



HAL
open science

Stratégie d'amélioration de la modélisation de l'interaction lumière-agrégats de suie

Jerôme Yon, José Morán, Clément Argentin, Romain Ceolato, Marek Mazur

► **To cite this version:**

Jerôme Yon, José Morán, Clément Argentin, Romain Ceolato, Marek Mazur. Stratégie d'amélioration de la modélisation de l'interaction lumière-agrégats de suie. GDR Suie, Oct 2023, Besançon, France. hal-04258948

HAL Id: hal-04258948

<https://normandie-univ.hal.science/hal-04258948>

Submitted on 25 Oct 2023

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.

Stratégie d'amélioration de la modélisation de l'interaction lumière-agrégats de suie

J. Yon¹, J. Moran¹, C. Argentin¹, R. Ceolato², M. Mazur¹

¹Normandie Univ, UNIROUEN, INSA Rouen, CNRS, CORIA, Rouen, 760 0 0, France

²ONERA, The French Aerospace Lab, Toulouse University, 31055 Toulouse, France

La métrologie des aérosols ainsi que la modélisation de leurs propriétés radiatives reposent sur notre capacité à modéliser l'interaction lumière-particules (détermination de leurs sections efficaces d'absorption et de diffusion). La théorie de Mie joue parfaitement ce rôle pour des particules sphériques mais n'est pas adaptée aux particules de type agrégats fractals comme les particules de suie. La théorie Rayleigh-Debye-Gans for Fractal Aggregates a été développée pour tenir compte de la morphologie spécifique des agrégats de suie en considérant leur « petite » dimension relativement à la lumière visible. Mais cette théorie repose sur certaines hypothèses simplificatrices (notamment l'absence de couplage optique interne entre les sphérules primaires) conduisant à des erreurs parfois importantes qu'il convient de réduire. Pour améliorer cette théorie RDG-FA et proposer des termes correctifs, il est nécessaire de mieux comprendre comment le couplage optique impacte l'évaluation des sections efficaces. Pour répondre à cet enjeu, le CORIA a développé une stratégie en trois étapes :

-Production d'agrégats virtuels à morphologie réaliste, prenant en compte le recouvrement des sphérules et l'évolution des conditions thermodynamiques au sein d'une flamme (couplage à la CFD)[1-5],

-Détermination du champ électrique au sein de ces particules en résolvant de façon rigoureuse les équations de Maxwell (usage de l'approche discrète dipolaire)[6],

-Interprétation du champ électrique local à l'aide de l'outil phasorial afin d'aboutir à des termes correctifs de la théorie RDG-FA[7-9].

Cette présentation illustrera ces différentes étapes et fera l'état d'avancement de ce projet et dressera les perspectives de ce travail ainsi que son impact potentiel, par exemple pour la métrologie LIDAR des aérosols carbonés [10].

Bibliographie

1. Morán, J., et al., *Multi-scale soot formation simulation providing detailed particle morphology in a laminar coflow diffusion flame*. Combustion and Flame, 2023. **256**: p. 112987.
2. Morán, J., A. Poux, and J. Yon, *Impact of the competition between aggregation and surface growth on the morphology of soot particles formed in an ethylene laminar premixed flame*. Journal of Aerosol Science, 2021. **152**: p. 105690.
3. Morán, J., et al., *Impact of the maturation process on soot particle aggregation kinetics and morphology*. Carbon, 2021. **182**: p. 837-846.
4. Morán, J., et al., *Monte Carlo Aggregation Code (MCAC) Part 2: Application to soot agglomeration, highlighting the importance of primary particles*. Journal of Colloid and Interface Science, 2020. **575**: p. 274-285.
5. Morán, J., J. Yon, and A. Poux, *Monte Carlo Aggregation Code (MCAC) Part 1: Fundamentals*. Journal of Colloid and Interface Science, 2020. **569**: p. 184-194.

6. Draine, B.T. and P.J. Flatau, *User Guide for the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT 7.1* (<http://arxiv.org/abs/1002.1505>). astro-ph.IM, 2010.
7. Argentin, C., et al., *Electromagnetic coupling and determination of the structure factor of fractal aggregates*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2023. **296**: p. 108451.
8. Argentin, C., et al., *A semi-empirical correction for the Rayleigh-Debye-Gans approximation for fractal aggregates based on phasor analysis: Application to soot particles*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2022: p. 108143.
9. Argentin, C., et al., *Assessing the limits of Rayleigh–Debye–Gans theory: Phasor analysis of a bisphere*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2021. **264**: p. 107550.
10. Ceolato, R., et al., *Black carbon aerosol number and mass concentration measurements by picosecond short-range elastic backscatter lidar*. Scientific Reports, 2022. **12**(1): p. 8443.