



HAL
open science

Tomographie par spectroscopie d'absorption à multifaisceaux lasers accordables en longueur d'onde pour la cartographie des espèces chimiques dans les foyers aéronautiques.

Vincent Corbas, Frédéric Champagnat, Guy Le Besnerais, Axel Vincent, Nicolas Fdida, Ajmal Khan Mohamed

► To cite this version:

Vincent Corbas, Frédéric Champagnat, Guy Le Besnerais, Axel Vincent, Nicolas Fdida, et al.. Tomographie par spectroscopie d'absorption à multifaisceaux lasers accordables en longueur d'onde pour la cartographie des espèces chimiques dans les foyers aéronautiques.. 16ème Congrès Francophone de Techniques Laser pour la mécanique des fluides, CNRS, CentraleSupélec, Université Paris Saclay, IRSN, Sep 2018, Dourdan, France. <hal-02097690>

HAL Id: hal-02097690

<https://hal.science/hal-02097690v1>

Submitted on 12 Apr 2019

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

Tomographie par spectroscopie d'absorption à multifaisceaux lasers accordables en longueur d'onde pour la cartographie des espèces chimiques dans les foyers aéronautiques.

Vincent CORBAS, Frédéric CHAMPAGNAT, Guy LE BESNERAIS, Axel VINCENT-RANDONNIER, Nicolas FDIDA, Ajmal khan MOHAMED

ONERA Chemin de la Hunière BP 80100 FR-91132 Palaiseau cedexl

Email auteur correspondant : vincent.corbas@onera.fr

Les concentrations d'espèces chimiques gazeuses comme H_2O et CO_2 et les grandeurs thermodynamiques comme la pression et la température sont des paramètres clés caractérisant un processus de combustion. La mesure de ces paramètres peut être utilisée dans des simulations numériques pour améliorer la conception des moteurs à combustion et leur efficacité. Cet article présente une extension de la méthode Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy (TDLAS) avec l'apport d'une technique de tomographie pour obtenir des cartographies en deux dimensions de concentrations chimiques, de température et de pression dans des foyers aéronautiques. Cette technique de reconstruction dont le principe sera expliqué en détail dans cet article a été testée en simulation et validée sur brûleur expérimental.

1 Introduction

La méthode de spectroscopie d'absorption à diode laser (plus connue par son acronyme anglais TDLAS : Tunable Diode laser Absorption Spectroscopy) est une méthode de caractérisation très connue et efficace pour mesurer des concentrations chimiques et des grandeurs thermodynamiques dans des gaz, notamment des flammes de combustion. Dans un milieu homogène, cette technique offre une grande précision sur les grandeurs mesurées. Mais cette précision, voire la possibilité de mesure est dégradée en milieu inhomogène car cette technique n'as aucune résolution spatiale à cause de l'intégration des grandeurs mesurées sur la ligne de visée du laser utilisé à le gaz. Cependant cette résolution peut être retrouvée en exploitant les mesures de plusieurs faisceaux lasers acquis autour du milieu étudié par un algorithme de tomographie : l'Algebraic Reconstruction Technique (ART). La combinaison de la précision de la mesure par TDLAS et la récupération de la résolution spatiale par tomographie devrait permettre d'obtenir des cartographies en deux dimensions des paramètres recherchés. En revanche, pour qu'un algorithme de reconstruction tomographique fonctionne correctement, un grand nombre de points de mesures acquis à plusieurs angles autour de la flamme sont nécessaires, ce qui est problématique car les bancs de combustions sur lesquels les mesures sont destinées à être effectuées ne disposent que de très peu d'accès optiques permettant une telle mesure. Cet article va donc présenter dans un premier temps le fonctionnement de cette méthode tomographique (appelée TDLAT pour Tunable Diode Laser Absorption Tomography), puis des essais de cette méthode en simulation seront présentés. Enfin, le dispositif expérimental et des essais de validation sur un brûleur de laboratoire seront présentés.

