

N° d'ordre : 2098

THESE

présentée

pour l'obtention du diplôme de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Spécialité : ENERGETIQUE et TRANSFERTS

par

JOSEPH David

**MODELISATION DES TRANSFERTS RADIATIFS EN COMBUSTION PAR
METHODE AUX ORDONNEES DISCRETES SUR DES MAILLAGES
NON STRUCTURES TRIDIMENSIONNELS**

Soutenue le 15 Avril 2004 à 10^h00 devant le Jury composé de :

M GILLES FLAMANT	IMP, Odeillo	Rapporteur
M JEAN-PIERRE VANTELON	LCD, ENSMA Futuroscope	Rapporteur
M FENGSHAN LIU	ICPET, CNRC, Ottawa	Examinateur
M GEORGES CHARNAY	INP Toulouse	Examinateur
MME BÉNÉDICTE CUENOT	CERFACS	Examinateur
MME MOUNA EL HAFI	Ecole des Mines	Examinateur
M FRANÇOIS LEGLAYE	SNECMA	Invité

Remerciements

C'est l'heure des remerciements et c'est avec beaucoup de regrets que je dois mener à bien cette dernière tâche qui met un terme à cette belle épopée qu'a été ma thèse.

Je tiens d'abord à remercier Monsieur Didier LECOMTE pour m'avoir accueilli au sein du centre Energétique et Environnement de l'Ecole des Mines d'Albi-Carmaux et d'avoir toujours fait ce qu'il fallait pour que je m'y sente bien encadré. Je remercie aussi Monsieur Thierry POINSOT pour m'avoir permis de partager des moments agréables au sein de l'équipe CFD du CERFACS à Toulouse.

Je remercie particulièrement Messieurs Gilles FLAMANT et Jean-Pierre VANTELON de m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de cette thèse et Mr CHARNAY d'avoir accepté de présider ma soutenance.

Je tiens aussi à exprimer ma gratitude à Monsieur Fenshang LIU pour avoir accepté de faire le voyage depuis Ottawa afin d'être examinateur de ma thèse et m'avoir aussi fait profiter de son expérience sur le sujet lors de nos différentes discussions. J'ai aussi été ravi que Monsieur François LEGLAYE, de SNECMA Moteurs, aie accepté d'assister à ma soutenance en tant que membre invité.

J'adresse des remerciements spéciaux à Mesdames Bénédicte CUENOT et Mouna EL HAFI. Elles m'ont fait confiance et guidé tout au long de ces trois années en faisant preuve d'une grande patience et de beaucoup de compréhension en alternant souplesse et fermeté lorsque cela était nécessaire. « Qui aime bien châtie bien » et elles m'ont adroitement amené à me remettre en question afin de progresser.

Je remercie aussi Monsieur Richard FOURNIER qui m'a toujours encouragé et soutenu depuis mon stage de DEA et au côté de qui j'ai énormément appris, autant sur le plan scientifique que sur le plan humain. Je remercie également Monsieur Stéphane BLANCO pour ces excellents conseils. C'est vraiment grâce à lui que j'ai envisagé un court instant la possibilité de sacrifier trois années de ma vie à faire une thèse et cela a été suffisant pour que je mette le pied à l'étrier. Finalement, le jeu en valais la chandelle. Je dois aussi faire part du grand plaisir que j'ai eu à travailler avec Monsieur Pedro COELHO pendant trois mois à Lisbonne. Cela a été une expérience formidable (petit regret pour mon véhicule que j'y ai perdu mais on s'en remet !).

Et puis, il y a de profonds remerciements à ceux qui m'ont accompagné dans l'épreuve radiative du début à la fin : Patrice (PSG ! PSG !), Max (TFC ! TFC !), Cyril le futur Tiger Wood, Vincent Hi-Tech et Amaury le Patriarche (dixit Patrice, là je me mouille pas !). Je pense que quoiqu'il arrive dans ma vie je ne l'oublierai pas ce séjour à ROUFFIAC. Par cet allusion aux séjours inoubliables, il y aura aussi d'énormes remerciements à ce turc qui se dit taciturne mais est en fait tellement généreux et avec qui j'ai pu passer de merveilleux moments hilarants : Yilmaz !! Je lui en ai un peu voulu de m'avoir fait parcourir à pied toute la ville de Bruxelles, mais cela fait parti des moments que l'on apprécie avec le temps ... et que l'on regrette déjà !

Je tiens à adresser de grands remerciements à Léa et Bertrand « Monsieur Matlab » d'une part et à Ghislain et Laurent d'autre part, pour m'avoir accueilli dans leurs bureaux au CERFACS lors de mes différents séjours. En passant je remercie aussi Karine et Séb pour leur gentillesse, leur disponibilité et surtout leur patience à mon égard.

Parce qu'ils ont tous été géniaux et sont inoubliables, je remercie dans le désordre toutes les personnes que j'ai pu cotoyer à l'Ecole des Mines d'Albi : Sofia, Carlos, Mohamed, Norredine, Mariem, Souhila, Petra, Anna, Jaroslav,

Jean-Christophe, Marie-Elise, Nicolas, Driss, Gilles, Cedric, Matthieu, Jean-Michou, Céline, Blandine, Sandrine, Laetitia, Fabrice, Philou, Pierre, James, Elian, le Père Péré et le Père Feyrasse, Jean-Louis, Tahar, Sylvain, Ange, les Bruno, les Didier, JJB, Patricia, Maria, Brian, Radu, Monsieur Falempe, Yannick, Ludivine, Jean-Claude, Bernard, Denis. Il y a ceux qui ne sont pas resté longtemps mais qui ont été aussi marquants : Daniela, Tegan (j'espère que je ne hante plus tes cauchemards !), Youssef, Felipa, Nadjet, Benu, Karim et bien d'autres. Je n'oublie pas les perles qu'ont été et sont Sandrine, Valérie et Elizabeth, Isabelle et Marie, Christine, Cathy et Annie et Sergeeeuh ! Je m'excuse auprès de ceux que j'aurais oublié. Qu'ils sachent qu'ils y ont droit eux aussi.

Merci à tous.

A ma famille

Je ne remercierai jamais assez ma mère et mon père pour tous les sacrifices qu'ils ont fait pour moi, pour l'amour qu'ils m'ont donné. Ma mère m'a appris à être perspicace et à me dépasser. Mon père m'a montré les chemins de la sérénité et du pardon. C'est ainsi grâce à eux que j'ai pu atteindre mon but. J'espère pouvoir le leur rendre un jour. Je remercie aussi ma soeur Catherine, qui a toujours veillé sur moi. Merci à ma soeur Sarah qui a vraiment révolutionné notre famille (surtout nos parents). Je remercie ma famille entière, cousins et cousines, oncles et tantes et plus particulièrement Arlette, Franck et Nadine qui ont été des exemples pour moi.

Je remercie du fond du cœur celle qui me supporte depuis plus de huit ans et qui est toujours là pour me remonter le moral et me pousser à aller de l'avant, celle que j'aime et avec qui j'espère passer le reste d'une existence paisible et heureuse : Garlonne, la femme de ma vie.

Cette thèse a débuté pour moi en Décembre 2000 et j'ai appris en même temps que j'allais être papa. Diane occupe donc une place très importante dans cette tâche accomplie. De nombreux choix, de nombreuses difficultés et de nombreuses joies n'auraient pas eu lieu d'être durant ma thèse si elle n'était venue au monde à ce moment là.

*A Diane,
ma fille chérie que j'aime et que j'adore,
en lui souhaitant tout le bonheur du monde.*

Résumé :

MODÉLISATION DES TRANSFERTS RADIATIFS DANS LES SYSTÈMES EN COMBUSTION PAR MÉTHODE AUX ORDONNÉES DISCRÈTES SUR DES MAILLAGES NON STRUCTURÉS TRIDIMENSIONNELS

Mots clés : Transferts radiatifs, combustion, maillage non structuré, méthode aux ordonnées discrètes, modèle de rayonnement des gaz

La prédiction des concentrations d'espèces polluantes, telles que les suies et oxydes d'azote, émises par les systèmes de combustion et l'évaluation de la durée de vie des parois de ce type d'installation nécessitent une bonne prise en compte des transferts radiatifs dans les modèles de combustion. Dans cette optique, nous avons développé un code de calculs des transferts radiatifs basé sur la Méthode aux Ordonnées Discrètes et utilisant des maillages non structurés de la dynamique des fluides. Le rayonnement des gaz de la combustion est pris en compte par un modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés. Divers types de quadratures angulaires et trois schémas de dérivation spatiale différents ont été intégrés et comparés. Des tests de validation ont permis de montrer les limites à fortes épaisseurs optiques de l'approximation de type volumes finis sur laquelle s'appuie la méthode aux ordonnées discrètes. Les premiers calculs effectués sur des solutions obtenues par LES permettent de déterminer les termes sources radiatifs et les flux incidents aux parois instantanés, ce qui permet d'envisager le couplage avec la combustion.

Abstract :

RADIATIVE TRANSFER MODELLING IN COMBUSTING SYSTEMS USING DISCRETE ORDINATES METHOD ON THREE-DIMENSIONAL UNSTRUCTURED GRIDS

Keywords : Radiative transfer, combustion, unstructured grids, Discrete Ordinates Method, Spectral Line Gaseous Radiation Model

The prediction of pollutant species such as soots and NO_x emissions and lifetime of the walls in a combustion chamber is strongly dependant on heat transfer by radiation at high temperatures. This work deals with the development of a code based on the Discrete Ordinates Method (DOM) aiming at providing radiative source terms and wall fluxes with a good compromise between cpu time and accuracy. Radiative heat transfers are calculated using the unstructured grids defined by the Computational Fluid Dynamics (CFD) codes. The spectral properties of the combustion gases are taken into account by a statistical narrow bands correlated- k model (SNB- ck). Various types of angular quadrature are tested and three different spatial differencing schemes were integrated and compared. The validation tests show the limit at strong optical thicknesses of the finite volume approximation used the Discrete Ordinates Method. The first calculations performed on LES solutions are presented, it provides instantaneous radiative source terms and wall heat fluxes. Those results represent a first step towards radiation/combustion coupling.

Table des matières

1	Contexte scientifique	17
1.1	Enjeux industriels	17
1.2	Objectifs de l'étude	18
1.3	Démarche	19
2	Éléments de rayonnement en combustion	21
2.1	Équations de conservation	22
2.1.1	Grandeurs de la Thermochimie	22
2.1.2	Notions de Cinétique Chimique Complexe	23
2.1.3	Équations de l'aérothermochimie	25
2.1.4	Modèle de Combustion turbulente	27
2.2	Introduction aux Transferts Radiatifs	28
2.2.1	Quelques Définitions et Concepts en Rayonnement	29
2.2.2	Équation de Transfert Radiatif (ETR)	33
2.2.3	Méthodes de Résolution	41
2.2.4	Modèles de Rayonnement des Gaz	51
2.3	Modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés (SNB- ck)	56
2.3.1	Méthode des k -distributions	57
2.3.2	Modèle SNB de Malkmus et Distribution Inverse Gaussienne	61
2.3.3	Banque de Données SNB	63

2.3.4 Hypothèse des k-corrélos (ck)	65
3 Étude paramétrique de la flamme laminaire de diffusion	69
3.1 La flamme de diffusion laminaire monodimensionnelle	70
3.1.1 État de l'art	70
3.1.2 Formulation monodimensionnelle	74
3.1.3 La Richesse	77
3.1.4 Le Taux d'éirement	78
3.1.5 Indices d'émission	81
3.2 Modèles de couplage Combustion/Rayonnement	82
3.2.1 Couplage avec le Modèle OTL	83
3.2.2 Couplage avec la méthode Monte Carlo : l'approche TLM	83
3.3 Étude paramétrique	86
3.3.1 Détermination des paramètres influents	86
3.3.2 Influence du modèle radiatif	89
3.3.3 Discussion	96
4 Développement d'un code radiatif adapté aux géométries complexes	101
4.1 Introduction	101
4.2 La Méthode aux Ordonnées discrètes (DOM)	102
4.3 Principe	103
4.4 Discrétisation angulaire	104
4.4.1 Quadrature S_N	106
4.4.2 Quadrature T_N	108
4.4.3 Quadrature polaire/azimutale	110
4.5 Discrétisation spatiale	111
4.5.1 DOM pour maillage structuré	112

