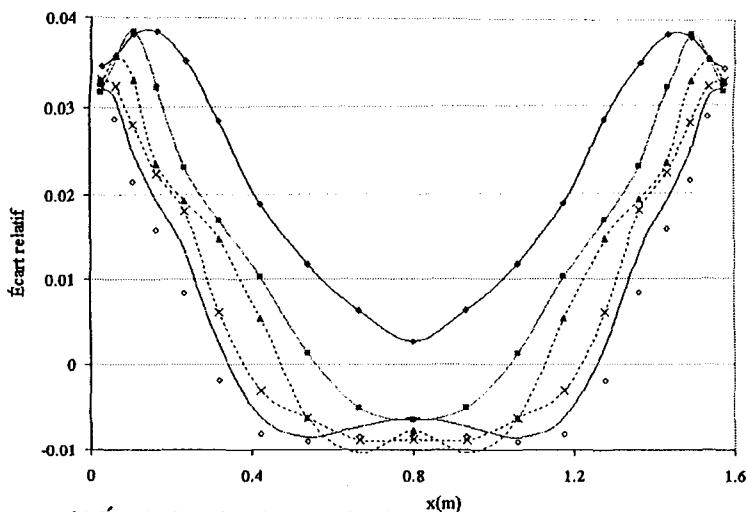


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

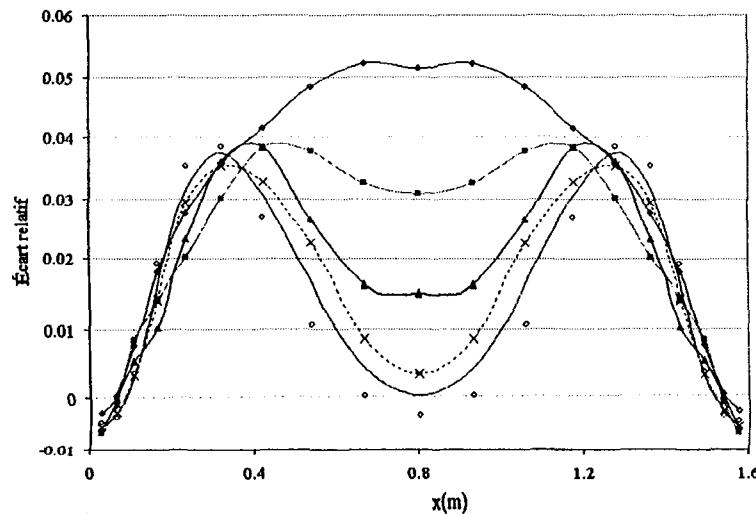
Planche 50a: Milieu isotherme (1 300K) et inhomogène ($d=1,6$ m)



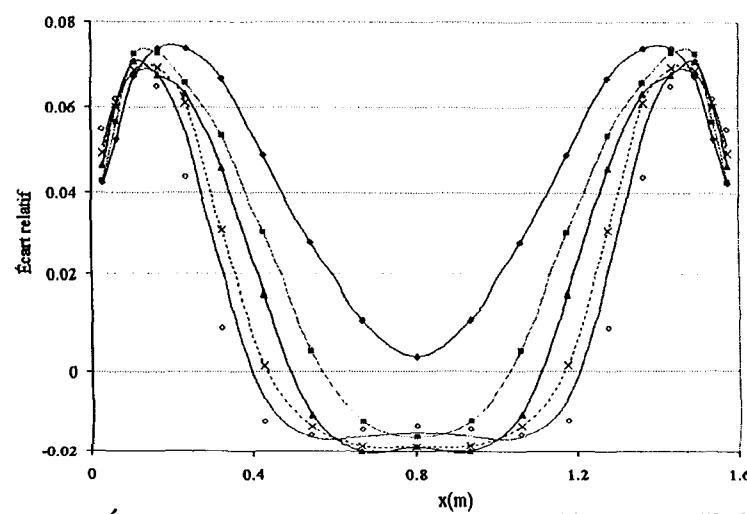
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

