



HAL
open science

Modélisation de l'émission totale de produits gazeux issus de détonations

Isabelle Ranc-Darbord, Bruno Serio, Gerard Baudin, Khanh-Hung Tran, Eloi Neuville, Jérémy Lebedinsky

► To cite this version:

Isabelle Ranc-Darbord, Bruno Serio, Gerard Baudin, Khanh-Hung Tran, Eloi Neuville, et al.. Modélisation de l'émission totale de produits gazeux issus de détonations. Congrès Française de Thermique, May 2016, Toulouse, France. <hal-01690800>

HAL Id: hal-01690800

<https://hal.parisnanterre.fr/hal-01690800v1>

Submitted on 23 Jan 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Modélisation de l'émission totale de produits gazeux issus de détonations

Isabelle Ranc-Darbord^{1*}, Bruno Serio¹, Gérard Baudin², Khanh-Hung Tran¹, Eloi Neuville¹, Jérémie Lebedinsky³

¹Laboratoire Energétique, Mécanique, Electromagnétisme, Université Paris Ouest Nanterre La Défense, 50 rue de Sèvres, 92410 Ville d'Avray

²CEA, DAM Gramat, BP80200, 46500 Gramat

³LASUR 119 bis, rue de Colombes – 92600 Asnières

*(auteur correspondant : isabelle.ranc@u-paris10.fr)

Résumé - Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au calcul de l'émissivité totale des trois gaz CO, CO₂ et H₂O dans les domaines de pression 0,5-100 bar et de température 300 K-5000 K. Dans la littérature, la modélisation de l'émissivité totale de ces espèces est limitée à 3000 K [1][2][3] et à 50 bar [4]. Le calcul a été effectué à l'aide d'une intégration raie par raie du spectre d'émission calculé à partir des bases de données d'absorption moléculaire à haute résolution HITRAN 2012 [5] et HITEMP 2010 [6]. Des abaques de l'émissivité totale d'une colonne de gaz d'épaisseur un mètre ont été calculés en fonction de la température pour les trois espèces moléculaires. Ils seront mis à la disposition de la communauté scientifique.

Nomenclature

C_i concentration de l'espèce i ,
 $molécules.cm^{-3}$

K_σ coefficient d'absorption, cm^{-1}

L Luminance totale, $W.m^{-2}.sr^{-1}$

P Pression, Pa

P_i Pression partielle, Pa

Q fonction de partition

T température, K

X fraction molaire

Symboles grecs

ε émissivité totale

ε_σ émissivité spectrale

σ nombre d'onde, cm^{-1}

1. Introduction

Afin d'améliorer les modèles radiatifs pris en compte dans les simulations thermochimiques ou CFD des combustions du type déflagrations ou détonations, nous nous sommes intéressés aux trois espèces chimiques CO₂, H₂O et CO issues d'une réaction $C_aH_bO_cN_d$ dans l'air. Cette réaction présente un effet radiatif important. Leckner [1] et Modak [2] ont proposé des modèles de calcul de l'émissivité totale pour les gaz CO₂ et H₂O à pression ambiante, valables pour un produit $P \times \ell$ (P pression, ℓ épaisseur de gaz) jusqu'à 10 bar.m et des températures n'excédant pas 2200 K. Coppalle et Vervisch [3] ont proposé pour les mêmes gaz, un calcul s'appuyant sur le modèle de bandes d'Edwards, dans la gamme de température 2000 K à 3000 K pour des valeurs du paramètre $P \times \ell$ allant de 0,01 à 3,5 atm.m. Enfin, Pearson et al [4] ont étendu la modélisation à des températures jusqu'à 3000 K et des pressions comprises entre 0,1 et 50 atm pour CO₂, H₂O et CO. A notre connaissance, les données sur le CO sont encore peu nombreuses, notamment aux hautes températures. Par exemple, les pressions et températures atteintes par les gaz issus d'une détonation d'un explosif solide atteignent 380 kbar et 4500 K ; lors de leur détente dans l'air ambiant, leur pression décroît subitement à quelques milliers de bar. Si l'explosion a lieu dans un volume clos de la taille classique d'une pièce d'un bâtiment, la pression statique peut atteindre 80 bar, et les températures peuvent être supérieures à 3000 K. Par conséquent, l'application des modèles énoncés précédemment aux réactions mettant en œuvre des explosifs, nécessite d'étendre leur limite d'utilisation.