4.5.2	DOM pour maillage non-structuré	116
4.6	Discrétisation spectrale : Modèle SNB- <i>ck</i>	124
4.7	Parallélisation du code DOMASIUM	126
4.8	Validation : Résultats et discussion	127
4.8.1	Etude de la dépendance angulaire	127
4.8.2	Etude des schémas de dérivation spatiale	132
4.8.3	Conclusion	148
5	Application à des configurations réelles en combustion turbulente	151
5.1	Étude des performances du code en configuration réelle	151
5.1.1	Application à une chambre de combustion expérimentale	152
5.1.2	Analyse du problème radiatif	154
5.1.3	Influence des paramètres de calculs de DOMASIUM	167
5.2	Combustion turbulente et rayonnement	168
5.2.1	Application à une chambre de combustion industrielle	173
5.2.2	Influence de la turbulence sur le rayonnement thermique	173
5.3	Conclusions	178
6	Conclusions et Perspectives	185
Annexes		189
A	The condition of negative Intensity obtained with the Mean Flux Scheme	191
B	Finite Volume Approximation in optically thick limits	195
C	Influence de la diffusion numérique sur le « ray effect »	203
Bibliographie		215

Nomenclature

Majuscules

- A Aire d'une face de cellule [m^2] , page 113
- A_Δ Aire de la projection orthogonale d'une cellule selon une direction discrète [m^2] , page 122
- C_k Concentration molaire de l'espèce k [mol.m^{-3}], page 23
- C_p Chaleur massique de mélange [$J.\text{kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$], page 23
- D_{ij} Produit scalaire entre un vecteur unitaire direction et la normale à une surface , page 117
- E Erreur relative [%] , page 140
- F Profil de raie normalisé , page 53
- G Rayonnement incident [$W.m^{-2}$] , page 40
- G_t Gradient de vitesse tangentiel [s^{-1}] , page 75
- H_w ou $H(\vec{r}_w)$ Luminance incidente à la paroi ou Eclairage surfacique [$W.m^{-2}$] , page 40
- \mathbf{q}_r Vecteur flux radiatif [$W.m^{-2}$] , page 26
- S_r Terme source radiatif [$W.m^{-3}$] , page 27
- J_t Gradient de pression tangentiel [Pa.m^{-1}] , page 75
- K_E Constante d'équilibre réactionnel , page 24
- K_f Taux de réaction direct , page 24
- K_r Taux de réaction inverse , page 24
- $L(\vec{r}, \vec{s})$ Luminance au point $P(\vec{r})$ et dans la direction \vec{s} [$W.m^{-3}.sr^{-1}$] , page 30
- N_{band} Nombre de bandes étroites , page 125
- N_{quad} Nombre de point de quadrature par bande étroite, page 125

P	Pression thermodynamique totale [Pa] , page 23
Q_i	Taux d'avancement de la réaction i , page 24
R	Constante des gaz parfaits ($8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$) , page 23
S	Surface [m^2] , page 29
$S(\vec{r}, \vec{s})$	Gain en luminance au point \vec{r} dans la direction \vec{s} [$W.m^{-3}.sr^{-1}$] , page 34
S^{raie}	Intensité de raie intégré , page 54
$\bar{T}_{\Delta\nu}$	Transmittance moyenne sur une bande étroite, page 54
$T(l)$	Transmittance d'une épaisseur l de gaz , page 35
T	Température [K] , page 23
V	Volume [m^3] , page 29
W	masse molaire totale du mélange [kg.mol^{-1}] , page 22
W_k	masse molaire de l'espèce k [kg.mol^{-1}] , page 22
$\xi_{ij,\nu}^{VV}, \xi_{ij,\nu}^{VS}$ et $\xi_{ij,\nu}^{SS}$	Facteurs d'échanges de Hottel , page 37
X_k	Fraction molaire de l'espèce k , page 23
Y_k	Fraction massique de l'espèce k , page 22

Minuscules

c	Célérité de la lumière [$m.s^{-1}$] , page 31
c_{pk}	Chaleur massique d'une espèce k [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$], page 23
f	Fonction transmittance inverse, page 59
f_v	Fraction volumique de suie , page 147
g	Fonction cumulative de la transmittance inverse , page 60
g_n	Point de quadrature spectrale , page 61
h	Constante de Planck ($6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$), page 31
h	Enthalpie massique de mélange [J.kg^{-1}] , page 23
h_k	Enthalpie massique de l'espèce k [J.kg^{-1}] , page 23
k_b	Constante de Boltzmann ($1.3805 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$) , page 31

l	Distance entre deux positions [m] , page 36
\dot{m}	Débit massique [$\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$] , page 81
m_k	Masse de l'espèce k [kg], page 22
p_k	Pression partielle de l'espèce k , page 23
q_w ou $q(\vec{r}_w)$	Flux net radiatif à la paroi [$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$] , page 40
\vec{r}	Vecteur position [m], page 29
\vec{n}	Normale à une surface , page 29
\vec{s}	Vecteur unitaire de la direction de propagation de la luminance , page 29
s	Fraction massique stœchiométrique , page 77
t	Temps [s] , page 25
u	Composante radiale de la vitesse [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$] , page 74
$v_{d,k}$	vitesse de diffusion de l'espèce k [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$], page 26
\mathbf{v}	vecteur vitesse [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$] , page 25
v	Composante axiale de la vitesse [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$], page 74
w_n	Poids de quadrature spectrale , page 61

Indices et Exposants

b	corps noir , page 30
$\Delta\nu$	Intervalle fréquentiel , page 54
F	Coté Fuel , page 76
in	Entrée d'une cellule selon une direction discrète , page 122
ν	monochromatique , page 30
O	Coté Oxydant , page 76
out	Sortie d'une cellule selon une direction discrète , page 122
P	Centre d'une cellule de maillage , page 112
w	Paroi , page 39

Lettres grecques

α	Coefficient de pondération en maillage non structuré , page 122
β	Coefficient d'extinction [m^{-1}] , page 34
χ	Coefficient spécifique du schéma exponentiel , page 118
$\Delta H_{i,k}^0$	Enthalpie molaire de formation [$J.mole^{-1}$] , page 24
$\Delta S_{i,k}^0$	Entropie molaire de formation [$J.mole^{-1}.K^{-1}$] , page 24
$\Delta\nu$	Intervalle fréquentiel de bande étroite ou large [m^{-1}], page 54
$\bar{\delta}$	Ecartement moyen entre raies[m^{-1}] , page 55
ϵ_w ou $\epsilon(\vec{r}_w)$	Emissivité de paroi , page 39
γ	Coefficient de pondération en maillage structuré , page 114
$\bar{\gamma}$	Demi-largeur moyenne des raies [m^{-1}] , page 55
κ	Coefficients d'absorption (m^{-1}), page 32
$\bar{\kappa}_{\Delta\nu}$	Coefficient d'absorption moyen sur une bande étroite [m^{-1}] , page 55
Λ	Taux d'étirement [s^{-1}] , page 78
λ	Conductivité thermique [$W.m^{-1}.K^{-1}$] , page 26
μ_i, η_i, ξ_i	Ordonnées discrètes de la i^{me} direction discrète , page 104
ν	nombre d'onde [m^{-1}] , page 30
ν'_k, ν''_k	Coefficients stoechiométriques molaires, page 24
$\dot{\omega}_k$	Taux de production massique de l'espèce k [$mol.m^{-3}.s^{-1}$] , page 25
$\dot{\omega}_T$	Production de chaleur [$W.m^{-3}$] , page 25
Ω	Angle solide [m^{-1}] , page 29
ω	Albedo de diffusion , page 34
ω_i	Poids de quadrature angulaire de la i^{me} direction discrète , page 104
$\dot{\omega}'_T$	Terme source de production chimique totale [$W.m^{-3}$] , page 26
Φ	Paramètre de forme de Malkmus , page 62
Φ	Richesse de la flamme de diffusion , page 77
ϕ	Puissance d'énergie radiative [W] , page 29

$\Phi(\vec{s}', \vec{s})$	Fonction de phase , page 33
Φ_g	Richesse globale de la flamme de diffusion , page 78
φ	Puissance nette échangée [W] , page 36
ρ	masse volumique totale [kg.m^{-3}] , page 22
ρ_k	masse volumique de l'espèce k [kg.m^{-3}] , page 22
ρ_w ou $\rho(\vec{r}_w)$	Réflectivité de paroi , page 39
σ_{ij}	Tenseur des contraintes [Pa] , page 25
σ_b	Constante de Stefan-Boltzmann ($5.667 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^4$) , page 30
$\sigma_{d,\nu}$	Coefficients de diffusion monochromatique [m^{-1}] , page 33
τ	Epaisseur optique , page 34

Abréviations

ck	Hypothèse des k-corrélés , page 65
DMFS	Schéma Diamant en Flux Moyens , page 122
DNS	Direct Numerical Simulation , page 28
DOM	Méthode aux ordonnées discrètes , page 42
DTRM	Méthode des transferts radiatifs discrets , page 49
EICO	Indice d'émission du monoxyde de carbone , page 81
EICO ₂	Indice d'émission du dioxyde de carbone , page 82
EIH ₂ O	Indice d'émission de l'eau , page 82
EINOx	Indice d'émission des NO_x , page 81
ETL	Equilibre thermodynamique local , page 29
ETR	Equation de transfert radiatif , page 33
FVM	Méthode des volumes finis , page 42
LBL	Modèle « raie-par-raie » , page 53
LES	Large Eddy Simulation , page 27
MCM	Méthode Monte Carlo , page 47

- OTL Approximation du milieu optiquement fin , page 37
- P_N Méthode aux harmoniques sphériques de degré N , page 42
- PNE Puissance nette échangée , page 35
- RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes , page 27
- REM² Méthode de rayonnement des éléments par modèle d'émission de rayons , page 50
- SNB Modèle statistique à bandes étroites de Malkmus , page 61
- SNB- ck Modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés , page 56
- TLM Modèle de couplage Taylor-Like , page 74
- WSGG Modèle Somme pondérée de gaz gris, page 56

Chapitre 1

Contexte scientifique

1.1 Enjeux industriels

Un des problèmes majeurs que doit affronter actuellement la population mondiale est celui de la pollution de l'air engendrée principalement dans les pays industrialisés. Cette pollution a un impact local, sur la santé de la population dans les zones urbaines, mais aussi global, sur la chimie de l'atmosphère pouvant aller jusqu'à des modifications climatiques. Une grande partie de l'énergie domestique et industrielle responsable de cette pollution est produite par des systèmes de combustion qui émettent des espèces polluantes extrêmement toxiques telles que le monoxyde de carbone, les oxydes d'azote (NO_x), les suies et les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP). Ces deux dernières en particulier, essentiellement produites par la combustion de combustibles fossiles, ont été reconnues comme mutagènes voire cancérogènes pour les êtres vivants. D'autre part, les NO_x sont des irritants pulmonaires et jouent un rôle important dans la formation des brouillards de pollution. Près de 67% des NO_x rejetés dans l'atmosphère sont d'origine anthropique, parmi lesquels 68% sont dûs seulement à l'activité automobile. Le coût global du retraitement des déchets, les investissements nécessaires pour la santé publique et l'incertitude sur l'impact climatique sont autant d'arguments justifiant pleinement le développement d'une industrie propre.

Des mesures ont déjà été prises pour réduire les rejets de polluants au niveau industriel et domestique, que ce soit au niveau européen avec la mise en vigueur de nouvelles normes depuis 2002, ou à l'échelle mondiale avec les accords de Kyoto signés en 2002. Ces préoccupations atteignent aussi directement l'opinion publique. Ainsi les systèmes moins polluants sont mieux perçus et font partie d'enjeux économiques importants. Dans le domaine de l'aviation civile, la réduction des émissions polluantes des avions est devenue une priorité, afin de satisfaire les normes européennes, mais aussi comme un sérieux argument de vente. De même les constructeurs automobiles

proposent des véhicules de plus en plus propres et économiques.

La conception de systèmes de combustion propres requiert des outils numériques de prédiction fi ne pour l'émission de polluants, prenant en compte tous les facteurs influents relatifs à la dynamique, la chimie et la thermodynamique. Ces outils sont de deux natures :

- *les outils d'analyse et de compréhension* permettent d'identifi er, d'analyser et de comprendre dans des configurations simples mais représentatives, les divers mécanismes physiques et chimiques impliqués dans la production d'espèces polluantes. C'est le cas par exemple du calcul de flammes monodimensionnelles, laminaires et stationnaires (donc simples d'un point de vue dynamique), pour lesquelles on est capable de prendre en compte la réelle complexité chimique et thermodynamique ainsi que le couplage direct avec les transferts radiatifs.
- *les outils de conception* permettent de calculer les systèmes à géométrie réelle complexe, sur la base de modélisations plus ou moins détaillées des processus physiques et de leur couplage. Ces outils sont destinés à une utilisation en production chez les industriels et doivent combiner rapidité et fi abilité. Ainsi depuis quelques années maintenant, les ingénieurs de l'industrie utilisent couramment des codes de calcul moyené stationnaire (RANS) pour la conception des chambres de combustion. Le défi actuel est de permettre à ces ingénieurs d'accéder à des techniques plus sophistiquées telles que le calcul instationnaire.