2 Principe théorique de la méthode Tunable Diode Laser Absorption Tomography (TDLAT)

La méthode TDLAS est basée sur la loi de Beer-Lambert qui décrit pour un intervalle de longueur d'onde, l'atténuation de l'intensité d'un faisceau laser à travers un milieu comme une fonction de la concentration d'espèces chimiques, de la température et de la pression. Cette courbe d'atténuation en fonction de la longueur d'onde est appelée un spectre d'absorption. La tomographie utilisent un grand nombre de ces courbes simultanément ; ces courbes sont appelées projections ou spectres projetés. Tout d'abord, dans l'idée de chercher une résolution spatiale sous forme de cartographie en deux dimensions, la section de flamme étudiée, qui est non-uniforme, est modélisé comme une grille de pixels contenant chacun des valeurs de concentration des différents espèces chimiques présentes, de température et de pression. Ces valeurs sont constantes à l'intérieur d'un pixel (Figure 1). Selon la loi de Beer-Lambert,

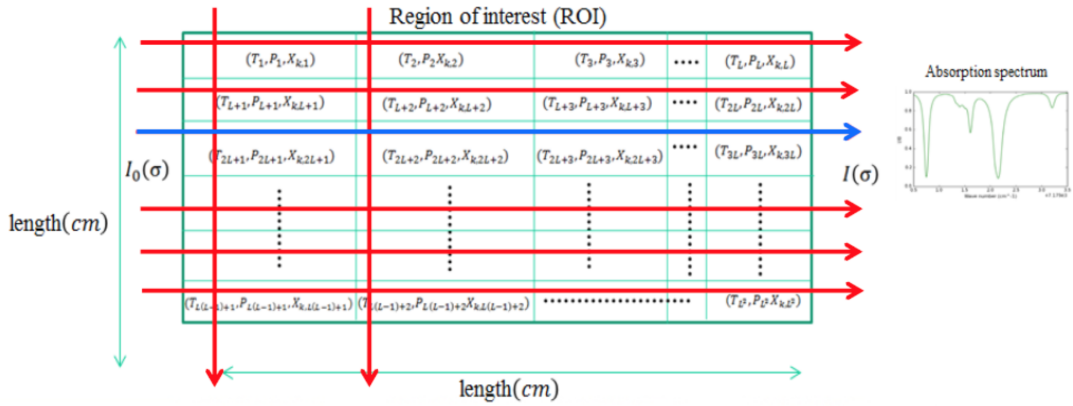


Figure 1: Modélisation d'une section de flamme en grille de pixels contenant des valeurs de températures, pressions et concentrations

l'atténuation de l'intensité du faisceau laser en fonction du nombre d'onde est décrite par l'équation 1:

$$\frac{I_j(\sigma)}{I_0(\sigma)} = \exp \left(- \sum_l \sum_{kr} S(\sigma_{kr}, T_l) \cdot X_{kl} \cdot f(\sigma - \sigma_{kr}, P_l, T_l) w_{jl} \right) \quad (1)$$

Avec σ le nombre d'onde, l l'indice d'un pixel et L^2 le nombre total de pixels dans la zone étudiée, k l'indice de l'isotope de l'espèce chimique étudiée, r l'indice de la raie d'absorption de cet isotope, X_{kl} la concentration de l'isotope k dans le pixel l , P_l la pression dans le pixel l , T_l la température dans le pixel l , w_{jl} la longueur d'intersection entre le faisceau j et le pixel l , $f(\sigma - \sigma_{kr}, P_l, T_l)$ le profil de Voigt décrivant la forme de la raie d'absorption en fonction de la pression et de la température et $S(\sigma_{kr}, T_l)$ la force de raie proportionnelle à la température et la concentration des espèces chimiques. La force de raie [1] est décrite par l'équation 2:

$$S(\sigma_{kr}, T_l) = S(\sigma_{kr}, T_0) \cdot \frac{Q_k(T_0)}{Q_k(T_l)} \cdot \frac{1 - \exp\left(-\frac{hc}{k_B} \cdot \frac{\sigma_{kr}}{T_l}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{hc}{k_B} \cdot \frac{\sigma_{kr}}{T_0}\right)} \cdot \exp\left(-\frac{hc}{k_B} E_{kr} \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \quad (2)$$

Avec Q_k la fonction de partition de l'isotope k , $T_0 = 296K$ la température atmosphérique, h la constante de Planck, c la vitesse de la lumière, k_B la constante de Boltzmann, E_{kr} l'énergie interne de la raie r de l'isotope k . Les valeurs de $S(\sigma_{kr}, T_0)$ et de Q_k sont données pour chaque molécule étudiée dans la base de données HITRAN [2]. Le profil de Voigt correspond à la convolution d'un profil Lorentzien et d'un profil Doppler qui est calculé numériquement avec l'approximation de Hui et al [3]. Pour les calculs tomographiques, une grandeur appelée l'absorption locale d'un pixel l notée α_l est définie. Cette grandeur correspond à la contribution d'un pixel l à l'absorption de la lumière d'un faisceau. Cette grandeur est donnée par l'équation 3:

$$\alpha_l(\sigma) = \sum_{kr} S(\sigma_{kr}, T_l) \cdot X_{kl} \cdot f(\sigma - \sigma_{kr}, P_l, T_l) \quad (3)$$