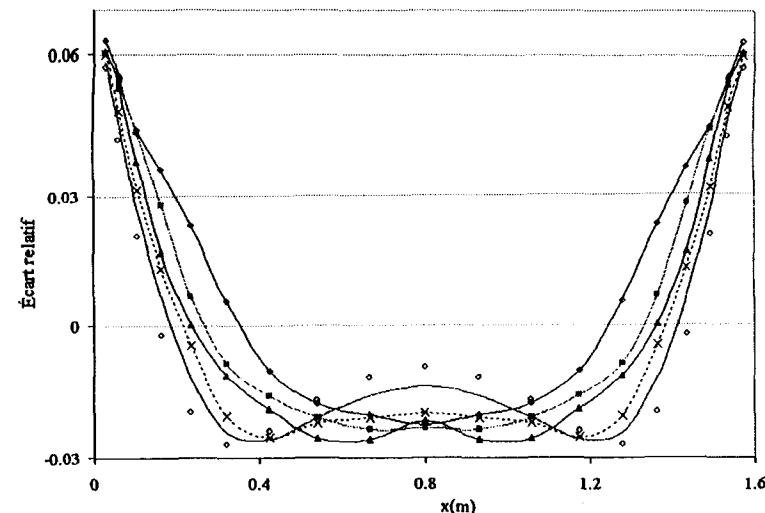


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

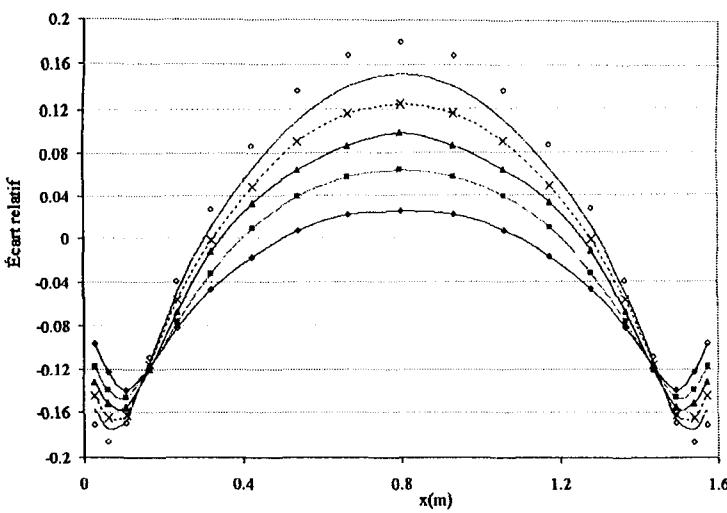


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 50b: Milieu isotherme (1 300K) et inhomogène ($d=1,6$ m)

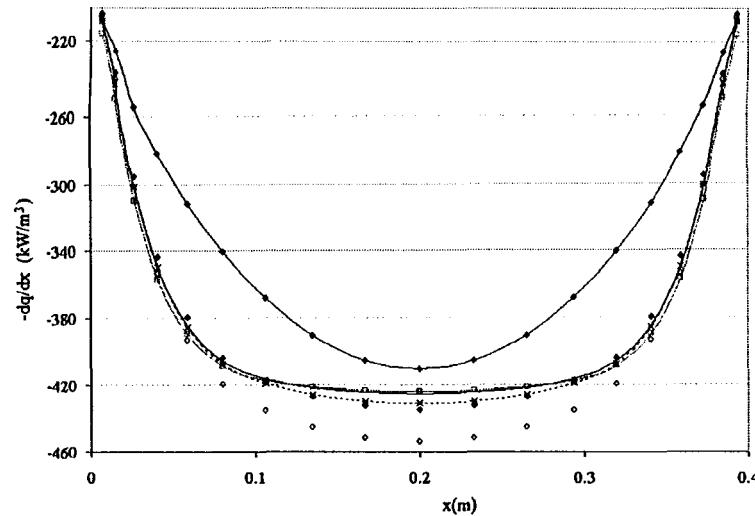


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

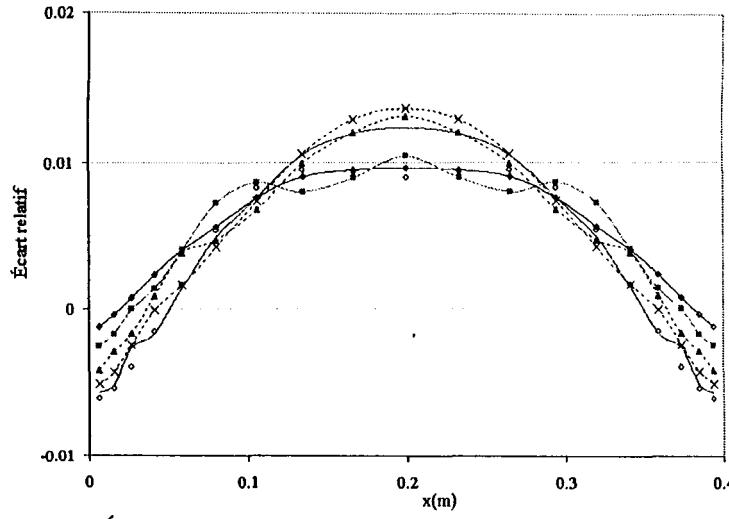


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

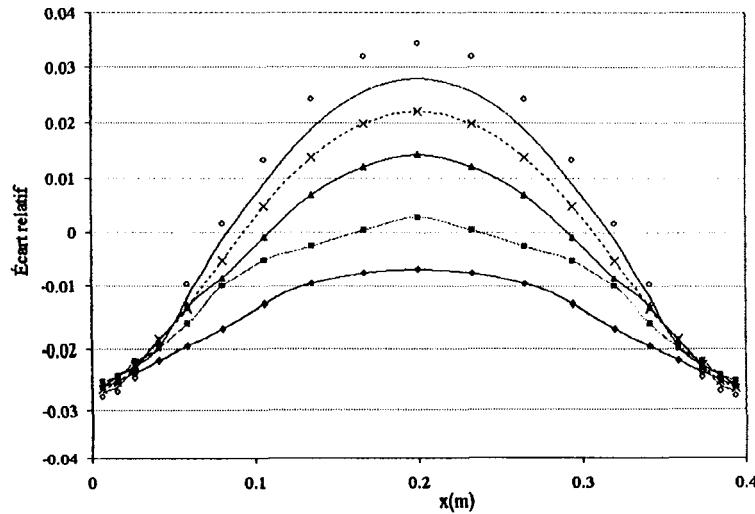
Planche 51a: Milieu isotherme (1 800K) et inhomogène ($d=0,4$ m)