Dans cet article, nous présentons tout d'abord les relations permettant de calculer l'émissivité totale d'un gaz et d'un mélange de gaz aux hautes températures et pressions. Nous avons développé en langage python, un programme appelé SALSA, permettant de calculer l'émissivité totale d'un gaz ou d'un mélange de gaz. Pour les 3 molécules CO, CO₂ et H₂O, le domaine de température couvert par SALSA s'étend de 85 K à 5000 K, soit 2000 K au-dessus des modèles existants dans la littérature, et les pressions sont comprises entre 0,1 et 100 bar.

2. Principe du calcul de l'émissivité totale d'un gaz

2.1. Définition

L'émissivité totale d'un gaz s'exprime en fonction de la luminance spectrale émise par le gaz (L_σ en W/(cm⁻¹. m².sr)) et de celle du corps noir (L_σ^0) par la relation suivante [7] :

$$\varepsilon = \frac{\int_0^\infty L_\sigma(\sigma, T) d\sigma}{\int_0^\infty L_\sigma^0(\sigma, T) d\sigma} \quad (1)$$

Au dénominateur, la luminance totale du corps noir exprimée en (W. m⁻².sr⁻¹) est donnée par la loi de Stefan-Boltzmann :

$$L_T^0 = \frac{\sigma_b \cdot T^4}{\pi} \quad (2)$$

où $\sigma_b = 5,670373 \cdot 10^{-8}$ W.m⁻².K⁻⁴ est ici la constante de Stefan-Boltzmann.

Au numérateur, on peut exprimer la luminance du gaz en fonction du facteur d'émission et de la luminance spectrale du corps noir donnée par la loi de Planck, ce qui conduit à l'expression de l'émissivité totale :

$$\varepsilon = \frac{\pi}{\sigma_b T^4} \int_0^\infty \varepsilon_\sigma \frac{C_1 \cdot \sigma^3}{\exp\left(\frac{C_2 \cdot \sigma}{T}\right) - 1} d\sigma \quad (3)$$

avec les constantes du rayonnement $C_1 = 1,191 \cdot 10^{-12}$ W.cm².sr⁻¹ et $C_2 = hc/k_B = 1,43877$ cm.K. σ est le nombre d'onde en cm⁻¹ et T la température en kelvins.

L'émissivité totale sera donc calculée à partir du spectre d'émission du gaz étudié et d'un calcul intégral.

2.2. Bases de données spectroscopiques

Une molécule de gaz émet un rayonnement électromagnétique dû aux transitions électroniques, aux vibrations intra et inter moléculaires et aux rotations moléculaires. Les trois bases de données actuellement disponibles pour H₂O, CO₂ et CO sont :

- HITRAN (2012) sur le domaine T < 3000 K et P de quelques atmosphères,
- HITEMP (2010) : T jusqu'à 5000 K et P de quelques atmosphères,
- CDS-4000 (dédiée au CO₂) : 2500 K < T < 5000 K - P ~ 1 atm.

Nous nous sommes appuyés sur les deux premières pour nos calculs. Le Tableau 1 indique les domaines spectraux couverts par ces bases et le nombre de raies prises en compte.