Dans tous ces problèmes, le rayonnement joue un rôle clé sur la formation des suies et des espèces mineures polluantes, ainsi que sur les contraintes thermiques imposées aux matériaux composant les parois. Il faut donc être capable de comprendre l'influence du rayonnement sur les flammes et les systèmes, et d'estimer son impact le plus précisément possible compte tenu de la complexité géométrique des chambres de combustion et des écoulements qui s'y développent.

1.2 Objectifs de l'étude

Le principal objectif de ce travail est de fournir un outil fi able pour le calcul des pertes par rayonnement au sein de systèmes en combustion ainsi que des flux radiatifs reçus aux parois. Pour cela il faut d'abord comprendre et évaluer le rayonnement comme mode de transfert thermique, avec une attention particulière pour le mécanisme de couplage combustion/rayonnement. Il faut ensuite être capable de modéliser les transferts radiatifs de façon fi able et ce, dans des configurations les plus proches possible de la réalité.

Pour mieux appréhender les géométries complexes qui sont celles des applications industrielles (turbines à gaz, réacteurs de fusée,...), les codes de Mécanique des Fluides actuels utilisent souvent des maillages non structurés. Envisager - même à long terme - un couplage rayonnement/combustion dans des géométries réelles implique que le rayonnement soit calculé sur le même maillage que le

calcul de la dynamique, c'est-à-dire un maillage non structuré.

Il paraît donc nécessaire de développer un outil de modélisation des transferts radiatifs adapté aux maillages non structurés et qui soit flexible, fiable et surtout suffisamment rapide pour pouvoir, à plus long terme, être couplé à moindre coût en temps de calcul avec le calcul de combustion turbulente.

1.3 Démarche

Nous visons dans ce travail deux domaines différents : le rayonnement et la combustion. Le Chapitre 2 fait une large introduction au rayonnement et précise les nombreuses notions nécessaires pour comprendre et justifier les choix qui ont été adoptés. Etant donné la complexité des interactions entre les différents mécanismes entrant en jeu dans le couplage combustion/rayonnement (turbulence, cinétique chimique, rayonnement), une première étape a été d'étudier une configuration simple de flamme monodimensionnelle. Afin de se libérer des problèmes d'interaction entre la turbulence et la cinétique chimique ou le rayonnement, nous avons choisi de mener notre étude sur une flamme laminaire permettant de comprendre une physique dont les mécanismes de base sont les mêmes qu'en combustion turbulente. Le chapitre 3 de cette thèse traite donc d'une flamme laminaire de diffusion *CH₄/Air* étirée dans un écoulement à jets opposés. Nous avons poursuivi les travaux de thèse d'A. De Lataillade (EMAC, 2001) en effectuant une étude paramétrique mettant en évidence les paramètres de contrôle des transferts radiatifs dans une flamme. Un modèle couplé de rayonnement précis basé sur une méthode Monte Carlo optimisée nous a permis d'étudier en particulier l'importance du phénomène de réabsorption dans le couplage rayonnement/combustion pour ce type de flamme.

Dans une deuxième étape, le calcul du rayonnement en géométrie complexe a été abordé. Pour des raisons de complexité et de coût en temps de calcul restant encore trop conséquent, le couplage direct tel que nous l'avons fait pour la flamme monodimensionnelle n'est pas envisageable aujourd'hui. De plus l'augmentation de la complexité du problème due au passage à des géométries tridimensionnelles doit être compensée et nous amène à considérer une cinétique chimique moins détaillée ainsi qu'une modélisation du rayonnement plus simple. Nous avons adopté ici la méthode aux ordonnées discrètes (DOM), connue pour sa flexibilité et sa rapidité. Le développement d'un code basé sur les DOM en maillage non structuré avec prise en compte des propriétés spectrales des gaz constitue une innovation dans le domaine. Toutefois, il existe une littérature abondante sur la méthode DOM proposant de nombreuses techniques pour accroître la précision des résultats et constituant une base de données intéressante pour faire des comparaisons de validation. Le développement d'un code DOM directement couplable avec un code de combustion

est abordé au chapitre 4. Dans ce chapitre, le domaine de validité du code (nommé DOMASIUM) a été exploré et le degré de fiabilité des solutions obtenues a été évalué par des comparaisons avec des solutions de référence, qu'elles soient analytiques ou issues de calculs offrant une grande précision (Méthode Monte Carlo et « Ray Tracing »). Nous présentons au Chapitre 5 les premiers résultats obtenus par le code de calcul DOMASIUM sur des configurations industrielles. Les calculs radiatifs ont été réalisés à posteriori sur des solutions de combustion turbulente obtenues au CERFACS¹ de Toulouse par simulation des grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) avec le code de calcul AVBP.

¹Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

Chapitre 2

Éléments de rayonnement en combustion

Le rayonnement thermique est un mode de transfert que l'on associe essentiellement aux milieux semi-transparents. En combustion, dès lors que l'on observe un milieu gazeux à haute température, ayant un fort pouvoir d'absorption d'un point de vue radiatif (c'est le cas des produits de la combustion d'hydrocarbures tels que H_2O , CO_2 et CO), il devient nécessaire de s'attacher à une bonne description des transferts radiatifs. Dans certaines configurations, ils peuvent devenir un mode de transfert énergétique non négligeable voir prépondérant. Dans ce chapitre nous aborderons ce problème du point de vue de la combustion en gardant pour objectif de souligner l'existence d'un phénomène de couplage combustion/rayonnement. Ce couplage se fait dans les deux sens. D'abord, il y a l'influence du rayonnement sur la solution des équations de l'aérothermochimie en tant que mode de transfert thermique. Mais à l'inverse, le champs de flux rayonné est lui même dépendant des champs de température, de pression et de concentration des espèces chimiques, par le biais, entre autres, du modèle spectral utilisé pour représenter le rayonnement des gaz.

En définitif, d'abord les notions thermodynamiques et chimiques nécessaires à l'écriture des équations de l'aérothermochimie, nous expliciterons le rôle des transferts radiatifs en combustion. On posera alors quelques généralités nécessaires à la compréhension des grandes lignes de la modélisation des transferts radiatifs. On en profitera pour faire une synthèse de ce qui s'est déjà fait dans le domaine de la modélisation des transferts radiatifs en citant quelques-unes de leurs applications en combustion. Enfin, pour mettre en évidence l'aspect spectral, certaines notions de rayonnement des gaz et les outils analytiques et numériques qui permettent de modéliser les propriétés spectroscopiques d'un gaz ou mélange de gaz à partir de ces caractéristiques thermodynamiques et chimiques seront introduites. Ceci fera l'objet de la dernière section de ce chapitre où nous aborderons le domaine des modèles de gaz par une description des modèles déjà développés qui permettent de prendre en compte la complexité du spectre d'absorption des gaz. Par

la suite, nous présenterons la méthode des k-distributions qui est à la base du modèle utilisé dans nos travaux : le modèle **statistique à bandes étroites en k-corrélés (SNB-ck)**. Ce modèle, obtenu en appliquant la méthode des k-distributions au modèle à bandes étroites de Malkmus, a été retenu pour la présente étude parce qu'il est considéré comme le modèle proposant actuellement le meilleur compromis entre efficacité et simplicité. Son utilisation fait appel à l'hypothèse des « k-corrélés » (*ck*), que l'on définira et dont on discutera du bien-fondé pour une utilisation dans le domaine de la combustion.

2.1 Équations de conservation

2.1.1 Grandeurs de la Thermochimie

La modélisation numérique d'un problème de combustion vise la résolution des équations de l'aérothermochimie [129]. On appelle « équations de l'aérothermochimie » le système composé des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie. Nous faisons ici un rappel sur les définitions et notions nécessaires à la compréhension des équations de l'aérothermochimie que nous formulons par la suite. Ces dernières seront d'abord établies sous leur forme la plus générale. Puis nous observerons les hypothèses les plus courantes permettant de récrire ces équations sous une forme simplifiée.

Les équations sont écrites pour un fluide hétérogène non isotherme compressible composé de K espèces chimiques. Si on considère un mélange de masse volumique moyenne ρ et de masse molaire moyenne W , constitué d'un nombre K d'espèces de masse molaire W_k , on notera ρ_k la masse de l'espèce k présente dans une unité de volume du mélange. On a ainsi :

$$\rho = \sum_{k=1}^K \rho_k \quad (2.1)$$

On peut alors définir pour chaque espèce du mélange, sa fraction massique Y_k , grandeur sans dimension, de la façon suivante :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k}{\rho} \quad \text{tels que} \quad \sum_{k=1}^K Y_k = 1 \quad (2.2)$$

La masse molaire d'un mélange est obtenue à partir des fractions molaires d'espèces qui le composent par :

$$W = \left(\sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \quad (2.3)$$

la loi des gaz parfaits peut alors s'écrire :

$$\rho = \frac{PW}{RT} = \frac{P}{RT \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k}} \quad (2.4)$$

où P et T représentent respectivement la pression et la température du mélange et $R = 8.314 \text{ J.mole}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits. Pour chaque espèce du mélange, on définit une autre grandeur adimensionnée, la fraction molaire X_k , telle que :

$$X_k = Y_k \frac{W}{W_k} \quad \text{tels que} \quad \sum_{k=1}^K X_k = 1 \quad (2.5)$$

Ainsi que sa concentration molaire C_k :

$$C_k = X_k \frac{P}{RT} \quad \text{tels que} \quad \sum_{k=1}^K C_k = \frac{P}{RT} \quad (2.6)$$

Une autre façon de présenter les proportions des espèces dans un mélange est de les exprimer en pressions partielles p_k :

$$p_k = \frac{\rho_k RT}{W_k} \quad \text{tels que} \quad P = \sum_{k=1}^K p_k \quad (2.7)$$

L'enthalpie du mélange est obtenue à partir des enthalpies de chaque espèce. On appelle $h_k(T)$, l'enthalpie massique d'une espèce k à une température T (supérieure à sa température de formation T^0), représentative de son énergie interne à l'équilibre thermodynamique :

$$h_k(T) = \underbrace{\Delta h_{f,k}^o(T^o)}_{\text{Enthalpie de formation}} + \underbrace{\int_{T_0}^T c_{pk} dT'}_{\text{Enthalpie sensible}} \quad (2.8)$$

où c_{pk} représente la chaleur massique de cette espèce à pression constante tabulée.

La chaleur massique du mélange C_p peut être obtenue par la loi de mélange :

$$C_p = \sum_{k=1}^K Y_k c_{pk} \quad (2.9)$$

De même, l'enthalpie massique h du mélange s'obtient par :

$$h = \sum_{k=1}^K Y_k h_k \quad (2.10)$$

2.1.2 Notions de Cinétique Chimique Complexé

En combustion, on considère des réactions chimiques fortement exothermiques. Chaque réaction chimique élémentaire est représentée par une équation bilan. Toute équation bilan d'une réaction élémentaire réversible i à K espèces, notées \mathcal{M}_k , peut être formulée de la façon suivante :

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{k,i} \mathcal{M}_{k,i} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^K \nu''_{k,i} \mathcal{M}_{k,i} \quad (2.11)$$

où $\nu'_{k,i}$ et $\nu''_{k,i}$ sont les coefficients stoechiométriques de l'espèce chimique \mathcal{M}_k dans la réaction. On définit le coefficient stoechiométrique $\nu_{k,i}$ représentant le nombre de moles de l'espèce k intervenant réellement dans le bilan de la réaction chimique considérée :

$$\nu_{k,i} = \nu''_{k,i} - \nu'_{k,i} \quad (2.12)$$

ce qui permet d'exprimer la loi de conservation de la masse de la façon suivante :

$$\sum_{k=1}^K \nu_{k,i} W_{k,i} = 0 \quad (2.13)$$

Chaque réaction est caractérisée par une grandeur physique $K_{f,i}$ appelée « taux de réaction direct » :

$$K_{f,i} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{T_{a,i}}{T}\right) \quad (2.14)$$

obtenue par la loi d'Arrhenius où A_i est le facteur pré-exponentiel, β_i l'exposant de la température et E_i l'énergie d'activation de la réaction directe (associée à $T_{a,i}$ la température d'activation par la relation : $E_i = RT_{a,i}$).

On définit aussi le « taux de réaction inverse » tel que :

$$K_{r,i} = K_{f,i} / K_{E_i} \quad (2.15)$$

où K_{E_i} est la constante d'équilibre, obtenue à partir de la loi thermodynamique suivante :

$$K_{E_i} = \left(\frac{P}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^N \nu'_{k,i}} \exp\left(\sum_{k=1}^N \nu'_{k,i} \left(\frac{\Delta S_{i,k}^0}{R} - \frac{\Delta H_{i,k}^0}{RT}\right)\right) \quad (2.16)$$

$\Delta S_{i,k}^0$ et $\Delta H_{i,k}^0$ sont respectivement les entropies et enthalpies molaires de formation à la pression atmosphérique de chaque espèce.