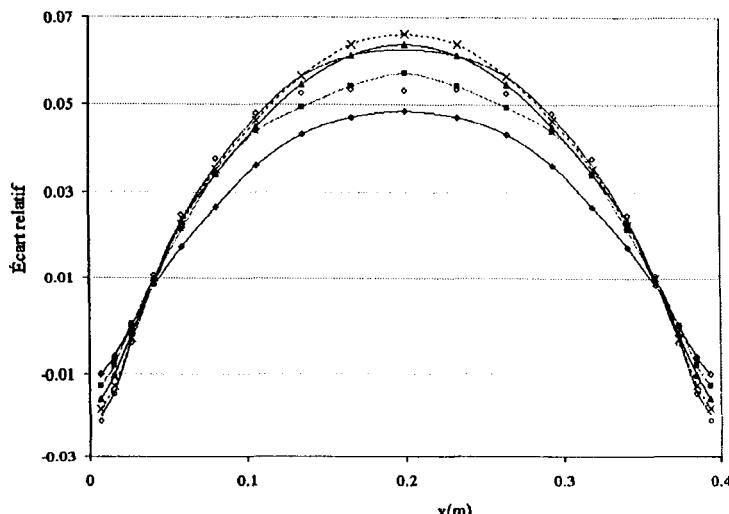
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

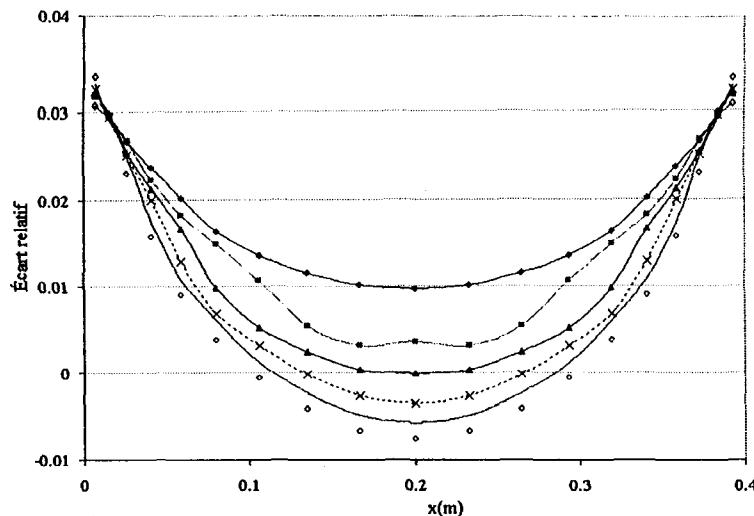


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

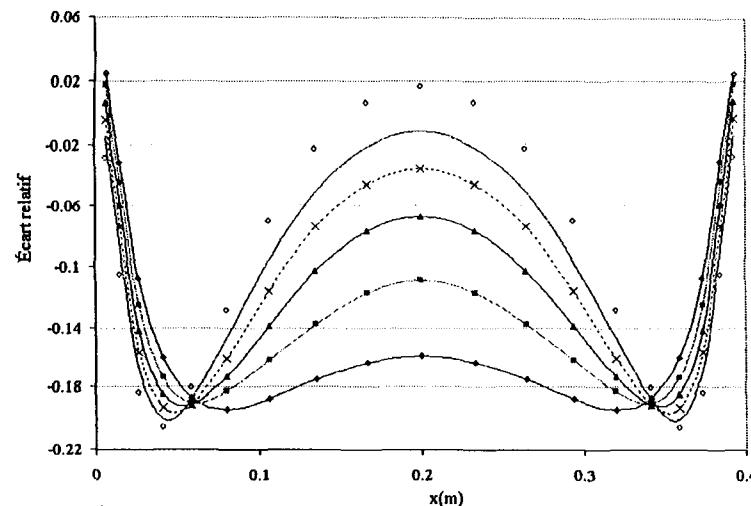


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 51b: Milieu isotherme (1 800K) et inhomogène ($d=0,4$ m)