Base/Espèce	H ₂ O	CO ₂	CO
Hitran 2012	0 cm ⁻¹ – 25233 cm ⁻¹ 142 045 raies	345 cm ⁻¹ - 12785 cm ⁻¹ 169 292 raies	3 cm ⁻¹ - 8465 cm ⁻¹ 1019 raies
Hitemp 2010	0 cm ⁻¹ – 30 000 cm ⁻¹ 114 241 164 raies	258 cm ⁻¹ - 9648 cm ⁻¹ 11 193 608 raies	3 cm ⁻¹ - 8465 cm ⁻¹ 113 631 raies

Tableau 1 : Nombre de raies et étendues spectrales contenues dans les bases HITRAN et HITEMP

L'émissivité totale du CO a été calculée entre 15 cm^{-1} et 8000 cm^{-1} . En effet, au-delà de 8000 cm^{-1} , les bases de données ne révèlent pas de raies du CO. La limite inférieure de 15 cm^{-1} a été fixée pour prendre en compte correctement les effets de bords dus à l'élargissement du profil de raie avec la pression et la température. Cette étendue a été également utilisée pour le CO_2 car la contribution de l'émission entre 8000 cm^{-1} et 12785 cm^{-1} est inférieure à 1%. Pour H_2O , couper à 8000 cm^{-1} conduit à négliger cinq raies du visible et proche-infrarouge.

2.3. Calcul du spectre d'émission d'une espèce i

L'émissivité spectrale d'une colonne de gaz homogène et isotherme d'épaisseur ℓ s'écrit :

$$\varepsilon_\sigma(\sigma, T, C_i, P, \ell) = 1 - e^{-K_\sigma(\sigma, T, C_i, P) \cdot \ell} \quad (4)$$

$K_\sigma(\sigma, T, C_i, P)$ est le coefficient d'absorption monochromatique du gaz. P , T la pression et la température du gaz. C_i est la concentration de l'espèce en molécules. cm^{-3} . K_σ est calculé à partir des données présentes dans la base en fonction de l'intensité de la raie $S_{\sigma_j}^N(T)$ et du profil de la raie $f_j(\sigma - \sigma_j, T, C_i, P)$:

$$K_\sigma(\sigma, T, C_i, P) = \sum_j S_{\sigma_j}^N(T) f_j(\sigma - \sigma_j, T, C_i, P) C_i \quad (5)$$

Le profil de raie est une fonction permettant de représenter la largeur des raies d'absorption. La somme sur toutes les raies du spectre centrées sur σ_j permet de prendre en compte le recouvrement des raies dans le calcul de la raie d'absorption centrée sur le nombre d'onde σ . Nous devons donc calculer l'intensité à la température T et le profil des raies dans les conditions T , C_i et P .

2.4. Formules du calcul de l'intensité étendu aux hautes températures (entre 3000 K et 5000 K)

L'intensité est donnée par la base à la température de référence T_0 . L'intensité d'absorption à une température quelconque T est obtenue par la relation [6] :

$$S_{\sigma_j}^N(T) = S_{\sigma_j}^N(T_0) \frac{Q_{tot}(T_0)}{Q_{tot}(T)} \exp\left(-C_2 E_i \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \left[\frac{1 - \exp\left(-\frac{C_2 \sigma_j}{T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{C_2 \sigma_j}{T_0}\right)} \right] \quad (6)$$

où E_i est l'énergie du niveau inférieur de la transition en cm^{-1} et $Q_{tot}(T)$ la fonction de partition à la température T .

Pour évaluer la valeur de la fonction de partition en fonction de la température des différentes espèces et de leurs isotopes sur le domaine 70 K-3000 K, les auteurs du site d'HITRAN proposent au téléchargement un programme de calcul en fortran nommé TIPS_2011_v1p0.for (*Total Internal Partition Sum*) créé par Gamache [8]. La plage de calcul de la fonction de partition étant limitée à 3000 K, il nous faut étendre son calcul jusqu'à 5000 K.

La fonction de partition représente l'inverse du coefficient de proportionnalité permettant de calculer la probabilité qu'un système soit dans un état énergétique donné E_j . Cette probabilité est proportionnelle à $e^{-E_j/k_B T}$, k_B étant la constante de Boltzmann. Pour un système de volume V constitué de N particules, la fonction de partition est calculée de sorte que la somme des probabilités de l'existence de l'ensemble des états énergétiques soit égale à 1 et s'exprime en fonction du facteur de Boltzmann $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et des niveaux d'énergie $E_j(N, V)$ selon :

$$Q(N, V, T) = \sum_j e^{-\beta E_j} \quad (7)$$

Pour étendre le calcul de la fonction de partition du dioxyde de carbone (CO₂), nous avons utilisé les valeurs proposées par Tashkun [9] tabulées jusqu'à 5000 K. Nous avons complété le programme fortran TIPS_2011_v1p0 avec ces valeurs, uniquement pour l'isotope le plus abondant, ¹²C¹⁶O₂.