On appelle « taux d'avancement de la réaction », Q_i , la différence entre la vitesse de réaction directe et la vitesse de réaction inverse :

$$Q_i = K_{f,i} \prod_k C_k^{\nu'_{k,i}} - K_{r,i} \prod_k C_k^{\nu''_{k,i}} \quad (2.17)$$

On exprime alors $\dot{\omega}_k$ le « taux (ou vitesse) de production massique » de l'espèce k comme étant la masse de produit formée ou consommée par unité de volume et par unité de temps. Il est lié au taux d'avancement de la réaction par la relation suivante :

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_i \nu_{k,i} Q_i \quad (2.18)$$

L'évaluation des taux de production massique, pour chaque espèce k d'un mélange, implique une connaissance des A_i , β_i et E_i pour chaque réaction élémentaire constituant le schéma cinétique complexe. L'obtention de ces facteurs de façon expérimentale et l'évaluation de l'importance de la réaction élémentaire correspondante au sein d'un schéma font l'objet de travaux importants dans le domaine de la Cinétique Chimique.

La quantité d'énergie générée par la réaction chimique, appelée « production de chaleur » et notée $\dot{\omega}_T$ est calculée par :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{l=1}^K \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (2.19)$$

2.1.3 Équations de l'aérothermochimie

Les quelques éléments de thermodynamique et cinétique chimique, que nous avons exposés, permettent de modéliser l'aspect énergétique (énergie d'origine chimique) d'un milieu réactif en posant l'équation de conservation des espèces et l'équation de conservation de l'énergie. Ils interviennent aussi dans les équations permettant de résoudre l'aspect dynamique de l'écoulement via la masse volumique du mélange et l'influence des forces extérieures qui varient en fonction des espèces chimiques composant le mélange. Tout problème de modélisation en combustion se base sur les équations de l'aérothermochimie présentées ci-dessous sous leur forme générale (elles peuvent être simplifiées en fonction du type de problème traité, cf. §3) :

- **Équation de conservation de la masse**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.20)$$

où \mathbf{v} représente la vitesse d'écoulement du mélange.

- **Équation de conservation de la quantité de mouvement**

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla \cdot \sigma_{ij} + \sum_{k=1}^K \rho Y_k \mathbf{F}_k \quad (2.21)$$

où \mathbf{F}_k est le vecteur des forces extérieures et σ_{ij} le tenseur des contraintes tel que :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - P \delta_{ij} = \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) - \left(\frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v}\right) \mathbf{I} - P \mathbf{I} \quad (2.22)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité. Si l'on suppose qu'il n'y a pas de force extérieure (en négligeant aussi l'effet de la gravité), l'équation (2.21) devient :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla \cdot \sigma_{ij} \quad (2.23)$$

– **Équation de conservation des espèces**

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) Y_k = -\nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{v}_{d,k}) + \dot{\omega}_k \quad (2.24)$$

où $\mathbf{v}_{d,k}$ est la vitesse de diffusion de l'espèce k dans le mélange.

– **Équation de conservation de l'énergie**

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) h = \left[\frac{\partial P}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) P + \tau_{ij} : \nabla \mathbf{v} \right] + \sum_{k=1}^K \rho Y_k \mathbf{v}_{d,k} \mathbf{F}_k - \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{\omega}_T \quad (2.25)$$

avec

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^K \rho h_k Y_k \mathbf{v}_{d,k} + RT \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^K \frac{X_k \mathcal{D}_l^T}{W_k \mathcal{D}_{kl}} (\mathbf{v}_{d,k} - \mathbf{v}_{d,l}) + \mathbf{q}_r \quad (2.26)$$

avec \mathcal{D}_l^T et D_{kl} qui sont respectivement les coefficients de diffusion thermique de l'espèce k et le coefficient binaire des espèces k et l et $\mathbf{v}_{d,k}$ la vitesse de diffusion.

Le couplage entre la combustion et le rayonnement apparaît dans l'équation (2.25). Comme pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on peut négliger l'influence des forces extérieures ($\mathbf{F}_k = 0$). En utilisant :

$$dh = C_p dT \quad (2.27)$$

et en négligeant le troisième terme dans l'équation (2.26) (représentant l'effet Dufour), l'équation de l'énergie pour T s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p (\mathbf{v} \cdot \nabla) T = \left[\frac{\partial P}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) P + \tau_{ij} : \nabla \mathbf{v} \right] + \dot{\omega}'_T - \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (2.28)$$

où $\dot{\omega}'_T$ est le terme source de production chimique totale (prenant en compte les enthalpies sensibles des espèces composant le mélange) tel que :

$$\dot{\omega}'_T = - \sum_{l=1}^K h_k \dot{\omega}_k \quad (2.29)$$

et $\nabla \cdot \mathbf{q}$ est le terme puits représentant les pertes par conduction, diffusion des espèces et par rayonnement, soit :

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = -\nabla(\lambda \nabla T) + \nabla \left(\sum_{k=1}^K \rho h_k Y_k \mathbf{v}_{d,k} \right) + S_r \quad (2.30)$$

S_r est le terme source radiatif ou bilan volumique que l'on cherchera à modéliser, sachant que si l'on note \mathbf{q}_r le flux d'énergie rayonnée (ou flux radiatif) :

$$S_r = \nabla \cdot \mathbf{q}_r \quad (2.31)$$

Si l'on suppose que le fluide considéré se comporte comme un gaz parfait, l'équation d'état des gaz parfaits est vérifiée et peut être considérée comme une cinquième équation :

$$\frac{P}{\rho} = \frac{RT}{W} \quad (2.32)$$

L'influence des phénomènes radiatifs sur les champs de température, et par conséquent de concentrations, que modélise la combustion est explicitée par les équations (2.28) et (2.30). La modélisation de ce phénomène de transferts radiatifs, qui n'apparaît que sous la forme d'un terme source S_r dans l'équation (2.30), est complexe et coûteuse en temps de calcul. Nous verrons au chapitre § 2.2 quelques éléments de rayonnement permettant d'illustrer cet aspect rédhibitoire des choses lorsque l'on parle de modélisation du rayonnement dans le cas d'un milieu hétérogène et anisotherme contenu dans une enceinte géométriquement complexe.

2.1.4 Modèle de Combustion turbulente

La résolution des équations de conservation est relativement aisée lorsque l'on considère un écoulement laminaire (à faible nombre de Reynolds) ; nous montrons dans notre étude sur la flamme monodimensionnelle laminaire à jets opposés (cf §3.1.2) une façon de résoudre numériquement un problème de combustion considérant un écoulement laminaire. Cependant dans la plupart des systèmes de combustion du domaine industriel, le type de régime d'écoulement observé est turbulent et interagit avec la combustion. La combustion turbulente résulte de cette interaction entre deux phénomènes complexes ayant lieu à des échelles de temps très faibles. En CFD pour modéliser numériquement les phénomènes liés à la combustion turbulente, on peut distinguer, à l'heure actuelle, trois degrés de résolution des équations de l'aérothermochimie (cf. Fig.2.1). Le premier degré, le plus grossier, est celui du **RANS** (pour Reynolds Averaged Navier-Stokes). Ce modèle s'appuie sur une résolution des valeurs moyennes des grandeurs physiques de la combustion turbulente, en utilisant des modèles de fermetures pour les équations de conservation formulées en valeur moyenne. Seuls les champs moyens sont résolus. Les estimations des grandeurs physiques d'un problème obtenues correspondent à leur moyenne temporelle dans un écoulement stationnaire ou périodique (moyenne sur plusieurs cycles). Le deuxième degré de résolution correspond à des simulations numériques faites à l'échelle des plus grands tourbillons de l'écoulement turbulent : c'est la **LES** (pour Large Eddy Simulation). Les équations ne sont résolues numériquement que pour les grandes échelles de la turbulence repérées par une méthode

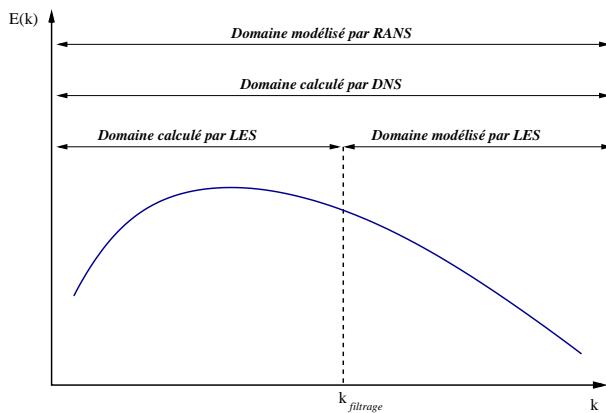


FIG. 2.1 – Domaines fréquentiels du spectre d'énergie turbulente calculés et/ou modélisés par méthode RANS, LES et DNS

de filtre, alors que les effets dûs aux plus petites échelles sont représentés à l'aide de modèles de fermeture adaptés. Les modèles de fermeture RANS ou LES peuvent être obtenus en étudiant les phénomènes à modéliser par simulation numérique directe (**DNS**, pour Direct Numerical Simulation). Dans ces simulations, les équations de l'aérothermochimie sont directement résolues à chaque instant, sans nécessiter de modèle approché pour la turbulence. Toutes les échelles et toutes les variations des grandeurs physiques de la combustion turbulente sont calculées. Ce type de simulation s'est beaucoup développé durant ces dernières années mais reste appliqué à des géométries de petites dimensions pour des configurations basiques car très lourd en temps de calcul. Le calcul DNS a permis de mieux comprendre les mécanismes de la combustion turbulente à petite échelle et de générer des modèles de fermeture adéquats pour le RANS et la LES.

2.2 Introduction aux Transferts Radiatifs

Avant de présenter les méthodes permettant de modéliser les transferts radiatifs, il convient de définir quelques bases et notations du rayonnement thermique qui permettront de le représenter tout au long de ce mémoire.

Le rayonnement thermique est un phénomène d'origine électromagnétique émis par les molécules du milieu lorsqu'elles sont le lieu de transitions de niveaux électroniques. L'énergie rayonnée lors de ces transitions se situe dans les zones du spectre électromagnétique correspondant aux domaines de l'ultra-violet, du visible et de l'infrarouge. Dans la plupart des applications en combustion, les transferts thermiques par rayonnement s'effectuent à des longueurs d'ondes appartenant au domaine du visible et de l'infrarouge ($0.1 \rightarrow 100\mu m$). Les configurations rencontrées peuvent le plus souvent être ramenées à l'image générique d'un volume de mélange de gaz confiné

dans une enceinte aux parois solides. Par soucis de clarté, nous formulerons les équations de cette section en monochromatique, c'est-à-dire à une seule fréquence ν donnée.

2.2.1 Quelques Définitions et Concepts en Rayonnement

2.2.1.1 Hypothèse de l'équilibre thermodynamique local et Principe de réciprocité

Ces deux concepts très importants sont une base nécessaire pour l'introduction des propriétés radiatives des milieux semi-transparents.

Par le **principe de réciprocité**, on exprime le fait qu'entre deux éléments $P(\vec{r}_i)$ et $P(\vec{r}_j)$ le chemin optique $\Gamma(P_i \rightarrow P_j)$, support de l'échange radiatif entre eux, peut être parcouru dans les deux sens.

L'hypothèse de l'**Équilibre thermodynamique local** (ETL) permet de considérer qu'en tout point $P(\vec{r})$ d'un milieu semi-transparent, autour duquel on observera un volume élémentaire dV , les propriétés thermodynamiques locales sont celles de ce même volume dV à l'équilibre, lorsqu'il est plongé dans un milieu qui possède les mêmes propriétés thermodynamiques. On admet donc en rayonnement que les propriétés radiatives en ce point $P(\vec{r})$ sont indépendantes de son environnement. Nous admettrons dans le cadre de notre étude, que l'ETL est toujours vérifiée.

Il en résulte que si l'on considère un volume élémentaire de milieu semi-transparent dV comme étant un corps noir à l'équilibre thermodynamique local, alors on admet qu'il émet son rayonnement dans les mêmes proportions qu'il l'absorbe.