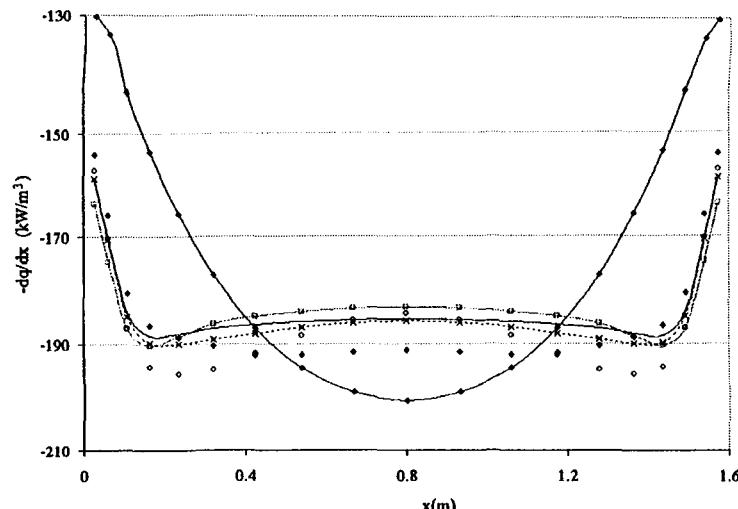


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

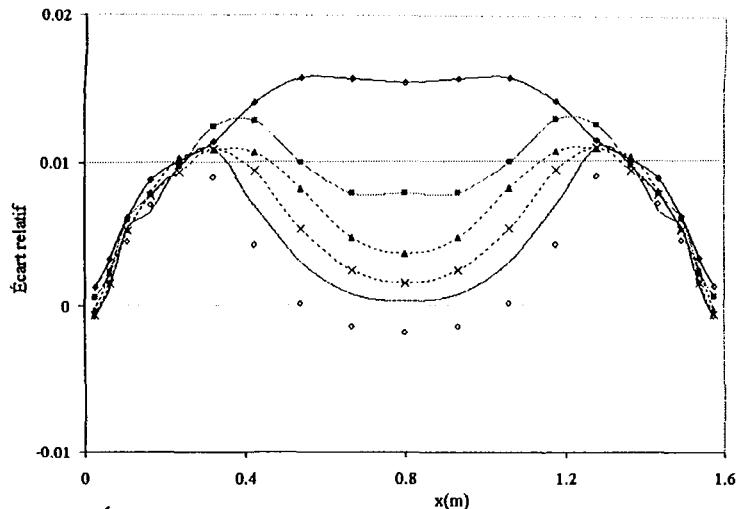


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

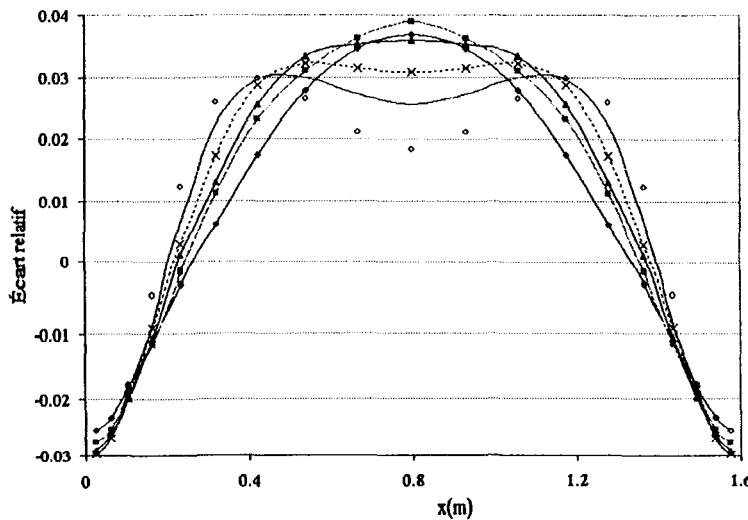
Planche 52a: Milieu isotherme (1 800K) et inhomogène ($d=1,6$ m)



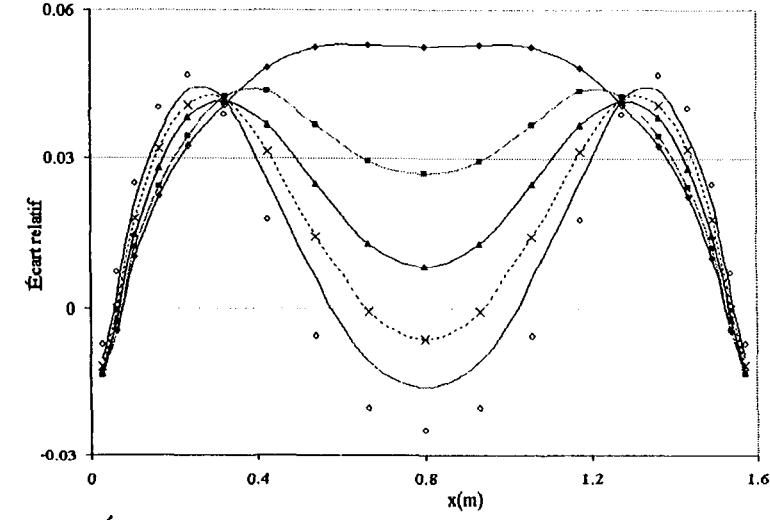
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

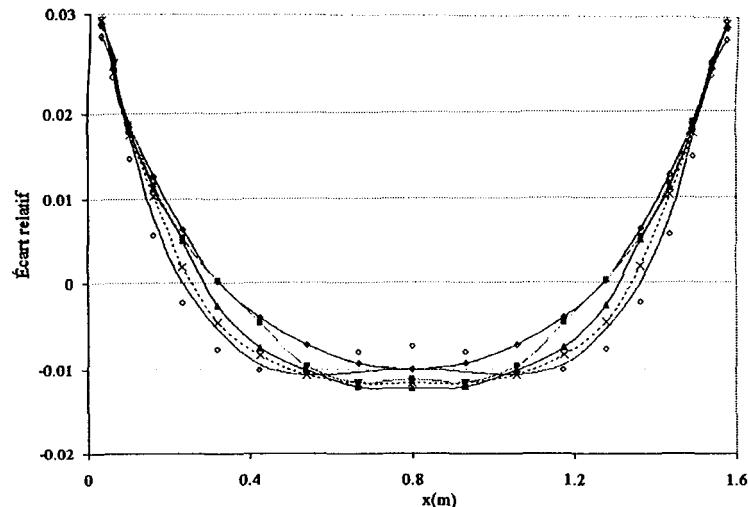


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

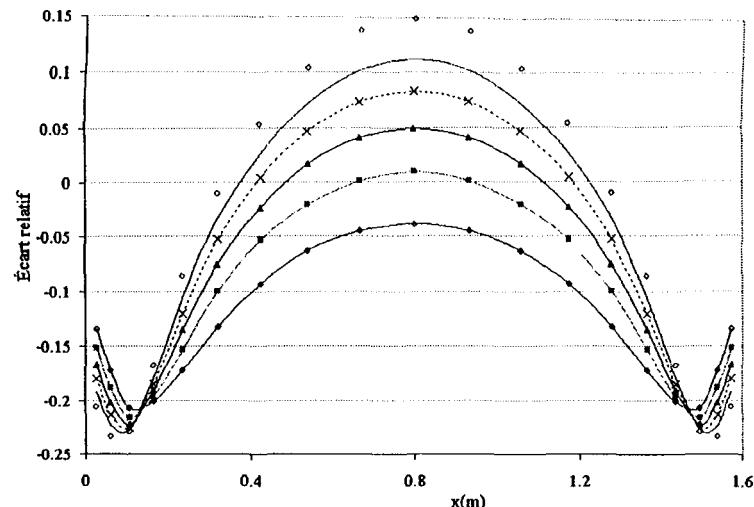


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

Planche 52b: Milieu isotherme (1 800K) et inhomogène ($d=1,6$ m)