Le calcul d'un spectre projeté pour un rayon donné en tenant compte de tous les pixels traversés par ce rayon se fait par un produit matriciel donné dans l'équation 4:

$$p_j(\sigma) = \ln \left(\frac{I_j(\sigma)}{I_0(\sigma)} \right) = w_{jl} \cdot \alpha_l(\sigma) \quad (4)$$

Avec $p_j(\sigma)$ le spectre projeté du rayon en fonction du nombre d'onde σ , $\alpha_l(\sigma)$ l'absorption locale dans le pixel l en fonction du nombre d'onde et w_{jl} une matrice contenant les longueurs d'intersections entre chaque rayon j et chaque pixel l . Cette matrice utilisée dans les méthodes de tomographie numériques **Algebraic Reconstruction Technique (ART)** est appelée matrice système [4]. Connaissant la trajectoire de chaque faisceau et la taille des pixels de la zone étudiée, il est possible de connaître tous les coefficients de la matrice w_{jl} et donc de calculer numériquement tous les spectres $p_j(\sigma)$ qu'il est possible

de mesurer autour de la zone pour chaque position de faisceau. L'objectif étant de retrouver les contributions $\alpha_l(\sigma)$ de chaque pixel et d'en déduire les valeurs T_l , P_l et X_{kl} . La méthode TDLAT consiste donc, dans un premier temps, à mesurer plusieurs spectres d'absorptions projetés autour de la flamme dans une configuration de rayons connus. Puis dans un second temps, de calculer numériquement les mêmes spectres avec la matrice de projection. Ensuite, par un algorithme de minimisation des moindres carrés non-linéaires, les profils de température, pression et concentrations sont reconstruits jusqu'à ce que les spectres mesurés et reconstruits soient identiques. Cette méthode est basée sur une technique de **spectroscopie d'absorption combinée avec de la tomographie non-linéaire** [5]. L'équation de minimisation est donnée dans l'équation 5:

$$C = \left\| \overline{p_{mes}} - \overline{p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})} - \frac{\overline{\delta p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}}{\overline{\delta(T_l, P_l, X_{kl})}} (\delta T_l, \delta P_l, \delta X_{kl}) \right\|^2 \quad (5)$$

Avec C le critère à minimiser, $\overline{p_{mes}}$ les spectres projetés mesurés, $\overline{p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}$ les spectres projetés calculés numériquement à partir des profils de température T_l , pression P_l et de concentration X_{kl} initialisés, $\frac{\overline{\delta p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}}{\overline{\delta(T_l, P_l, X_{kl})}}$ les dérivées partielles des spectres calculées en fonction des variations de (T_l, P_l, X_{kl}) dans chaque pixel et $(\delta T_l, \delta P_l, \delta X_{kl})$ les variations de températures, pressions et concentrations dans chaque pixel permettant de faire correspondre les spectres projetés mesurés et calculés. Ce calcul numérique qui est un cas typique de problème inverse et dont le fonctionnement est schématisé sur la figure 2, consiste à initialiser les profils de (T_l, P_l, X_{kl}) pour calculer les projections $\overline{p_{calc}}$ puis, par itérations successives de modifier les valeurs de (T_l, P_l, X_{kl}) jusqu'à que les projections calculées correspondent aux projections mesurées. En revanche, un véritable calcul tomographique nécessite un très