Pour l'eau, nous avons utilisé la publication de Vidler et Tennyson [10] donnant une approximation de la fonction de partition. Celle-ci consiste à supposer la fonction de partition électronique égale à 1 quelle que soit la température. La fonction Q est donc le produit $q_{trans}q_{rot}q_{vib}$. Pour le terme de translation, les auteurs utilisent les fonctions classiques s'appuyant sur le modèle des gaz parfaits.

$$q_{trans} = \left(\frac{2\pi mk_B T}{h^2}\right)^{3/2} V \quad (8)$$

Pour l'énergie interne ($Q_{int} = q_{rot}q_{vib}$), les auteurs proposent la formule suivante :

$$\log Q_{int} = \sum_{i=0}^6 a_i (\log T)^i \quad (9)$$

les coefficients a_i prenant les valeurs :

a_0	-14,0874691574179	a_4	-8,10851262935532
a_1	37,924324859882	a_5	1,33106871720535
a_2	-42,6817978731789	a_6	-0,0872981051095757
a_3	25,3302448517916		

Tableau 2 : Coefficients de la fonction $\log(Q_{int})$ selon Vidler et Tennyson [10]

Pour le monoxyde de carbone (CO), les travaux de Sauval et al [11] nous ont permis de calculer les fonctions de partition à haute température. Voici la fonction retenue :

$$\log Q(CO) = 3.6076 - 1.7608 \cdot \log_{10} \left(\frac{5040}{T}\right) + 0.4172 \left(\log_{10} \left(\frac{5040}{T}\right)\right)^2 \quad (10)$$

Ce modèle est valable pour des températures comprises entre 1000 et 9000 K. Nous avons donc gardé les fonctions de partition de Gamache aux températures inférieures à 1000 K.

En comparant le rapport des fonctions de partition calculé avec notre modèle et avec les tables du programme fortran de Gamache, nous constatons que le modèle approche correctement les tables sur le domaine de température commun (Figure 1).

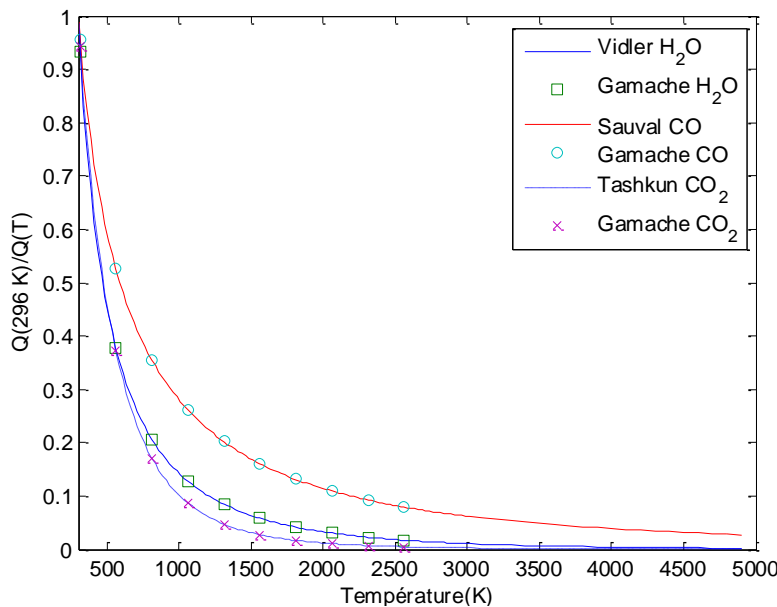


Figure 1 : Rapport $Q(296K)/Q(T)$ pour H₂O [10], CO [11] et CO₂ [9] étendu entre 3000 K et 5000 K