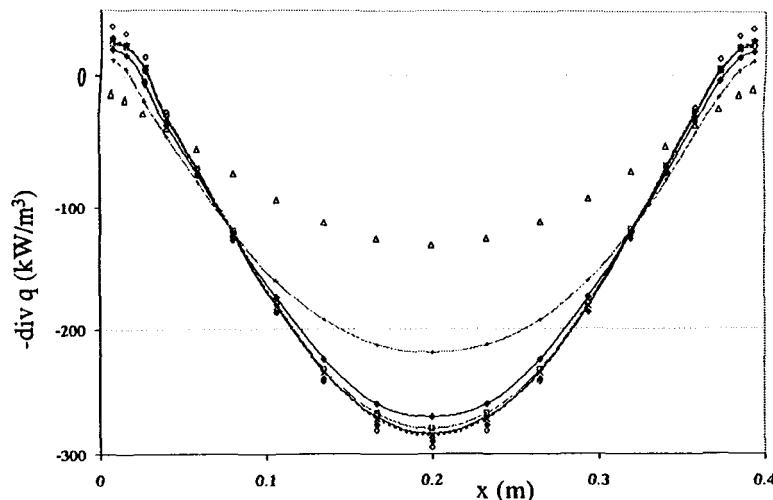


e) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode CK

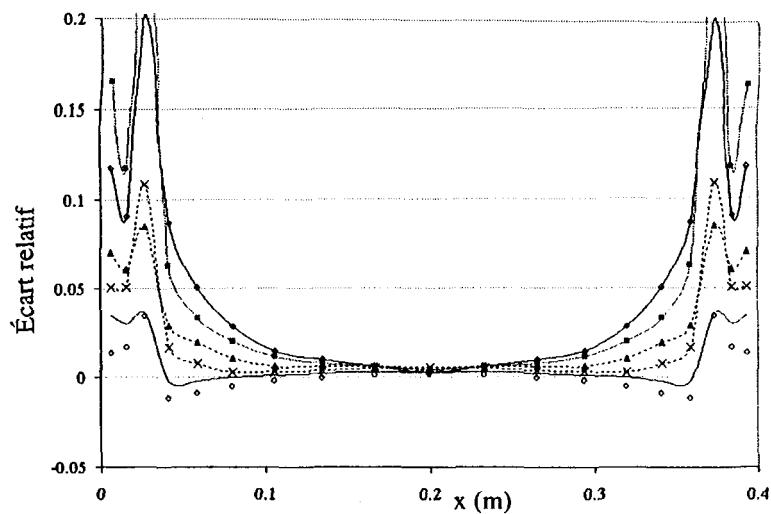


f) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SLW

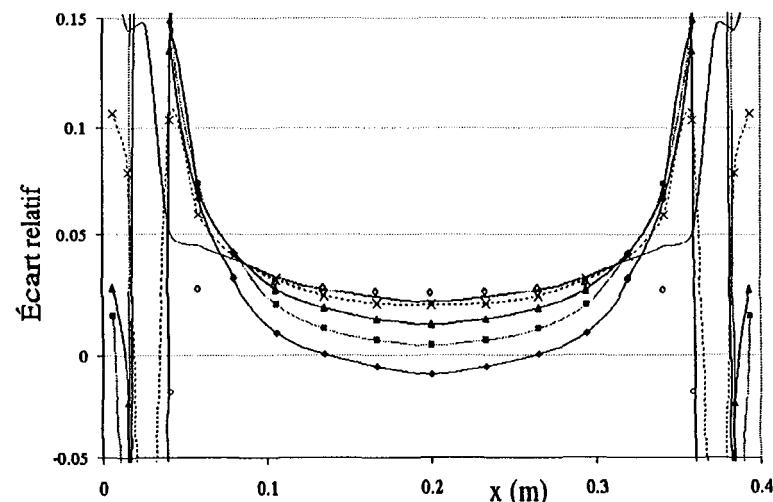
Planche 53a: Milieu anisotherme et homogène ($d=0,4$ m)



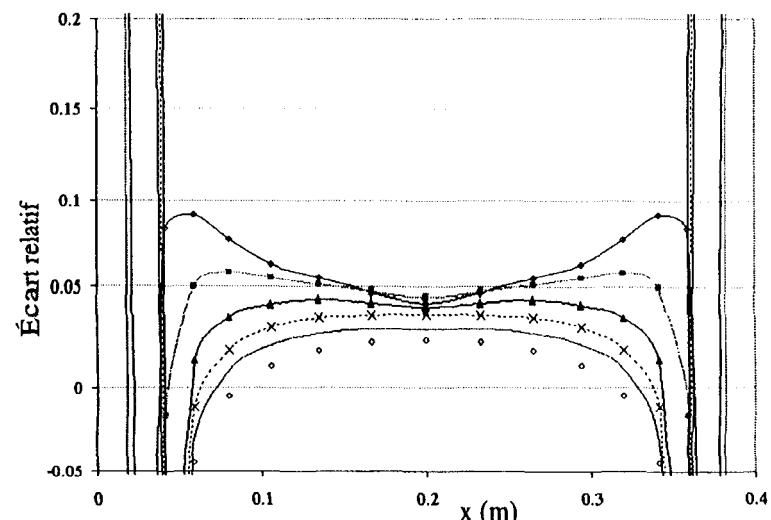
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