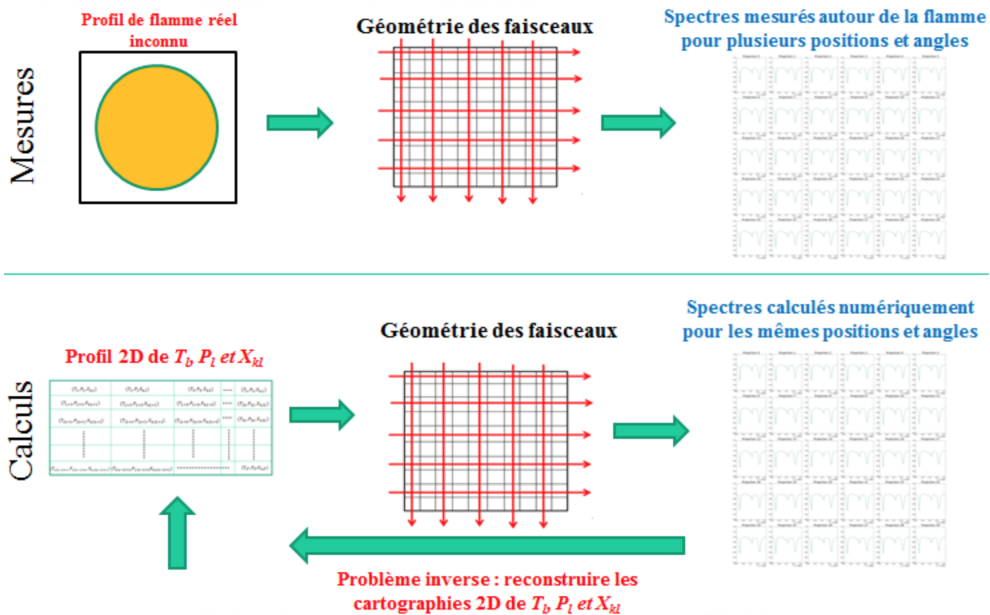


Figure 2: Schéma de principe de l'algorithme TDLAT.

grand nombre de projections pour réaliser une reconstruction correcte. Il nécessite un grand nombre de faisceaux acquis à de nombreux angles différents autour de la zone étudiée, ce qu'il est impossible d'obtenir sur un banc de combustion en raison du faible nombre d'accès optique. Ainsi, la réduction des accès optiques impose une optimisation du nombre de faisceaux et l'ajout d'information a priori dans l'algorithme de reconstruction. Cet ajout d'information est effectué par une régularisation de Tikhonov [6]. Cette régularisation consiste à imposer une contrainte de continuité spatiale dans les profils à reconstruire. Ce qui signifie que les valeurs de température, pression et concentration ne doivent pas être très différentes entre deux pixels voisins. Cette contrainte est justifiée physiquement par la diffusion de la masse des espèces chimiques et de la température à l'intérieur de la flamme. Mathématiquement, cette contrainte se traduit dans l'algorithme par l'ajout de termes de régularisation qui sont des dérivées spatiales (horizontales et verticales) pondérées par coefficients de régularisation qui vont minimiser l'écart

entre les valeurs contenues dans deux pixels voisins. La minimisation est donc décrite par l'équation 6:

$$C = \left\| \overline{\overline{p_{mes}}} - \overline{\overline{p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}} - \frac{\overline{\overline{\delta p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}}}{\overline{\overline{\delta(T_l, P_l, X_{kl})}}} (\delta T_l, \delta P_l, \delta X_{kl}) \right\|^2 + \lambda_x \|D_x\|^2 + \lambda_y \|D_y\|^2 \quad (6)$$

Avec C le critère à minimiser, $\overline{\overline{p_{mes}}}$ les spectres projetés mesurés, $\overline{\overline{p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}}$ les spectres projetés calculés numériquement à partir des profils de température T_l , pression P_l et de concentrations X_{kl} initialisés, $\frac{\overline{\overline{\delta p_{calc}(T_l, P_l, X_{kl})}}}{\overline{\overline{\delta(T_l, P_l, X_{kl})}}}$ les dérivées partielles des spectres calculées en fonction des variations de (T_l, P_l, X_{kl}) dans chaque pixel et $(\delta T_l, \delta P_l, \delta X_{kl})$ les variations de températures, pressions et concentrations dans chaque pixel permettant de faire correspondre les spectres projetés mesurés et calculés, $\|D_x\|$ une matrice de dérivée spatiale horizontale, $\|D_y\|$ une matrice de dérivée spatiale verticale, λ_x et λ_y les coefficients de régularisation qui vont pondérer l'importance des contraintes de régularisation sur la minimisation.

3 Description du dispositif expérimental

Une mesure par TDLAS est réalisée avec un spectromètre d'absorption dont le schéma de principe est décrit sur la Figure 3. Un tel spectromètre est généralement composé d'une diode laser accordable en

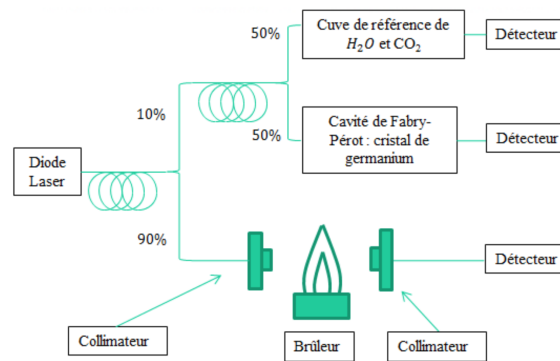


Figure 3: Schéma de principe d'un spectromètre TDLAS.