2.5. Formules du calcul du profil des raies

Pour le calcul de l'élargissement des raies, nous prenons en compte l'élargissement Doppler et l'élargissement collisionnel. L'effet Doppler est lié à l'agitation thermique des molécules et entraîne un décalage du nombre d'onde, qui est fonction de la vitesse de la molécule. Le profil est de forme gaussienne. L'élargissement Doppler est indépendant de la pression. En revanche, il augmente lorsque la température augmente. On dispose d'une relation explicite de la largeur Doppler à mi-hauteur, en fonction de la température, de la position spectrale de la raie et de la masse molaire de l'espèce : $\gamma_D = \gamma_D(\sigma_j, T, M_{mol,i})$ (voir [12], p32).

D'autre part, l'élargissement dû aux collisions entre la molécule et ses voisines de la même espèce ou des autres espèces du milieu gazeux, est pris en compte à l'aide de la fonction de Lorentz. Il dépend de la pression du gaz, de la température ainsi que des concentrations des différentes espèces en présence.

$$\gamma_L(P, P_i, P_j, T) = (\gamma_{air}(1 - X_i) + \gamma_{auto}X_i)P \left(\frac{T_0}{T}\right)^n \quad (11)$$

où n (égal à n_{air}), γ_{air} et γ_{auto} sont donnés par les auteurs de la base Hitran.

L'élargissement naturel des raies dû à la durée de vie des niveaux d'énergie est négligeable. Les élargissements Doppler et collisionnel sont indépendants et le profil résultant de leurs effets combinés peut être représenté par un profil de Voigt obtenu par le produit de convolution de ces deux profils. C'est ce profil que nous avons utilisé.

2.6. Effet de la pression sur la position des raies

La pression a un effet sur l'élargissement collisionnel des raies et modifie également leurs positions spectrales. Ce déplacement est calculé de la manière suivante :

$$\sigma_j^{shift} = \sigma_j + \delta(T)P \quad \text{et} \quad \delta(T) = \delta(T_0) \left(\frac{T_0}{T}\right)^{nshift} \quad (12)$$

$\delta(T_0)$ est donné à 296 K dans la base de données HITRAN.

Enfin, le décalage de la position de la raie causé par l'effet Doppler dû à la vitesse radiale des molécules sera négligé dans cette étude.

2.7 Cas d'un mélange de gaz

Le calcul du spectre d'absorption d'un mélange de n espèces gazeuses est obtenu en sommant les coefficients d'absorption des constituants :

$$K_\sigma(\sigma, T, C, P) = \sum_{i=1}^n C_i \sum_j S_{\sigma_j}^N(T) f_j(\sigma - \sigma_j, T, C_i, P) \quad (13)$$

i : les espèces, j : les positions et C : la composition du mélange

3. Résultats obtenus et comparaison avec la littérature

3.1. Validation des courbes d'émissivité totale

Les résultats obtenus sont comparés avec ceux de Pearson et al [4] pour H₂O, CO₂, et CO, dans un domaine de température compris entre 500 K et 2800 K, une pression totale de 1 atmosphère, une épaisseur de gaz de 1 mètre et une fraction molaire de 0,01. Ces courbes sont reproduites ci-dessous à partir des données de la base Hitran (H₂O, CO₂ et CO) et de la base Hitemp (CO). Nos résultats sont en bon accord avec ceux de la littérature confirmant ainsi la validité des codes développés.