2.2.1.2 Luminance

Pour intégrer l'énergie liée au rayonnement dans un bilan thermique, on introduit la notion de flux d'énergie rayonnée sous la forme d'une grandeur intensive que l'on appellera « luminance ». La luminance rayonnée en un point $P(\vec{r})$ de l'espace dans la direction \vec{s} et à la fréquence ν , notée $L_\nu(\vec{r}, \vec{s}, t)$, est la densité de flux d'énergie monochromatique $d\phi_\nu(\vec{r}, t)$ rayonnée à travers une surface dS orientée selon la normale \vec{n} dans un angle solide $d\Omega$ autour de cette direction \vec{s} (cf. Fig.2.2) pendant un intervalle de temps dt autour de cet instant t tel que :

$$L_\nu(\vec{r}, \vec{s}, t) = \frac{d^3\phi_\nu(\vec{r}, t)}{(\vec{s} \cdot \vec{n})d\Omega dt dS} \quad (2.33)$$

Comme toute forme de rayonnement électromagnétique, la vitesse de propagation du rayonnement thermique est la vitesse de la lumière c . Ceci en fait un mode de transport d'énergie thermique qui atteint l'équilibre thermodynamique local beaucoup plus vite que les autres modes que l'on peut rencontrer en combustion. On suppose donc un état stationnaire du rayonnement à l'échelle des temps considérés en combustion et on occulte la dépendance temporelle de la luminance en

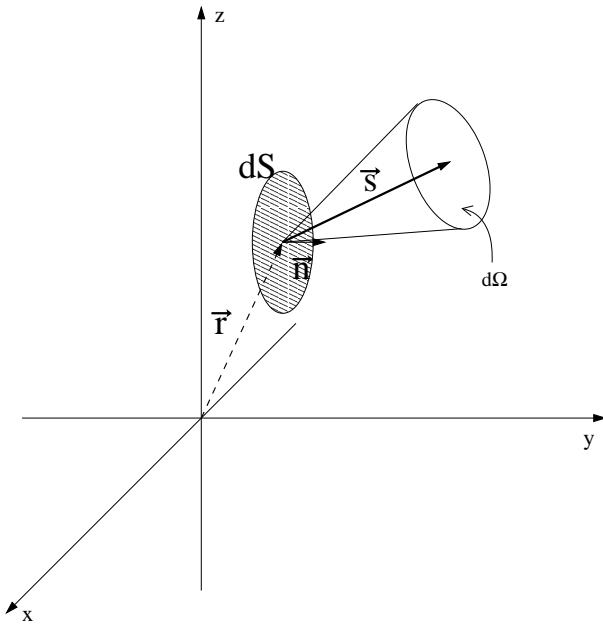


FIG. 2.2 – La luminance

l'écrivant simplement $L_\nu(\vec{r}, \vec{s})$.

2.2.1.3 Luminance du Corps noir

On appelle « corps noir » un corps qui absorbe la totalité du rayonnement qui lui arrive de toutes les directions de l'espace et à toutes les fréquences, et qui, en fonction de sa température $T(\vec{r})$, émet une puissance radiative totale $L_b(\vec{r})$ (par unité de surface), dans toutes les directions et de façon isotrope :

$$L_b(\vec{r}) = \frac{\sigma_b T^4}{\pi} \quad (2.34)$$

où $\sigma_b = 5.667 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2} \cdot \text{K}^4$ est la constante de Stefan-Boltzmann. On obtient cette quantité d'énergie radiative totale $L_b(\vec{r})$ en intégrant l'équation la luminance noire monochromatique sur l'espace des fréquences (ou nombres d'ondes) :

$$L_b(\vec{r}) = \int_0^\infty L_{b,\nu}(\vec{r}) d\nu \quad (2.35)$$

Cette quantité d'énergie radiative totale se répartit fréquentiellement selon la loi de Planck qui définit la luminance noire monochromatique obtenue à une fréquence correspondant au nombre d'onde $\nu (m^{-1})$ de la façon suivante :

$$L_{b,\nu}(\vec{r}) = 2 \frac{hc^2 \nu^3}{e^{\frac{hc\nu}{k_b T(\vec{r})}} - 1} \quad (2.36)$$

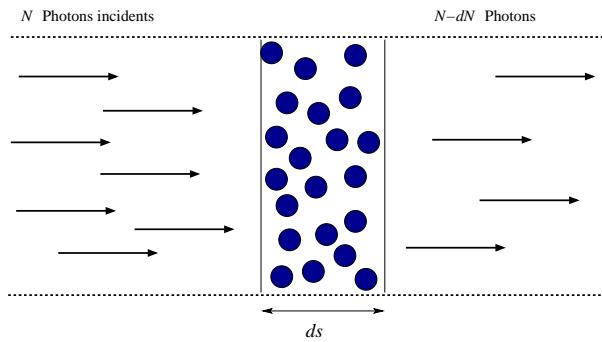


FIG. 2.3 – Absorption d'un flux de photons incidents

où $h = 6.62610^{-34} \text{ J.s}$ est la constante de Planck et $k_b = 1.380510^{-23} \text{ J.K}^{-1}$ la constante de Boltzmann.

Lorsque nous formulons les équations en monochromatique, c'est cette définition monochromatique de la luminance noire que nous observons.

2.2.1.4 Absorption et Émission

En rayonnement, un milieu semi-transparent est caractérisé par sa capacité à absorber une certaine quantité d'énergie $dL_{\nu,a}$ provenant d'une luminance $L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s})$ sur un trajet ds en établissant que :

$$dL_{\nu,a}(\vec{r}, \vec{s}) = -\kappa_{\nu,a} L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s}) ds \quad (2.37)$$

Puisque le terme $dL_{\nu,a}$ correspond à une diminution de la luminance incidente, il est retranscrit avec un signe "-". $\kappa_{\nu,a}$ est appelé le coefficient d'absorption du milieu à la longueur d'onde ν . D'un point de vue corpusculaire, on peut associer cette luminance $L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s})$ à un flux de N photons incidents à la fréquence ν traversant une épaisseur de molécules absorbantes ds et la variation de luminance $dL_{\nu,a}(\vec{r}, \vec{s})$ au nombre de photons absorbés dN sur l'intervalle ds (cf. Fig.2.3). Le coefficient d'absorption $\kappa_{\nu,a}$ représente alors :

$$\kappa_{\nu,a} = \frac{1}{ds} \frac{dN}{N} \quad (2.38)$$

L'origine moléculaire de ce coefficient d'absorption est exposée au §2.2.4.

Une même épaisseur ds de ce milieu aura la capacité d'émettre une certaine quantité d'énergie $dL_{\nu,e}$ (cf. Fig.2.4) telle que :

$$dL_{\nu,e}(\vec{r}, \vec{s}) = +\kappa_{\nu,e} L_{b,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) ds \quad (2.39)$$

Ce terme correspond à un gain pour la luminance à la traversée d'un élément d'épaisseur ds , d'où le signe "+". $\kappa_{\nu,e}$ est appelé le coefficient d'émission du milieu à la longueur d'onde ν .

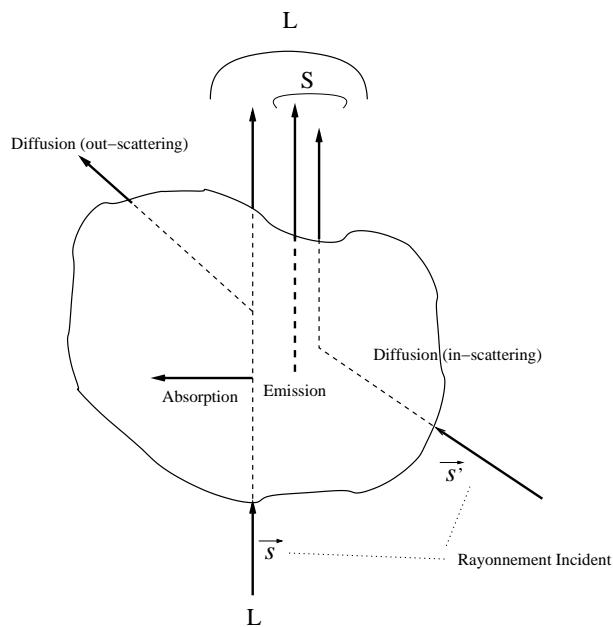


FIG. 2.4 – Différentes contributions du phénomène radiatif local

A l'ETL, tout milieu capable d'absorber est susceptible d'émettre dans les mêmes proportions. On considère donc que :

$$\kappa_{\nu,e} = \kappa_{\nu,a} = \kappa_{\nu} \quad (2.40)$$

Cette notation κ_{ν} est alors utilisée pour caractériser les deux phénomènes et est aussi appelé « coefficient d'absorption ».

2.2.1.5 Diffusion

Le troisième phénomène caractéristique du rayonnement thermique est le phénomène de diffusion des photons (représentant la luminance dans une approche corpusculaire). Elle se traduit par la déviation de la trajectoire de ceux-ci, à la suite de chocs, à la traversée d'une épaisseur ds d'un milieu semi-transparent « diffusant ». Ceci se traduit par une variation $dL_{\nu,d}(\vec{r}, \vec{s})$ de la luminance se propageant selon direction \vec{s} . On peut discerner deux types de variations liées au phénomène de diffusion : le gain de luminance par diffusion entrante ou « in-scattering » et la perte par diffusion sortante ou « out-scattering » (cf. Fig.2.4). On notera $dL_{\nu,out-scattering}$ la diffusion sortante représentant une perte de luminance proportionnelle à la luminance à l'entrée d'une épaisseur de milieu ds , sans aucun discernement pour les directions dans lesquelles le rayonnement est diffusé :

$$dL_{\nu,out-scattering}(\vec{r}, \vec{s}) = -\sigma_{d,\nu} L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s}) ds \quad (2.41)$$

$\sigma_{d,\nu}$ est appelé le coefficient de diffusion du milieu à la longueur d'onde ν .

On notera $dL_{\nu,in-scattering}$ la diffusion entrante représentant un gain de luminance, en intégrant les contributions de toutes les luminances provenant des directions \vec{s}' qui sont déviés dans la direction \vec{s} , soit :

$$dL_{\nu,in-scattering}(\vec{r}, \vec{s}) = +\sigma_{d,\nu} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{4\pi} \Phi(\vec{s}', \vec{s}, \nu', \nu) L_{\nu'}(\vec{s}') d\Omega' d\nu' \right] ds \quad (2.42)$$

où $d\Omega$ définit un élément d'angle solide d'où peut provenir la luminance obtenue par diffusion entrante et $\Phi(\vec{s}', \vec{s}, \nu', \nu)$ représente la fonction de phase de diffusion.

Cette fonction de phase de diffusion représente la densité de probabilité qu'un rayonnement provenant d'une direction \vec{s}' avec une longueur d'onde ν' soit dévié dans la direction \vec{s} à la fréquence ν . La plupart des chocs rencontrés en diffusion étant élastiques (la fréquence des photons ne varie pas au cours du choc), le terme $\Phi(\vec{s}', \vec{s}, \nu', \nu)$ devient simplement $\Phi_{\nu}(\vec{s}', \vec{s})$.

$$dL_{\nu,in-scattering}(\vec{r}, \vec{s}) = +\sigma_{d,\nu} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi_{\nu}(\vec{s}', \vec{s}) L_{\nu}(\vec{s}') d\Omega' \right] ds \quad (2.43)$$

La fonction de phase étant une densité de probabilité pour qu'un rayon provenant d'une direction \vec{s}' soit dévié dans la direction \vec{s} , elle obéit à la relation de normalisation suivante :

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi_{\nu}(\vec{s}', \vec{s}) d\Omega' = 1 \quad (2.44)$$

La variation globale de la luminance lié au phénomène de diffusion s'écrit :

$$dL_{\nu,d}(\vec{r}, \vec{s}) = dL_{\nu,in-scattering}(\vec{r}, \vec{s}) + dL_{\nu,out-scattering}(\vec{r}, \vec{s}) \quad (2.45)$$

2.2.2 Équation de Transfert Radiatif (ETR)

2.2.2.1 Formulation différentielle

Pour obtenir l'expression standard intégrodifférentielle de l'équation de transfert radiatif prenant en compte toute la complexité du problème physique (émission, absorption, diffusion et dépendance spectrale), on écrira d'abord la variation totale de la luminance traversant normalement un milieu semi transparent d'épaisseur ds autour de la position \vec{r} dans la direction \vec{s} (cf. Fig.2.4). Elle est obtenue en sommant les termes liés à chacun des 3 phénomènes rencontrés en rayonnement que nous avons définis :

$$dL_{\nu}(\vec{r}, \vec{s}) = dL_{\nu,a}(\vec{r}, \vec{s}) + dL_{\nu,e}(\vec{r}, \vec{s}) + dL_{\nu,d}(\vec{r}, \vec{s}) \quad (2.46)$$

En remplaçant ces termes par leur expression ((2.38), (2.39) et (2.45)) dans l'équation (2.46) et en divisant par ds , on obtient l'équation de transfert radiatif sous sa forme différentielle :

$$\frac{dL_{\nu}(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \left[\kappa_{\nu} L_{b,\nu}(\vec{r}) + \frac{\sigma_{d,\nu}}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi_{\nu}(\vec{s}', \vec{s}) L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega' \right] - \left[(\kappa_{\nu} + \sigma_{\nu}) L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s}) \right] \quad (2.47)$$