longueur d'onde (dans notre cas entre $3706,3 \text{ cm}^{-1}$ et $3707,0 \text{ cm}^{-1}$ pour acquérir des raies d'absorption de H_2O et de CO_2 suffisamment détectables dans les conditions thermochimiques étudiées). Les instabilités du laser et les incertitudes d'acquisition des spectres imposent un étalonnage spectral précis pour chaque spectre acquis. Une partie (10%) de l'émission laser est prélevée dans ce but. Ces 10% sont divisés en deux autres parties qui fournissent deux spectres particuliers utilisés pour calibrer la résolution spectrale. La première partie traverse une cuve de référence contenant des vapeurs de H_2O et de CO_2 à une pression de et à une température de , ce qui permet d'obtenir un spectre avec une raie d'absorption identifiée qui sert de référence. La basse pression rendant la raie très fine, il est possible de connaître précisément sa position spectrale en mesurant le minimum de la raie. Dans la seconde partie, la lumière passe dans un cristal de germanium à faces polies à $\lambda/10$ pour faire office de cavité de Fabry-Pérot et qui produit une figure d'interférence (Figure 4). Les pics d'interférence sont séparés en longueur d'onde par une valeur connue dépendante que des propriétés physiques de la cavité. La combinaison de ces deux marqueurs spectraux permet d'obtenir une calibration spectrale absolue sur les spectres mesurés. La troisième partie (90%) du faisceau laser est envoyé dans la flamme à caractériser à l'aide de fibres optiques et de collimateurs off-axis. La flamme étudiée pour la validation de la méthode est un brûleur à flamme plate MacKenna qui a la particularité d'être stable dans le temps et de présenter une symétrie circulaire pour une configuration particulière de débit (Figure 5). En raison de la difficulté pour coupler la lumière provenant de la diode laser dans des fibres optiques, les mesures ont été réalisées avec trois faisceaux. En revanche, trois faisceaux est un nombre trop limité pour réaliser une reconstruction tomographique. Il a donc été choisi d'utiliser un dispositif de scan circulaire autour de la flamme en utilisant une couronne crantée reliée à un moteur (Figure 6), ce qui a permis de multiplier le nombre de faisceaux. De plus, la stabilité dans le temps du brûleur MacKenna autorise le fait

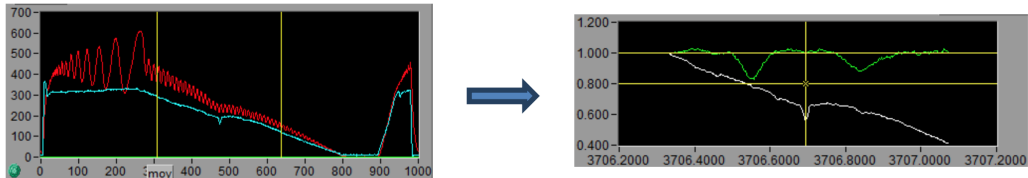


Figure 4: Calibration spectrale.



Figure 5: (a) Image du brûleur expérimental MacKenna et (b) configuration en flamme stable du brûleur pour des débits d'air de 20 mL/s et 2mL/s.

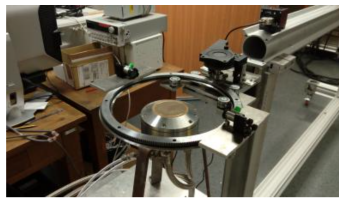


Figure 6: Couronne de scan par rotation.

de considérer que tous les faisceaux acquis au cours du scan sont pris dans les mêmes conditions comme s'ils étaient tous pris instantanément. Les trois rayons de notre système de mesure sont disposés comme indiqué dans la figure 7 pour couvrir le maximum de champ de la flamme. Le premier passe par le centre de la flamme, un deuxième décalé d'un pixel par rapport au centre est incliné de 45° par rapport au précédent et le troisième est décalé de deux pixels par rapport au centre et est incliné de 90° par rapport au premier rayon. Ces trois rayons sont mis en rotation sur un balayage angulaire de 90° (Figure 7). Ensuite, connaissant la position des collimateurs sources et de réception en fonction du mouvement de