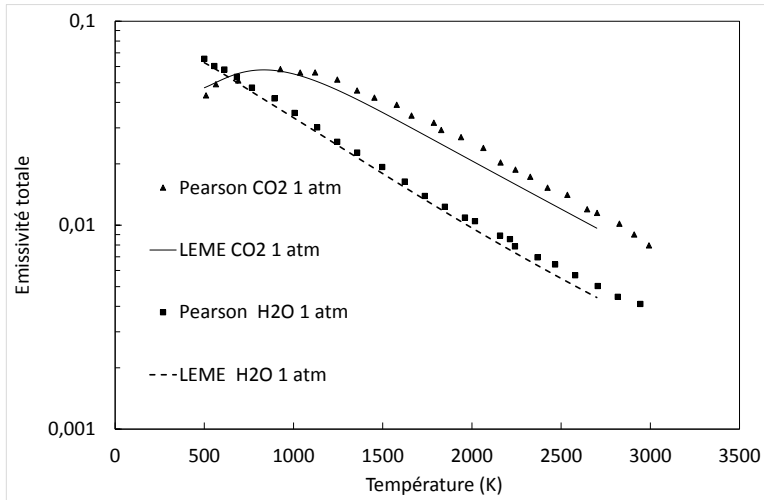


Figure 2 : Résultats de Pearson et des calculs SALSA avec les données Hitran 2012. La pression est 1atm, la fraction molaire de CO est égale à 0,01 et l'épaisseur de gaz est égale à 1 m.

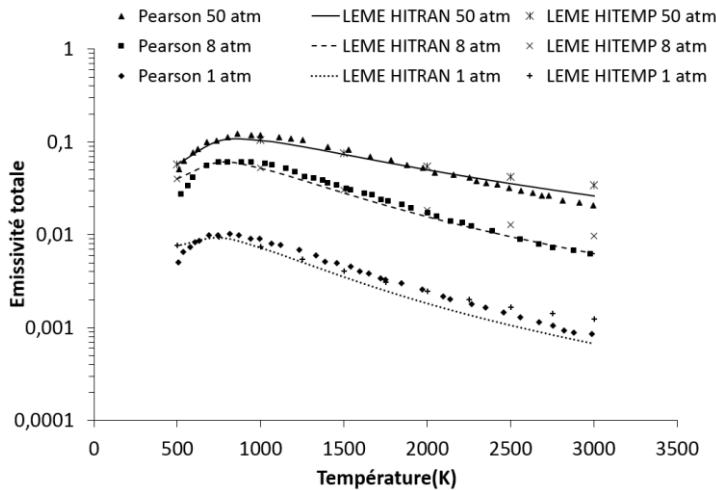


Figure 3 : Résultats de Pearson et des calculs SALSA avec les données Hitran 2012 et Hitemp 2010 avec la fraction molaire de CO égale à 0,01 et l'épaisseur de gaz égale à 1 m.

3.2. Résultats de calcul pour l'émissivité totale

Le calcul de l'émissivité totale (bande comprise entre 15 et 8000 cm^{-1}) des trois gaz étudiés (H_2O , CO_2 , et CO), à des températures comprises entre 85 et 4985 K, pour 9 pressions différentes et une épaisseur de gaz de 1 m, a été effectué. Les 9 valeurs de la pression sont les suivantes : 0,5 ; 1 ; 5 ; 10 ; 20 ; 40 ; 60 ; 80 ; 100 bar. Ces calculs ont permis d'obtenir les courbes présentées ci-dessous. La forme des courbes obtenues par Hottel et Leckner [7] est bien reproduite dans les domaines de pression et température qu'ils avaient considérés. L'émissivité totale augmente avec la pression, le comportement radiatif du gaz se rapprochant de celui d'un corps noir. Au contraire, au-delà de 800 K environ, l'émissivité totale diminue avec la température. Le temps de calcul nécessaire à l'obtention de ces courbes a été de plus de trois semaines 24/24h, avec une machine disposant d'un processeur 8 cœurs (core i7 à 3.4 GHz) muni de 16 Go de mémoire vive.