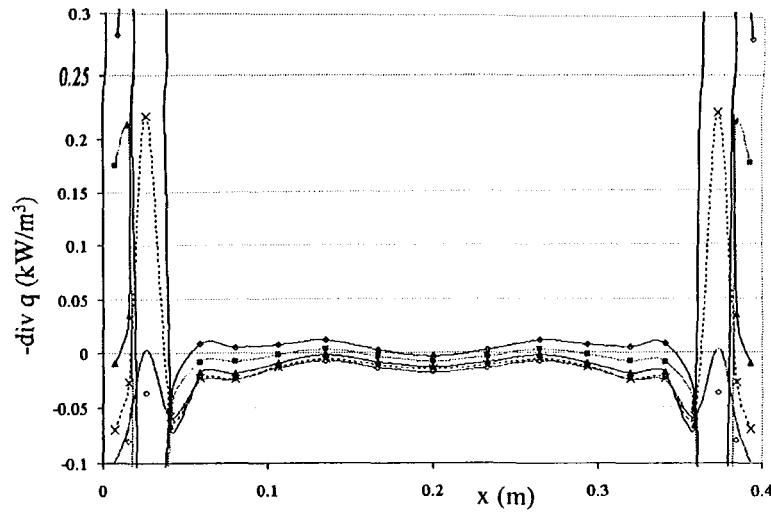


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

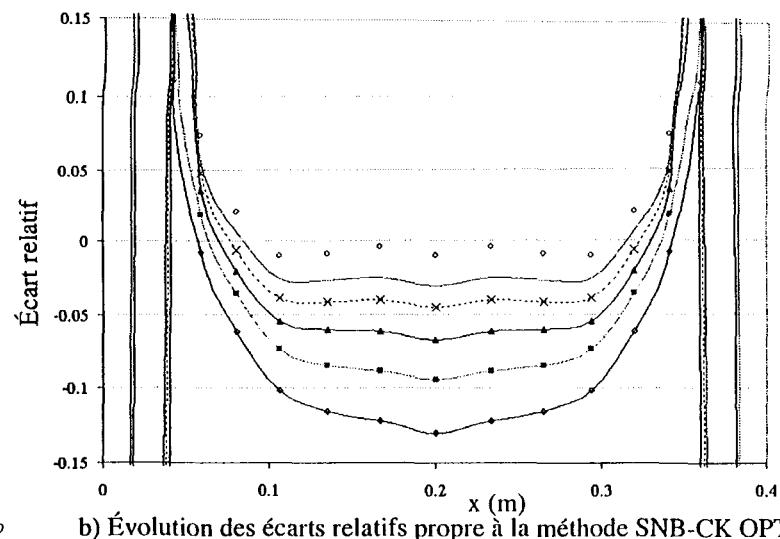


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

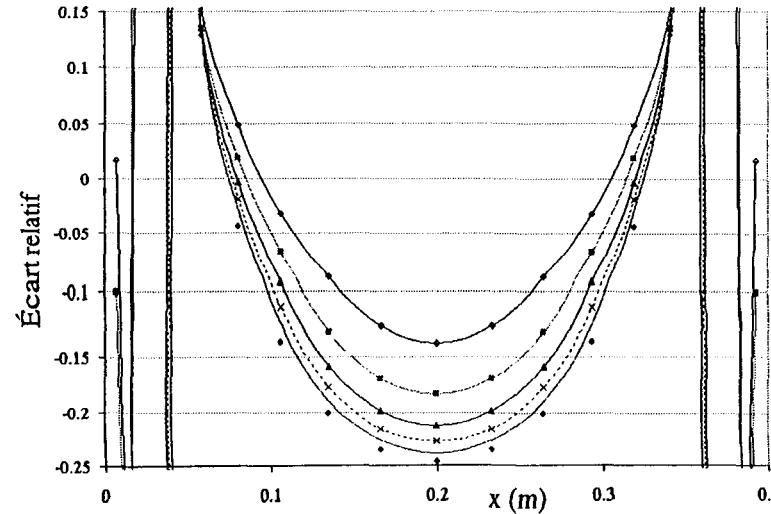
Planche 53b: Milieu anisotherme et homogène ($d=0,4$ m)



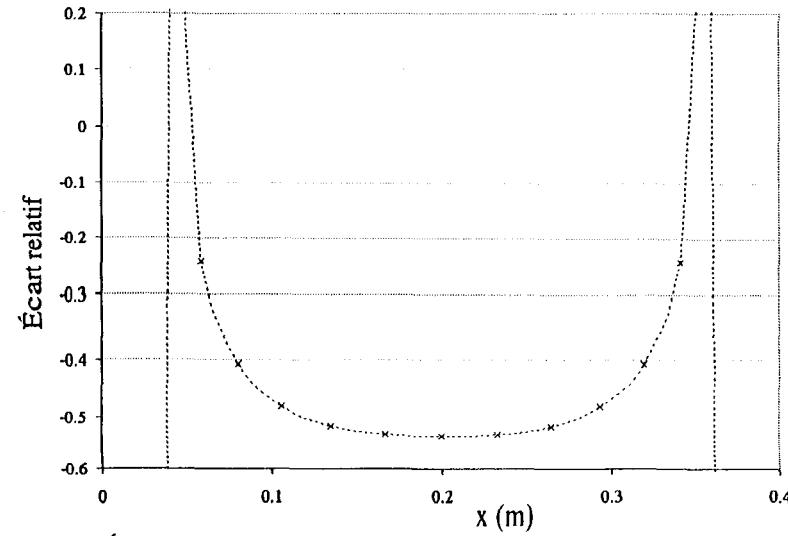
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