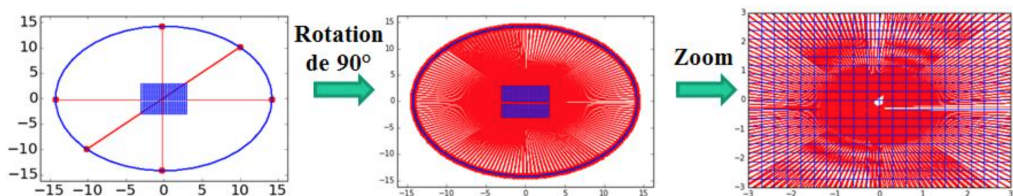


Figure 7: Configuration des faisceaux de mesures.

scan, il est possible de déterminer l'équation de la trajectoire de chaque faisceau ainsi que les longueurs d'intersection avec le quadrillage de pixels, ce qui permet de déterminer les coefficients de la matrice système w_{ji} nécessaire à la reconstruction tomographique.

4 Simulations de la reconstruction tomographique

Une simulation de la reconstruction a été réalisée afin de tester cette configuration de faisceaux avant sa mise en œuvre expérimentale. Des profils en deux dimensions de température, pression et concentrations en H_2O et CO_2 sont simulés. Ces profils simulés sont appelés des fantômes. Une fonction Gaussienne

en deux dimensions est utilisée pour approcher le profil du brûleur MacKenna qui est une flamme de 6 cm de diamètre. Par la suite, des spectres pour chaque rayon traversant ces profils sont simulés, puis l'algorithme de reconstruction tomographique est testé sur ces spectres. Les résultats sont présentés sur la Figure 8. La zone étudiée est un quadrillage 20 par 20 pixels de 0,3 cm de côté. Cette résolution spatiale est imposée par la capacité en calcul à disposition (ordinateur de bureau). Le nombre total de 123 faisceaux (41 faisceaux pour chaque position autour de la flamme). Un cercle de diamètre de 6 cm est représenté sur les images reconstruites pour représenter les contours du brûleur. Chaque spectre constitué de 60 points dispose de raies d'absorptions sensibles aux espèces H_2O et CO_2 . Ces résultats de

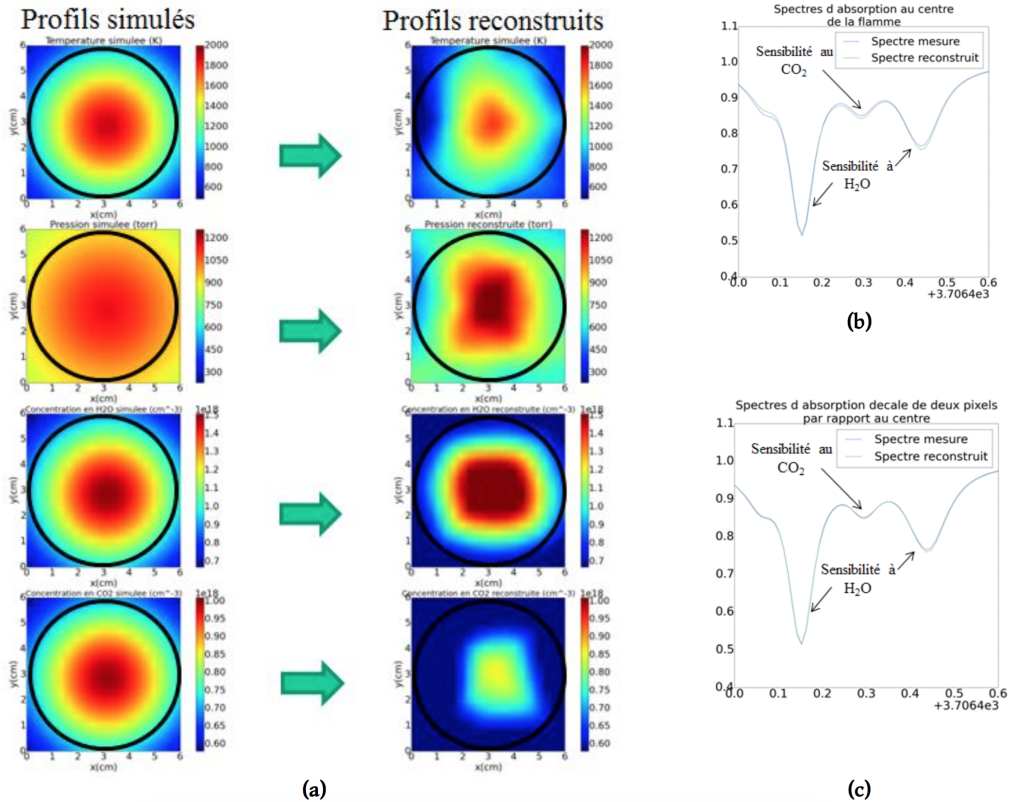


Figure 8: Résultats de simulation de reconstruction tomographique, (a) profils simulés et reconstruits, (b) exemple de spectres simulés et reconstruits au centre de la flamme et (c) exemple de spectres simulés et reconstruits décalés de deux pixels par rapport au centre de la flamme.

simulations avec cette configuration de mesures permettent de reproduire de façon acceptable les profils thermo-chimiques de la flamme MacKenna. Les écarts entre les profils simulés et reconstruits sont dus au maillage spatial peu résolu obtenu par la géométrie des faisceaux utilisée.