On introduit la notation du coefficient d'extinction β_ν représentant l'atténuation du rayonnement par diffusion sortante et par absorption tel que :

$$\beta_\nu = \kappa_\nu + \sigma_{d,\nu} \quad (2.48)$$

et celle de l'albédo de diffusion ω_ν , obtenu de la façon suivante :

$$\omega_\nu = \frac{\sigma_{d,\nu}}{\kappa_\nu + \sigma_{d,\nu}} \quad (2.49)$$

Ceci nous permet d'écrire plus simplement selon la direction \vec{s} :

$$\frac{dL_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \beta_\nu(1 - \omega_\nu)L_{b,\nu}(\vec{r}) + \beta_\nu \frac{\omega_\nu}{4\pi} \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}') \Phi_\nu(\vec{s}', \vec{s}) d\Omega' - \beta_\nu L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) \quad (2.50)$$

soit :

$$\frac{dL_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \beta_\nu(S_\nu(\vec{r}, \vec{s}) - L_\nu(\vec{r}, \vec{s})) \quad (2.51)$$

avec

$$S_\nu(\vec{r}, \vec{s}) = (1 - \omega_\nu)L_{b,\nu}(\vec{r}) + \omega_\nu \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}') \Phi_\nu(\vec{s}', \vec{s}) d\Omega' \quad (2.52)$$

2.2.2.2 Formulation intégrale

A partir de $L_\nu(\vec{r}_0, \vec{s})$ la luminance en \vec{r}_0 , la solution $L_\nu(\vec{r}, \vec{s})$ de l'équation différentielle (2.51) peut être intégrée sur le chemin optique entre les positions \vec{r}_0 et \vec{r} et s'écrit :

$$L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) = L_\nu(\vec{r}_0, \vec{s}) T_\nu(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} S_\nu(\vec{r}, \vec{s}) \frac{\partial T_\nu(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})}{\partial \vec{r}'} d\vec{r}' \quad (2.53)$$

où $T_\nu(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})$ représente la transmittance d'une épaisseur de milieu semi-transparent comprise entre deux points de l'espace, $P(\vec{r}')$ et $P(\vec{r})$, obtenue en posant :

$$T_\nu(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}) = \exp(-\tau_\nu(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})) \quad (2.54)$$

où $\tau_\nu(\vec{r}' \rightarrow \vec{r})$ est l'épaisseur optique, grandeur sans dimension obtenue par l'intégration suivante :

$$\tau_\nu(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}) = \int_{\vec{r}'}^{\vec{r}} \beta_\nu(x) dx \quad (2.55)$$

En considérant une épaisseur de milieu homogène $l = \|\vec{r} - \vec{r}'\|$, β_ν ne dépendant pas de x , on écrit plus simplement :

$$\tau_\nu(l) = \beta_\nu l \quad (2.56)$$

et nous noterons 2.54 plus simplement :

$$T_\nu(l) = \exp(-\beta_\nu l) \quad (2.57)$$

L'équation (2.53) constitue ce que l'on appelle la formulation intégrale de l'équation de transfert radiatif.

2.2.2.3 Formulation en Puissances Nettes Echangées (PNE)

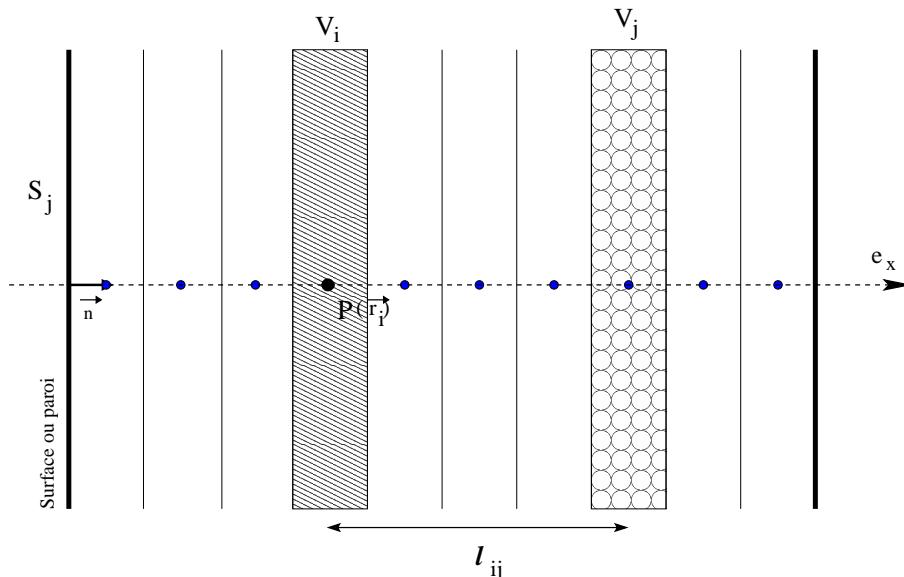


FIG. 2.5 – Calcul du terme Source pour un Volume V_i

Une autre façon d'aborder la modélisation des transferts radiatifs est de considérer le terme source radiatif comme un bilan radiatif. En 1967, en s'appuyant sur le principe de réciprocité, Green [63] puis Hottel [67] proposent une première approche de la formulation en puissances nettes échangées pour quantifier les différentes contributions radiatives au bilan en un point de l'espace. D'un point de vue théorique, Cherkaoui et al. [21, 22, 46, 47] ont montré les grands avantages d'une telle formulation, initiant des travaux dans des domaines d'applications très variés [38, 122, 48].

Considérons un système constitué d'un volume V délimité par une surface S . Le bilan radiatif $S_{r,\nu}(\vec{r}_i)$ en un point $P(\vec{r}_i)$ au centre d'un élément de volume V_i ou de surface S_i (cf. Fig.2.5) est obtenu directement en posant :

$$S_{r,\nu}(\vec{r}_i) = \int_{4\pi} \kappa_\nu [L_{b,\nu}(\vec{r}_i) - L_\nu(\vec{r}_i, \vec{s})] d\Omega \quad (2.58)$$

où $L_{b,\nu}(\vec{r}_i)$ est la luminance noire émise au point $P(\vec{r}_i)$ dans la direction \vec{s} et à la fréquence ν , et $L_\nu(\vec{r}_i, \vec{s})$ la luminance incidente dans la même direction et à la même fréquence.

En partant de (2.58) et en utilisant la formulation (2.53) pour exprimer la luminance incidente et moyennant un peu d'algèbre, ce qui permet de remplacer l'intégration sur l'espace des angles solides par une intégration sur les éléments de volume et de surface [38, 122], nous pouvons écrire le terme source radiatif comme étant :

$$S_{r,\nu}(\vec{r}_i) = \int_{S_j} \frac{\vec{s} \cdot \vec{n}_j}{\|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|^2} \kappa_\nu(\vec{r}_i) \mathbf{T}_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \left[L_{\nu,b}(\vec{r}_j) - L_{\nu,b}(\vec{r}_i) \right] dS_j + \int_{V_j} \frac{1}{\|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|^2} \kappa_\nu(\vec{r}_i) \mathbf{T}_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \kappa_\nu(\vec{r}_j) \left[L_{\nu,b}(\vec{r}_j) - L_{\nu,b}(\vec{r}_i) \right] dV_j \quad (2.59)$$

où

$$\vec{s} = \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{\|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|} \quad (2.60)$$

En notant $l_{ij} = \|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|$ et en intégrant l'équation (2.59) sur l'élément de volume V_i autour du point $P(\vec{r}_i)$, nous déduisons :

$$S_{r,\nu}(V_i) = \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \left(\int_{S_j} \frac{\vec{s} \cdot \vec{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa_\nu(\vec{r}_i) \mathbf{T}_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \left[L_{\nu,b}(\vec{r}_j) - L_{\nu,b}(\vec{r}_i) \right] dS_j + \int_{V_j} \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa_\nu(\vec{r}_i) \mathbf{T}_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \kappa_\nu(\vec{r}_j) \left[L_{\nu,b}(\vec{r}_j) - L_{\nu,b}(\vec{r}_i) \right] dV_j \right) \quad (2.61)$$

Il est possible d'intégrer de la même façon sur un élément de surface S_i autour du point $P(\vec{r}_i)$ d'une paroi pour obtenir $S_{r,\nu}(S_i)$, le bilan surfacique de cet élément de paroi.

Le domaine V étant découpé en N_{volume} volumes notés V_j et le domaine S en $N_{surface}$ notées S_j , l'équation (2.61) peut être écrite sous la forme discrète suivante :

$$S_{r,\nu}(V_i) = \sum_{j=1}^{N_{volume}} \varphi_{V_i \rightarrow V_j, \nu} + \sum_{j=1}^{N_{surface}} \varphi_{V_i \rightarrow S_j, \nu} \quad (2.62)$$

où $\varphi_{V_i \rightarrow V_j, \nu}$ est le terme de puissance nette échangée à la fréquence ν entre deux volumes V_i et V_j , tel que :

$$\varphi_{V_i \rightarrow V_j, \nu} = \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{V_j} dV(\vec{r}_j) \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa_\nu(\vec{r}_i) \mathbf{T}_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \kappa_\nu(\vec{r}_j) \left[L_{b,\nu}(\vec{r}_j) - L_{b,\nu}(\vec{r}_i) \right] \quad (2.63)$$

et $\varphi_{V_i \rightarrow S_j, \nu}$ le terme de puissance nette échangée à la fréquence ν entre un volume V_i et une surface S_j défini par :

$$\varphi_{V_i \rightarrow S_j, \nu} = \int_{V_i} dV(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS(\vec{r}_j) \frac{\vec{s} \cdot \vec{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa_\nu(\vec{r}_i) \mathbf{T}_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \left[L_{b,\nu}(\vec{r}_j) - L_{b,\nu}(\vec{r}_i) \right] \quad (2.64)$$

avec \vec{n}_j , la normale à la surface S_j .

De façon similaire, pour calculer le bilan radiatif d'un élément de surface S_i , on cherchera à calculer les échanges nets radiatifs entre deux éléments de surface en posant :

$$\varphi_{S_i \rightarrow S_j, \nu} = \int_{S_i} dS(\vec{r}_i) \int_{S_j} dS(\vec{r}_j) \frac{(\vec{s} \cdot \vec{n}_j)(\vec{s} \cdot \vec{n}_i)}{l_{ij}^2} T_\nu(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) \left[L_{b,\nu}(\vec{r}_j) - L_{b,\nu}(\vec{r}_i) \right] \quad (2.65)$$

En considérant la luminance noire comme étant uniforme sur les éléments de volume et de surface, nous pouvons écrire ces puissances :

$$\varphi_{V_i \rightarrow V_j, \nu} = \xi_{ij,\nu}^{VV} \left[L_{b,\nu}(V_j) - L_{b,\nu}(V_i) \right] \quad (2.66)$$

$$\varphi_{V_i \rightarrow S_j, \nu} = \xi_{ij,\nu}^{VS} \left[L_{b,\nu}(S_j) - L_{b,\nu}(V_i) \right] \quad (2.67)$$

$$\varphi_{S_i \rightarrow S_j, \nu} = \xi_{ij,\nu}^{SS} \left[L_{b,\nu}(S_j) - L_{b,\nu}(S_i) \right] \quad (2.68)$$

Les termes $\xi_{ij,\nu}^{VV}$, $\xi_{ij,\nu}^{VS}$ et $\xi_{ij,\nu}^{SS}$ sont alors des coefficients optico-géométriques appelés « surfaces d'échanges de Hottel » ou « facteurs d'échanges de Hottel ». Ils représentent toute la complexité optico-géométrique du problème contenue dans les intégrales multiples des équations (2.63), (2.64) et (2.65). Le principe de réciprocité permet de poser les égalités suivantes : $\xi_{ij,\nu}^{VV} = \xi_{ji,\nu}^{VV}$, $\xi_{ij,\nu}^{VS} = \xi_{ji,\nu}^{SV}$ et $\xi_{ij,\nu}^{SS} = \xi_{ji,\nu}^{SS}$. Ainsi, le signe des puissances nettes échangées repose sur les différences de luminance noire.

Il est important de bien préciser que la formulation (2.59) est simplifiée pour des raisons de clarté de présentation mais que le chemin optique l_{ij} peut être celui généralisé à un chemin prenant en compte le phénomène de réflexion aux parois (Fig.2.6) [123]. Ainsi, la formulation en PNE se base sur une intégration sur l'angle solide 4π et permet de définir une surface d'échange totale entre deux éléments en prenant en compte tous les chemins optiques possibles.

C'est sur cette formulation en Puissance Nettes Échangées que reposent les calculs utilisant le modèle TLM qui sera présenté au chapitre 3 dans le cadre de notre étude paramétrique sur la flamme monodimensionnelle.

2.2.2.4 L'approximation du milieu optiquement mince (OTL)

Ce que nous présentons dans ce paragraphe n'est pas une modèle en lui-même mais une approximation permettant de formuler le problème radiatif de façon extrêmement simple.