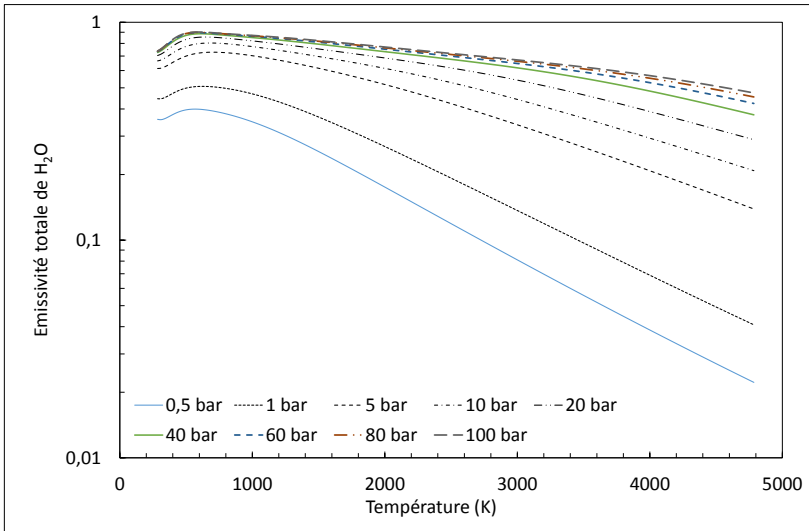


Figure 4 : Emissivité totale de l'eau. La fraction molaire est 1 et l'épaisseur de gaz 1m.

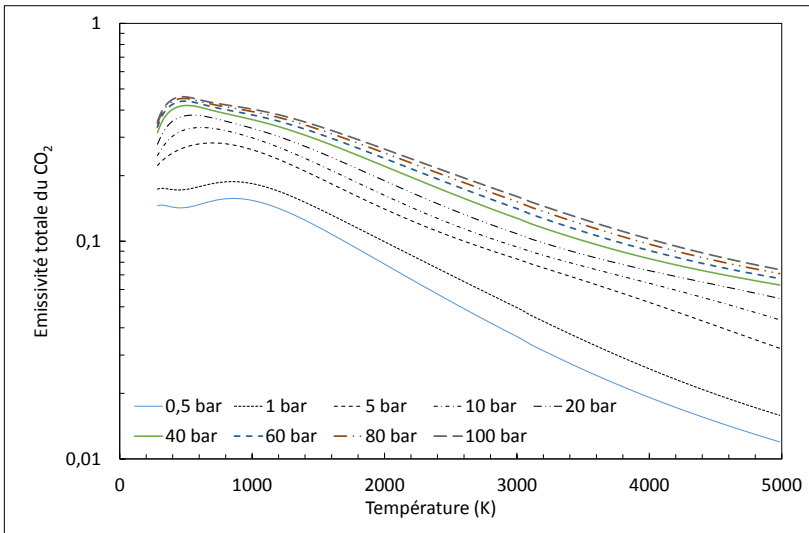


Figure 5 : Emissivité totale du dioxyde de carbone. La fraction molaire est 1 et l'épaisseur de gaz 1m.

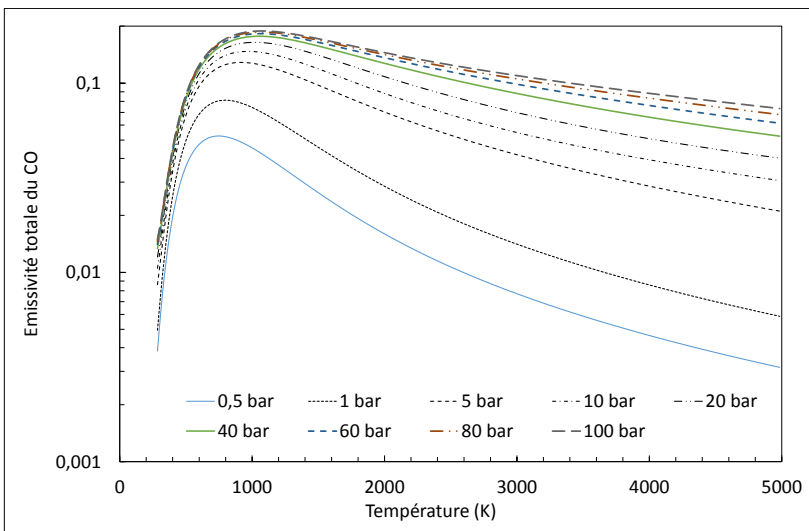


Figure 6 : Emissivité totale du monoxyde de carbone. La fraction molaire est 1 et l'épaisseur de gaz 1 m.