5 Reconstruction tomographique expérimentale de la flamme MacKenna

La reconstruction tomographique sur des données expérimentales de la flamme MacKenna a été réalisée exactement dans la même configuration que pour les simulations. Cependant, dans le cas expérimental, le faisceau laser traverse une partie de l'atmosphère entourant la flamme lors des mesures. Il a donc été nécessaire de tenir compte de cette tranche d'air ambiant dans le calibrage des spectres. En effet, de la vapeur d'eau et de dioxyde de carbone sont présents dans l'atmosphère. Pour que ces valeurs n'aient pas d'influence sur les spectres au cours du traitement, une acquisition sans la flamme a été réalisée. De cette manière, la contribution de l'air ambiant sur les spectres peut être déterminée et éliminée de ceux acquis à travers la flamme. La Figure 9 montre les courbes acquises (a,b) et le résultat final (c)

pour le spectre traversant la flamme en son milieu. La suppression de la contribution des densités

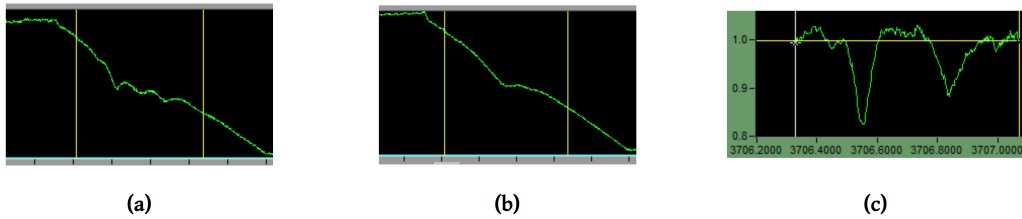


Figure 9: Calibrage de l'enveloppe du spectre d'absorption provenant de la tranche d'air extérieur à la flamme avec (a) le spectre d'absorption acquis à travers la flamme, (b) le spectre acquis sans flamme sensible aux densités atmosphériques et (c) le spectre d'absorption acquis à travers la flamme après suppression de la contribution de l'air extérieur.

gazeuses provenant de l'air ambiant permet à la mesure d'être sensible uniquement aux concentrations, pressions et températures dans la flamme. Cependant, la raie CO_2 de la flamme est peu apparente (Figure 9). Ainsi, pour la reconstruction tomographique expérimentale, il a été choisi de ne faire une reconstruction que sur le profil de H_2O . De même, en raison du bruit important présent sur les spectres, l'ajustement par rapport au paramètre pression n'a pas été pris en compte. Ce paramètre a été figé à la pression atmosphérique. La reconstruction tomographique expérimentale n'est donc effectuée que sur la concentration en H_2O et sur la température. Les résultats de reconstruction sont représentés sur la Figure 10. Un cercle de diamètre de 6 cm est représenté sur les images reconstruites pour représenter les contours du brûleur. Le profil et les niveaux de température typiques d'une flamme MacKenna sont

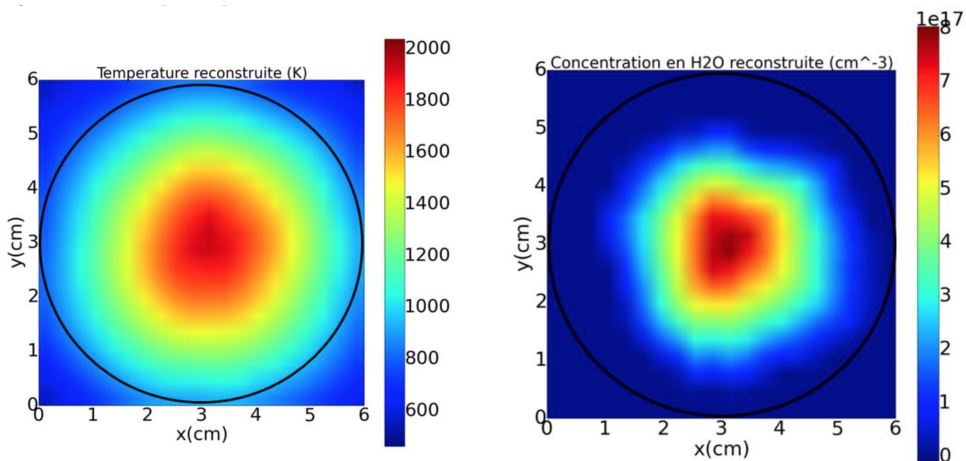


Figure 10: Résultats expérimentaux de reconstruction tomographique du brûleur MacKenna.