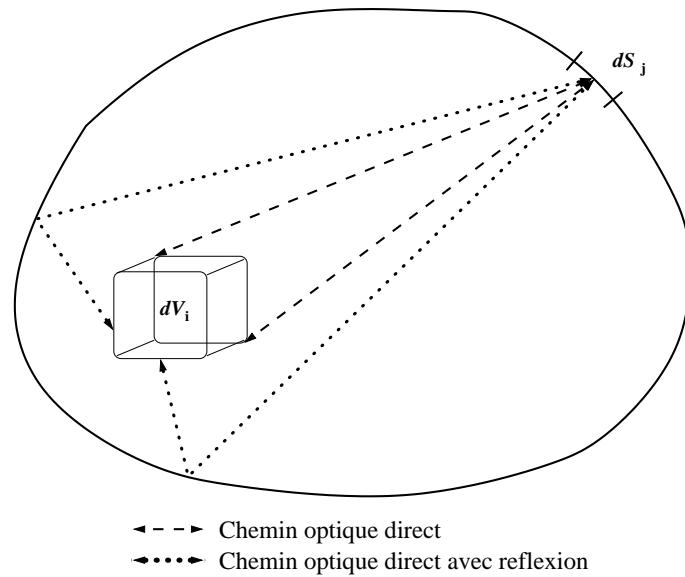


FIG. 2.6 – Chemins optiques participants au calcul de $\varphi_{V_i \rightarrow S_j, \nu}$

Lorsque l'épaisseur optique d'un milieu semi-transparent est très faible), les principaux échanges radiatifs se font à grandes distances. De ce fait, on peut considérer qu'un point du milieu transparent échange de l'énergie principalement avec les conditions limites du système (avec la paroi si le système est fermé). Cette hypothèse appelée « approximation du milieu optiquement mince » permet d'établir le modèle radiatif le plus simple existant à ce jour pour traiter les systèmes ouverts ou aux conditions limites uniformes : le modèle dit « optiquement mince » (**optically thin limit**) que l'on note plus simplement **OTL**.

Ce modèle OTL ne considère aucun échange entre deux volumes de gaz. Le terme source radiatif S_r calculé en un point $P(\vec{r})$ résulte uniquement des échanges entre l'élément de volume de gaz défini autour de ce point et les conditions limites. Cela revient à ne pas prendre en compte le phénomène de réabsorption du rayonnement par le système. Le modèle OTL permet d'écrire le terme source radiatif de la façon suivante :

$$S_r = 4\pi\kappa_\nu [L_{b,\nu}(T\vec{r}) - L_{b,\nu}(T_w)] \quad (2.69)$$

Evidemment, ce modèle n'est plus valable dès que le milieu devient épais, car le phénomène de réabsorption ne peut plus être négligé.

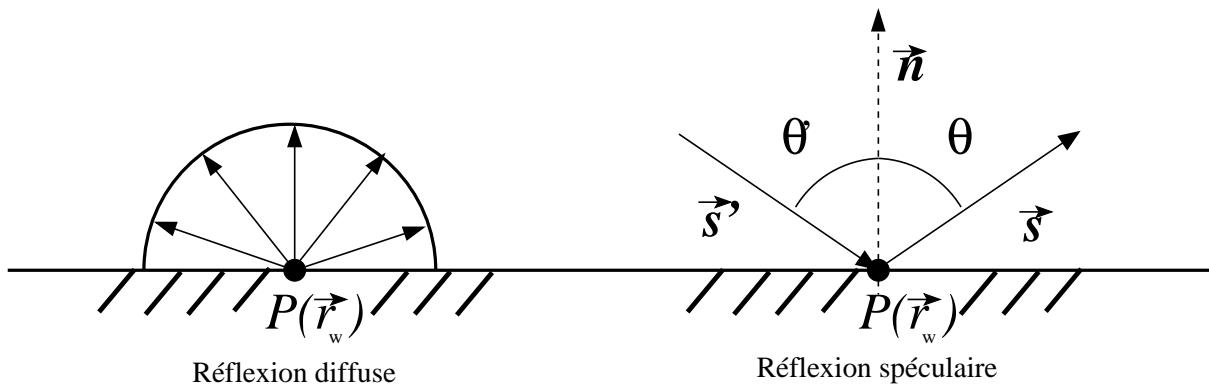


FIG. 2.7 – Réflexion à la paroi

2.2.2.5 Rayonnement aux conditions limites

En rayonnement, les conditions limites d'un problème sont toujours représentées par un élément de paroi localement plan, opaque et participant aux transferts radiatifs. Considérons un point $P(\vec{r}_w)$ à la surface d'une paroi. Nous noterons $L_{b,\nu}(\vec{r}_w)$ la luminance noire de paroi obtenue à la température T_w . On définit alors $L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s})$ la luminance émise à la paroi telle que :

$$L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}) = \epsilon(\vec{r}_w) L_{b,\nu}(\vec{r}_w) + \rho(\vec{r}_w) L_{\nu,incident}(\vec{r}_w) \quad (2.70)$$

où $L_{\nu,incident}(\vec{r}_w, \vec{s})$ représente la luminance incidente, ρ la réflectivité et ϵ l'émissivité à la paroi. L'émissivité est le rapport entre la quantité d'énergie émise par un élément de paroi de manière intrinsèque (ou émittance) et la luminance noire émise dans ces mêmes conditions. Ce coefficient peut prendre une valeur comprise entre 0 et 1. Lorsque l'émissivité est maximale et égale à 1, la paroi est dite noire. Si ϵ est nul, la paroi se comporte comme un miroir parfait. Pour toute autre valeur de ϵ , on parlera de paroi grise. La réflectivité peut être obtenue en posant :

$$\rho(\vec{r}_w) = 1 - \epsilon(\vec{r}_w) \quad (2.71)$$

Dans le cas d'une réflexion spéculaire (Fig.2.7), la luminance incidente à la paroi provient de la direction \vec{s}' , symétrique de \vec{s} par rapport à la normale \vec{n} du plan, et est notée $L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}')$:

$$L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}) = \epsilon(\vec{r}_w) L_{b,\nu}(\vec{r}_w) + (1 - \epsilon(\vec{r}_w)) L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}') \quad (2.72)$$

Lorsque la réflexion est diffuse (Fig.2.7), on considère que la luminance quittant la paroi est isotrope et que la partie réfléchie est fonction de la luminance incidente totale provenant de toutes les directions du demi-espace (au dessus de la paroi) orienté selon la normale \vec{n} . Pour toutes les directions \vec{s} appartenant à ce demi-espace on aura :

$$L_\nu(\vec{r}_w) = \epsilon(\vec{r}_w) L_{b,\nu}(\vec{r}_w) + \frac{1 - \epsilon(\vec{r}_w)}{\pi} \int_{2\pi} L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}') \vec{n} \cdot \vec{s}' d\Omega(\vec{s}') \quad (2.73)$$

2.2.2.6 Grandeur radiatives intégrales

La luminance $L(\vec{r}, \vec{s})$ est une grandeur fonction du vecteur position \vec{r} et de la direction de propagation dans l'espace \vec{s} . Nous introduisons ici des grandeurs issues d'intégrales sur l'angle solide 4π obtenues en un point $P(\vec{r})$ de l'espace. Les plus courantes sont :

- le rayonnement incident :

$$G_\nu(\vec{r}) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) d\Omega \quad (2.74)$$

- le flux de chaleur rayonné :

$$\mathbf{q}_{r,\nu}(\vec{r}) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) \cdot \vec{s} d\Omega \quad (2.75)$$

- l'éclairement surfacique en un point $P(\vec{r}_w)$ à la paroi :

$$H_\nu(\vec{r}_w) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}) \cdot |\vec{n}_w \cdot \vec{s}| d\Omega \quad (2.76)$$

où \vec{n}_w est la normale d'un élément de paroi autour du point $P(\vec{r}_w)$.

Ces trois notions sont très importantes car elles permettent d'exprimer aisément toutes les autres grandeurs physiques recherchées en transferts radiatifs. Ainsi, on exprimera le flux aux parois comme étant :

$$q_\nu(\vec{r}_w) = \vec{q}_\nu \cdot \vec{n}_w = \epsilon(\vec{r}_w) [\pi L_{b,\nu}(\vec{r}_w) - H_\nu(\vec{r}_w)] \quad (2.77)$$

avec $\epsilon(\vec{r}_w)$ l'émissivité de la paroi au point $P(\vec{r}_w)$.

En un point $P(\vec{r})$ d'un petit volume dV de milieu semi-transparent homogène et de coefficient d'absorption κ_ν , le terme source radiatif $S_r(\vec{r})$ représente la divergence du flux rayonné (cf. (2.75)) et s'écrit :

$$S_{r,\nu}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \cdot \mathbf{q}_{r,\nu}(\vec{r}) \quad (2.78)$$

Nous avons vu qu'il peut aussi être formulé comme un bilan radiatif au point $P(\vec{r})$ (cf. (2.58)), ce qui devient alors en utilisant l'équation (2.74) :

$$S_{r,\nu}(\vec{r}) = \kappa_\nu [4\pi L_{b,\nu}(\vec{r}) - G_\nu(\vec{r})] \quad (2.79)$$

La dépendance angulaire est une difficulté uniquement attachée à la résolution de l'ETR dans une direction de propagation donnée. Le rayonnement apparaît comme un terme source radiatif dans l'équation de l'énergie, représentant le bilan énergétique global en un point. Les grandeurs intégrales sont donc les seules qui puissent présenter un intérêt pour prendre en compte le rayonnement en combustion.

2.2.3 Méthodes de Résolution

Nous avons vu que l'équation de transfert radiatif peut être formulée sous une forme différentielle ou sous une forme intégrale. A partir de cette observation, nous pouvons regrouper les méthodes permettant de modéliser les transferts radiatifs en 4 classes [111, 162] : les méthodes de type différentiel, les méthodes de type intégral, les méthodes de type statistique et les méthodes dites "hybrides". Cependant, il est à noter qu'une telle classification ne peut être qu'indicative (de par la grande quantité de méthodes rencontrées dans la littérature). Nous avons trouvé de nombreux tests dans la littérature comparant différentes méthodes de résolution et discutant de leur efficacité pour un type de problème radiatif précis [8, 11, 23, 28], certaines méthodes pouvant être plus particulièrement adaptées aux configurations testées. Il n'existe pas de comparaison directe de l'ensemble des différentes méthodes existantes. On ne mentionnera ici que les méthodes les plus communément utilisées.

Pour simplifier ce tour d'horizon, on conservera la vision monochromatique du rayonnement pour formuler les différentes méthodes citées. Les paramètres importants dans ces méthodes de résolution des transferts radiatifs sont de types géométriques. L'épaisseur optique τ_ν en fait partie. Cependant la façon dont elle varie sur l'espace des fréquences est totalement décorrélée du problème lié à l'impact de son amplitude sur le comportement des méthodes de résolution de l'ETR. Nous soulignons toutefois que la méthode de type statistique (Méthode de Monte Carlo) que nous présenterons intègre la dépendance fréquentielle en générant aléatoirement la fréquence ou plage de fréquence à laquelle se passe un événement. Elle sera donc abordée en prenant en compte l'intégration spectrale.

2.2.3.1 Les méthodes différentielles

Elles ont pour objectif de résoudre la forme différentielle de l'équation des transferts radiatifs (cf. (2.51)) en utilisant une forme approchée de l'intensité de la luminance incidente $L(\vec{r}, \vec{s})$. Les plus utilisées sont les méthodes aux Harmoniques Sphériques (Approximation P_N) et les Méthodes aux Ordonnées Discrètes (**DOM** pour Discrete Ordinates Method). Nous rangerons aussi dans cette catégorie la Méthode des Volumes Finis (**FVM** pour Finite Volume Method), cette dernière ne présentant pas de différences fondamentales avec les DOM, et les méthodes de flux [97, 130].

Les méthodes aux Harmoniques Sphériques ou méthodes P_N : Le principe de base est d'écrire la luminance $L(\vec{r}, \vec{s})$ sous la forme d'une série de Fourier généralisée séparant la dépen-

dance spatiale et la dépendance directionnelle en deux termes distincts :

$$L(\vec{r}, \vec{s}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l L_l^m(\vec{r}) \cdot Y_l^m(\vec{s}) \quad (2.80)$$

Les $Y_l^m(\vec{s})$ sont les harmoniques sphériques associées telles que :

$$Y_l^m(\vec{s}) = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} e^{im\psi} P_l^{|m|}(\cos \theta) \quad (2.81)$$

où θ et ϕ sont les coordonnées polaire et azimutale du vecteur unitaire \vec{s} et P_l est un polynôme de Legendre.

En ne retenant que les termes tel que $l < N$, on obtient un set de $N + 1$ équations différentielles du 1^{er} ordre nécessitant $N + 1$ conditions limites.