4. Conclusion

Les résultats donnés par notre programme présentent de très légers écarts avec ceux de la littérature dans les domaines de pression et de température communs. Deux approximations peuvent expliquer ces faibles écarts. D'une part, le calcul de la fonction de partition pour le CO_2 a été limité à l'isotope le plus abondant. D'autre part, une largeur de 10 nm de part et d'autre de la position centrale de la raie a été fixée pour le calcul de l'intensité. Au-delà, la raie ne contribue plus au calcul. Cela introduit une erreur très faible à faible pression (vérifié sur les résultats d'Hitran on the web [13]) mais cette erreur augmente lorsque les raies s'élargissent notamment aux pressions élevées. Ibgui [14] utilise un critère moins arbitraire, en fonction de l'intensité de la raie d'absorption. Un programme expérimental consistant à produire les espèces gazeuses H_2O , CO_2 , et CO par déflagration d'un mélange $\text{H}_2\text{-O}_2$ dilué dans de l'azote et du CO_2 est en cours de réalisation au laboratoire LEME, afin de valider les calculs sur le CO en pression. Les déflagrations sont produites dans une chambre cylindrique munie d'un dispositif de spectroscopie infrarouge ultra-rapide. Enfin, l'ensemble des abaques donnant la valeur de l'émissivité totale en fonction de la température et de la pression du gaz sera mis à disposition de la communauté scientifique sur un serveur de l'Université Paris Ouest Nanterre la Défense.

Références

- [1] B. Leckner, Spectral and Total Emissivity of Water Vapor and Carbon Dioxide, *Combustion and Flame*, 1972, vol.19, p.33-48.
- [2] A.T. Modak, Radiation from Products of Combustion, *Fire Research*, 1978/79, vol.1, p.339-361.
- [3] Coppalle and P. Vervisch, The Total Emissivities of High-Temperature Flames, *Combustion and Flame*, 1983, vol. 49, p.101-108.
- [4] J.T. Pearson, B.W. Webb, V.P. Solovjov, J. Ma, Efficient representation of the absorption line blackbody distribution function H_2O , CO_2 , and CO at variable temperature, mole fraction, and total pressure, *J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer*, 2014, vol. 138 p.82-86
- [5] L.S. Rothman, I. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. C. Benner, P. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L. Brown, A. Campargue, K. Chance, E. Cohen, L. Coudert, V. Devi, B. Drouin, A. Fayt, J.-M. Flaud, R. Gamache, J. Harrison et J.-M., The HITRAN2012 molecular spectroscopic database, *J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer*, 2013, vol. 130, p. 4-50.
- [6] L.S. Rothman, I.E. Gordon, R.J. Barber, H. Dothe, R.R. Gamache, A. Goldman, V. Perevalov, S.A. Tashkun, and J. Tennyson, HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database, *J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer*, 2010 vol.111, p.2139-2150.
- [7] Modest et M. F., Radiative Heat Transfer, second Edition, Academic Press, 2003
- [8] A. L. Laraia, R. R. Gamache, J. Lamouroux, I. E. Gordon et L.S. Rothman, Total internal partition sums to support planetary remote sensing, *Icarus*, 2011, vol. 215, issue 1, p. 391-400
- [9] S.A. Tashkun, V.I. Perevalov, CDSD-4000: High-resolution, high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank, *J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer*, 2011, vol. 112, p. 1403-1410.
- [10] M. Vidler et J. Tennyson, *Journal of chemical physics*, Accurate partition function and thermodynamic data for water, 2000, vol.113, p. 9766-9771.
- [11] J. Sauval et J. B. Tatum, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 1984, vol. p. 193-209.
- [12] R. Conseil, Spectrométrie infrarouge de gaz de combustion, Thèse de l'Université de Franche-Comté, 2011
- [13] Hitran on the web, Available: hitran.iao.ru
- [14] L. Ibgui, J.-M. Hartmann, An optimized line by line code for plume signature calculations-I: model and data, *J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer*, 2002, vol. 75, p. 273-295.