globalement respectés. En ce qui concerne la concentration en H_2O , le profil en deux dimensions est aussi approximativement respecté malgré une atténuation également trop forte entre le centre et le bord de la flamme et une géométrie non circulaire. Globalement, cet essai montre que l'algorithme est capable de reconstruire un profil en deux dimensions. Les écarts entre les résultats obtenus et ceux attendus viennent pour une grande part du bruit de mesures qui induit des erreurs sur les reconstructions de spectres comme il est possible de l'observer sur les exemples de la Figure 11. L'autre raison principale est le maillage spatiale insuffisant.

6 Conclusion

Cette étude a donc montré le fonctionnement de la méthode TDLAT en simulations et expérimentalement. Il reste cependant plusieurs axes d'améliorations sur la méthode. En effet, les reconstructions présentent toujours des écarts avec les profils attendus principalement à cause du faible nombre de faisceaux de mesures. Ainsi, la suite de l'étude va porter sur une optimisation du nombre, des positions et

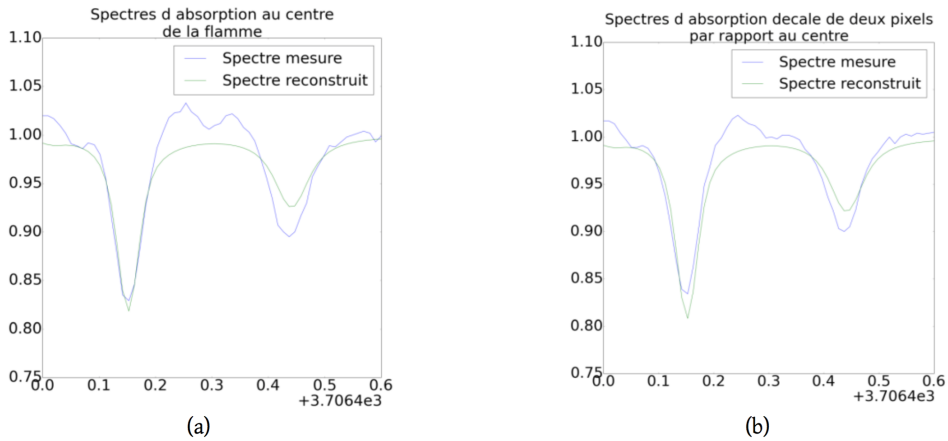


Figure 11: Exemples de spectres reconstruits (a) au centre de la flamme et (b) décalé de deux pixels du centre de la flamme.

des angles des faisceaux lasers pour appliquer la méthode aux bancs de combustions. De plus, le code pourra être amélioré par l'utilisation d'autres informations à priori comme l'application de contraintes spatiales telles que des masques sur les images à reconstruire pour éviter des écarts de reconstructions.

References

- [1] E. Bryner et al., "Tunable Diode Laser Absorption Technique Development for Determination of Spatially Resolved Water Concentration and Temperature," presented at the American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2010.
- [2] L. S. Rothman et al., "The HITRAN2012 molecular spectroscopic database," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 130, pp. 4–50, Nov. 2013.
- [3] A. K. Hui, B. H. Armstrong, and A. A. Wray, "Rapid computation of the Voigt and complex error functions," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 19, no. 5, pp. 509–516, 1978.
- [4] K. T. Ladas and A. J. Devaney, "Generalized ART algorithm for diffraction tomography," *Inverse Probl.*, vol. 7, no. 1, p. 109, 1991.
- [5] W. Cai and C. F. Kaminski, "Tomographic absorption spectroscopy for the study of gas dynamics and reactive flows," *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 59, pp. 1-31, Mar. 2017.
- [6] A. Guha and I. Schoegl, "Tomographic laser absorption spectroscopy using Tikhonov regularization," *Appl. Opt.*, vol. 53, no. 34, p. 8095, Dec. 2014.