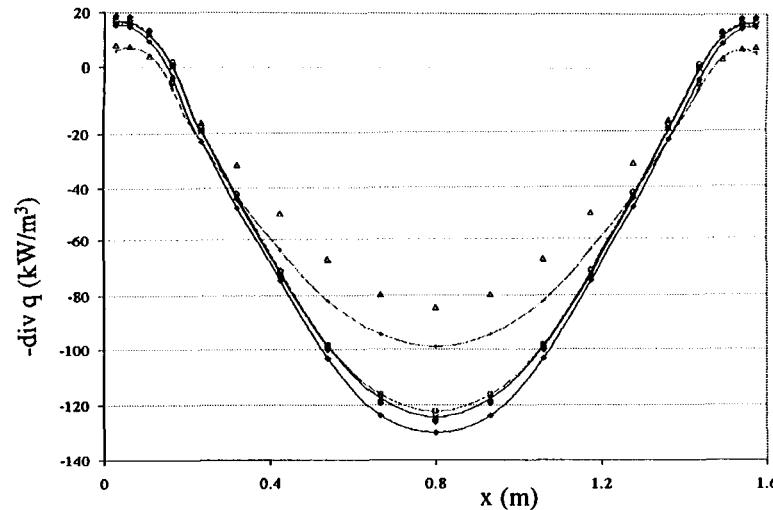


g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Soufiani)

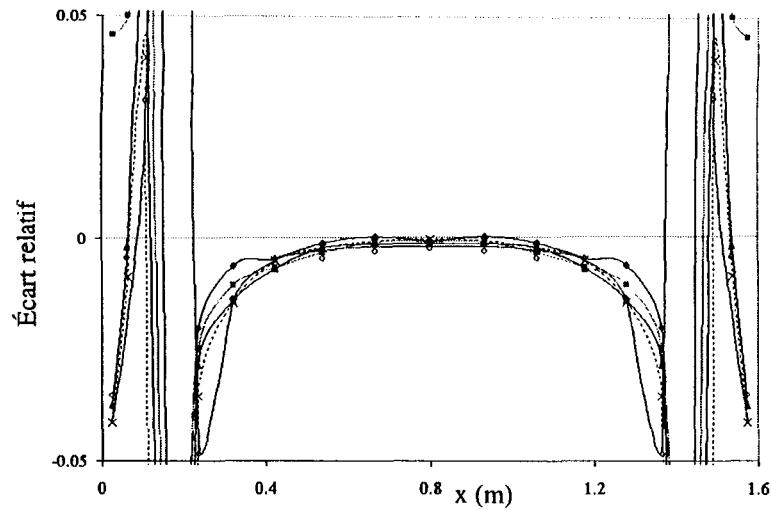


h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)

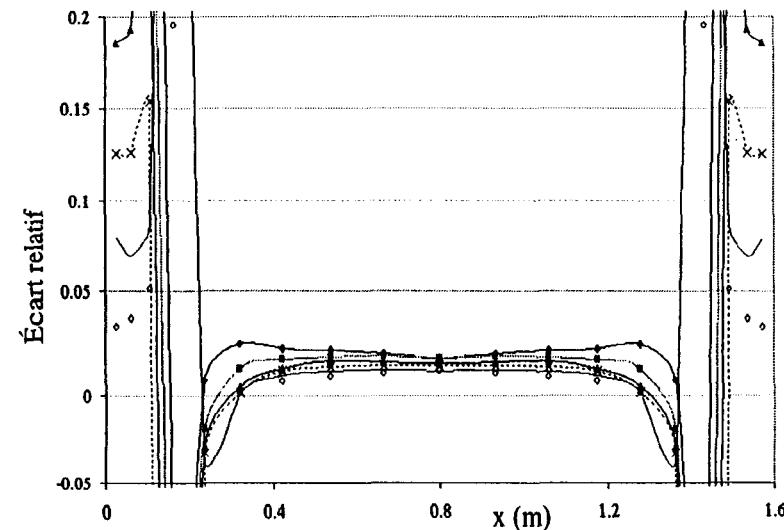
Planche 54a: Milieu anisotherme et homogène ($d=1,6$ m)



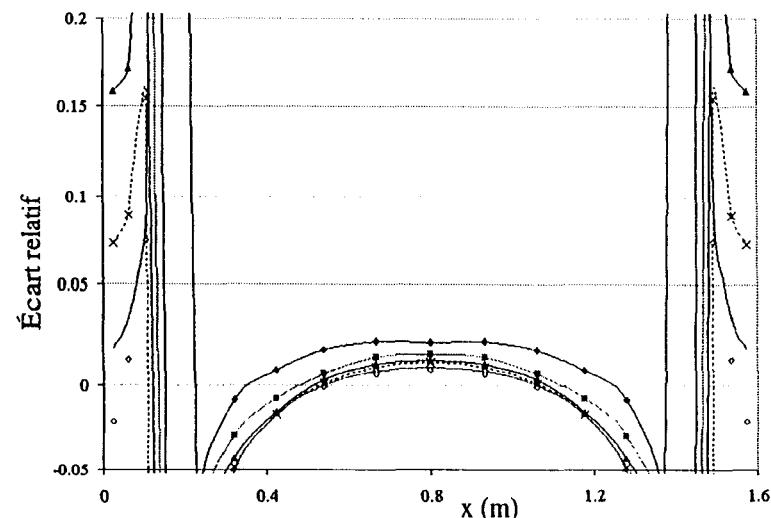
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT

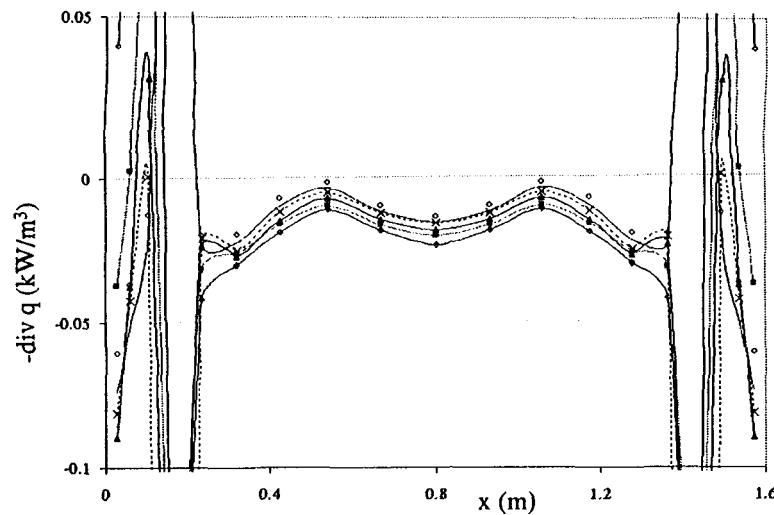


c) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 10

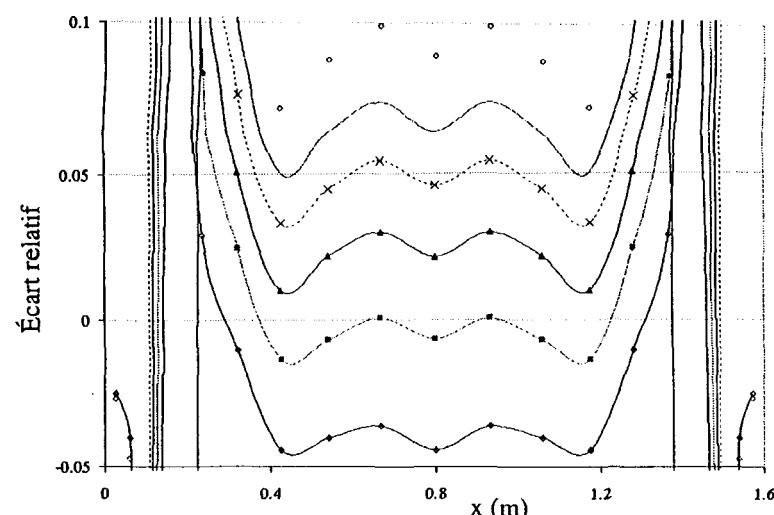


d) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK 20

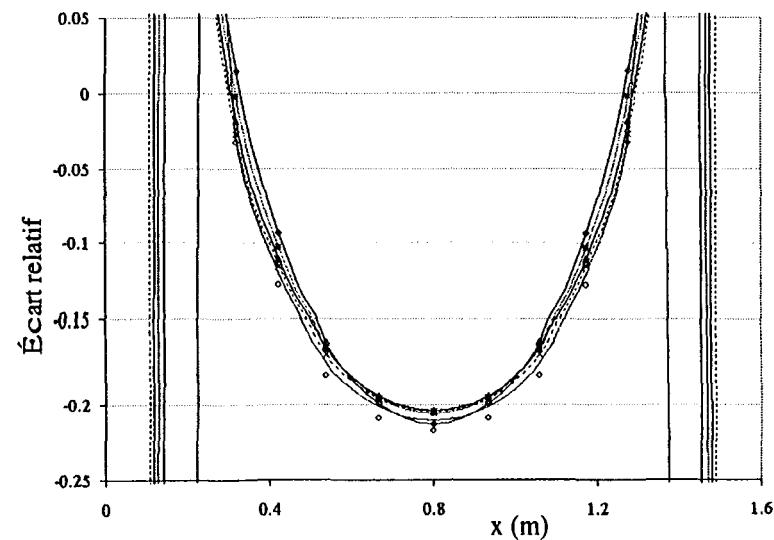
Planche 54b: Milieu anisotherme et homogène ($d=1,6$ m)



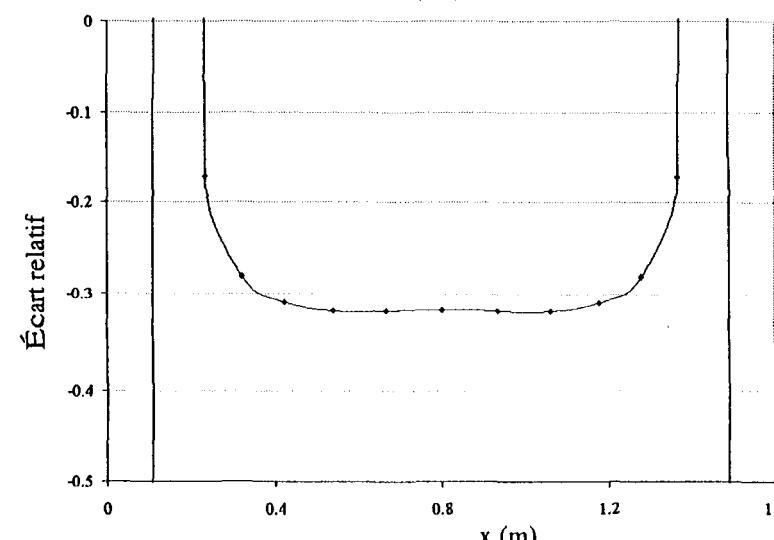
a) Variation de la divergence du flux avec une fraction molaire de 10%



b) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SNB-CK OPT



g) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Soufiani)



h) Évolution des écarts relatifs propre à la méthode SPGG (Smith)