Les méthodes d'ordre N impair sont les plus courantes. La méthode P_1 , aussi appelée « approximation de diffusion », demeure la plus utilisée pour sa simplicité. Elle permet de déterminer avec une seule équation l'éclairage volumique G et, proportionnellement à son gradient, le flux de chaleur rayonnée. Elle permet de traiter des problèmes où l'épaisseur optique du milieu est grande (ex. : four verrier). Elle débouche sur des résultats erronés dans le cas de milieux optiquement minces et plus particulièrement aux limites (près des parois). La méthode P_3 permet d'obtenir des résultats cohérents pour des épaisseurs optiques de l'ordre de 0.5 mais l'algorithme de résolution est plus lourd. A partir de P_5 la complexité du calcul est trop coûteuse par rapport au gain en précision.

Marakis et al. [103] ont utilisé la méthode P_1 en tant que méthode de calcul ultra-rapide dans le cadre d'une étude paramétrique sur les transferts radiatifs menée dans le cas d'un four cylindrique axisymétrique en présence de cendres et autres particules pulvérisées. Cette étude avait surtout pour but d'évaluer l'influence des suies, cendres et particules aux niveaux des transferts. Elle a permis d'observer l'inefficacité de la méthode P_1 à modéliser les transferts radiatifs en combustion dans un milieu optiquement mince ($\kappa = 0.1\text{m}^{-1}$). La présence de cendres et particules résiduelles leur a permis de traiter un milieu optiquement plus épais ($\kappa = 0.5\text{m}^{-1}$) et la qualité des résultats obtenus a été améliorée. Toutefois, bien qu'elle soit plus adaptée aux milieux très absorbants, elle présente des limites aux très fortes épaisseurs optiques ($\tau \gg 10$).

Les DOM ou méthodes aux ordonnées discrètes : Elles sont basées sur une représentation discrète, sous la forme d'une quadrature, des variations directionnelles de toute fonction $f(\vec{s})$ de la luminance par une approximation de l'intégration sur l'angle solide telle que :

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\Omega \simeq \sum_{i=1}^n \omega_i \cdot f(\vec{s}_i) \quad (2.82)$$

n étant un nombre de directions discrètes \vec{s}_i donné et w_i leurs poids de quadrature associés. De l'application de cette approche à l'équation (2.51) découle un set de n équations différentielles identiques définies suivant \vec{s} :

$$\vec{s}_i \cdot \nabla L(\vec{s}_i) + \beta L(\vec{s}_i) = \beta S(\vec{s}_i) \quad \text{avec } i=1,\dots,n \quad (2.83)$$

La sélection des directions discrètes \vec{s}_i n'est pas arbitraire. Elle doit respecter certaines hypothèses de symétrie. On appelle « ordonnées discrètes » les cosinus directeurs des vecteurs unitaires \vec{s}_i définis dans un repère cartésien. Nous pouvons énoncer les deux points essentiels suivants nécessaires à la mise en oeuvre des DOM :

- définir un schéma de dérivation spatial correct afin de résoudre chacune des n équations différentielles (cf. (2.83)) sur un domaine découpé en volumes finis.
- établir des quadratures intéressantes permettant d'obtenir une bonne représentation des dépendances angulaires en ne rajoutant pas trop de directions angulaires discrètes et donc d'équations différentielles supplémentaires au problème.

Il est important de remarquer que ces deux lignes directrices des DOM apportent deux défauts majeurs à la validité d'une modélisation [14, 24, 25] :

- la fausse diffusion (**false scattering**), phénomène dû à l'erreur des schémas de dérivation spatial et apparaissant plus particulièrement quand les directions sont obliques par rapport à l'orientation des lignes du maillages.
- l'effet de rayon (**ray effect**), lié à la discrétisation angulaire insuffisante, et se manifestant par des discontinuités irréalistes dans la distribution des luminances et des flux de chaleurs pouvant conduire à des solutions physiques erronées inattendues ;

Ces deux défauts seront plus amplement abordées et mises en évidences au Chapitre 4, où nous présenterons de façon plus détaillée la formulation liée à cette méthode.

Les quadratures angulaires le plus souvent utilisées sont les quadratures S_N . Par abus de langage, certains parleront souvent de « Méthodes SN » pour désigner les DOM [111]. Plus généralement, le type de quadrature donne son nom à la **DOM** qui l'utilise (certains auteurs mentionneront donc l'utilisation de méthode T_N , etc.). La S_4 (24 directions discrètes) est la quadrature angulaire la plus couramment utilisée dans la littérature. Elle représente un excellent compromis entre rapidité et précision. Elle a notamment été recommandée par Selçuk et Kayakol [141] pour modéliser les transferts radiatifs en combustion. Ces auteurs l'ont comparé à la « Méthode des Transferts Discrets » de Shah (DTRM, cf §2.2.3.4) dans un calcul de transferts radiatifs en trois dimensions modélisant un four (veine carrée horizontale avec un brûleur à gasoil en entrée) contenant un milieu émissif et absorbant, et présentant de forts gradients de température. Les tests effectués ont montré que l'utilisation des DOM avec une quadrature angulaire S_4 procure une meilleure précision sur le terme source radiatif et ce en mille fois moins de temps CPU que la DTRM. D'autres auteurs

nels que Abraham et Magi [1] ont utilisé cette méthode pour calculer les échanges thermiques par rayonnement au sein d'un moteur Diesel en forme de chapeau mexicain. Cette géométrie complexe a été étudiée en utilisant deux maillages cartésiens non-orthogonaux en trois dimensions l'un composés de 1500 hexaèdres et l'autre de 6300 hexaèdres. Bien qu'ayant considéré des parois grises et diffuses, ils ont considéré des conditions de parois périodiques. Cette étude a montré que, de part sa formulation basée sur une approche en volumes finis, la méthode aux ordonnées discrètes permettait de coupler de façon efficace la résolution de l'équation des transferts radiatifs à celle des équations de conservation.

Cette méthode a permis à Luan et al. [100] de modéliser de façon efficace les transferts radiatifs dans une maquette de réacteur à lits fluidisés et étudier leur rôle et leur importance pour ce système. Ils ont ainsi pu montré un rôle du rayonnement croissant quand la taille des particules considérées augmentent. Cette étude confirme que la modélisation des transferts radiatifs dans un milieu absorbant et diffusant n'apporte pas de difficulté supplémentaire du point de vue de la formulation et que, de par leur simplicité et leur formulation, les DOM sont facilement utilisables dans des simulations prenant en compte les autres modes de transferts thermiques.

Plus récemment, dans un autre domaine et à une plus grande échelle, Yeoh et al. [169] ont développé un modèle d'incendie en appartement, en trois dimensions, prenant en compte le rayonnement par une méthode aux ordonnées discrètes formulée dans un repère cartésien pour un maillage structuré. Le modèle de rayonnement des gaz utilisé est grossier et la quadrature angulaire est minimale (S_4). Le modèle RANS permet de modéliser la combustion turbulente. Bien que le modèle radiatif soit très allégé, les résultats obtenus sont en accord avec les mesures expérimentales et ont permis de montrer que, dans cette configuration, le rayonnement thermique jouait un rôle important sur les prédictions de température. Cependant, de façon rigoureuse, l'utilisation d'un modèle RANS basé sur des grandeurs moyennes ne suffit pas et l'influence de la turbulence sur le rayonnement auraient du être prise en compte.

Les Méthodes aux Ordonnées Discrètes sont parfois classées parmi les **méthodes des flux**. Les **méthodes des flux** reposent sur une grossière simplification de la variation angulaire de la luminance, basée sur des directions orientées, de façon arbitraire, selon les axes d'un repère cartésien. On trouve dans la littérature de nombreuses méthodes de ce type, utilisées notamment pour les modèles atmosphériques [157]. Les méthodes de type Schuster-Hamaker (méthode à deux flux) considère le rayonnement de plans parallèles fins grâce à deux équations différentielles donnant le flux ascendant et le flux descendant. Ceci pouvant être effectué pour chaque direction (axe des x , y ou z), on trouve aussi dans la littérature des modèles à quatre flux (modèle de type Gosman et Lockwood) et des modèles à six flux. Certaines méthodes de flux comme le modèle de

type Schuster-Schwarzschild (4 à 6 flux) consistent à diviser l'angle solide qui entoure un point de l'espace en plusieurs angles solides orientés autour des axes du repère et à l'intérieur desquels la luminance est considérée comme étant constante. La mise en équation différentielle qui en résulte est très pratique pour une introduction dans un calcul simultané d'écoulement et cette méthode a été très utilisée en combustion (géométries simples). Cependant, les méthodes de flux souffrent généralement d'une inaptitude à bien modéliser les systèmes géométriquement complexes et à y représenter d'éventuelles variations des flux directionnels. De plus, les fortes discontinuités du champs de luminance qui apparaissent sont beaucoup plus importantes que celles que l'on peut rencontrer dans les DOM.

La plupart des auteurs ont donc utilisé des méthodes de flux en combustion dans le cadre d'études où l'attention n'était pas focalisée sur la nécessité d'obtenir un modèle radiatif précis, mais simplement de prendre en compte une approximation du terme source radiatif pour l'équation de l'énergie [12, 170].

La formulation des méthodes différentielles est la plus compatible avec les algorithmes de calcul d'écoulement formulés en différences finies ou éléments finis. Cependant, il est à noter que les méthodes aux ordonnées discrètes et les méthodes aux harmoniques sphériques classiques ne sont pas initialement adaptées à la résolution de systèmes complexes en trois dimensions pour lesquels on a besoin de maillages non structurés. Des algorithmes particuliers ont été mis au point au cours des dix dernières années pour répondre à cette attente (FVM et DOM pour maillages non structurés). Ceci a fait l'objet de notre étude et sera abordé au chapitre 4 où nous exposerons de façon détaillée le développement d'un code DOM adapté aux maillages non structurés et l'évaluation de ses performances. Cependant les méthodes différentielles ne sont pas non plus les plus appropriées pour la modélisation de systèmes constitués de parois réflectissante de manière spéculaire puisqu'elles nécessitent alors une procédure itérative commandée par un critère de convergence.

2.2.3.2 *Les méthodes intégrales*

Les méthodes intégrales font appel à la formulation intégrale (2.53) ou en puissance nettes échangées pour calculer la luminance le long des chemins optiques vecteurs des transferts radiatifs. Nous rangeons dans cette catégorie la méthode des zones de Hottel et la méthode de tracé de rayon (ou Ray Tracing).

La **méthode des zones**, introduite en 1967 par Hottel et Sarofim pour des applications dans le domaine de l'ingénierie, repose sur la formulation en puissance nettes échangées (cf. §2.2.2.3). Elle considère des propriétés radiatives (luminance noire (2.36) et coefficient d'absorption) uni-

formes sur chaque élément de volume et de surface. L'évaluation des transferts radiatifs se fait à l'aide de facteurs d'échanges appelés « aires ou volumes d'échanges directes de Hottel », prenant en compte le phénomène d'absorption du rayonnement par le milieu séparant deux éléments. Cette méthode amène une hypothèse simplifiatrice par rapport à la formulation en PNE : l'échange se fait uniquement à travers l'angle solide sous lequel un élément voit l'autre de façon directe. Le phénomène de réflexion aux parois n'est pas intégré dans les aires et volumes d'échanges de Hottel. On distingue les trois types d'échanges de la formulation en PNE (surface/surface, surface/volume et volume/volume). Les aires et volumes d'échanges correspondants peuvent être réunis dans des matrices d'échanges, d'où une possibilité d'utiliser les connaissances du domaine du calcul matriciel pour optimiser l'application de la méthode des zones [116]. La méthode des zones demande un calcul préalable des aires d'échange direct. Ceci présente de nombreux inconvénients. En particulier, si l'épaisseur optique varie, sous l'influence de la température par exemple, il est nécessaire de recalculer les nouvelles aires d'échange direct en fonction des nouvelles épaisseurs optiques. Pour augmenter la précision, il faut raffiner le maillage et gérer de matrices d'échanges importantes, ce qui rend rapidement cette méthode coûteuse en temps de calcul. Enfin, pour des configurations géométriquement complexes, les facteurs d'échange direct (obtenus à partir des facteurs de formes) sont difficiles à calculer et il faut avoir recours à une méthode statistique (type Monte Carlo) pour les estimer.

La méthode des zones a sûrement été la méthode la plus couramment utilisée pour prédire les transferts radiatifs dans les chambres de combustion, convenant parfaitement à une approche en volumes finis. En 1997, Olsommer et Spakovski [118] l'ont utilisé pour une étude sur un four incinérateur d'ordures ménagères (température de 1300 – 1800 K) et obtenus des résultats assez fiables en utilisant le même maillage pour modéliser la combustion et les transferts radiatifs.

Une autre méthode pouvant être classée parmi les méthodes intégrales est la méthode du **Ray Tracing**. Cette méthode repose sur une discréttisation angulaire de l'espace en un très grand nombre d'angles solides suffisamment nombreux et petits pour pouvoir considérer une distribution uniforme du rayonnement à l'intérieur de chacun d'eux. Pour chaque direction ou « rayon » associé à chacun des angles solides, on suit le chemin optique en découplant le trajet en segments de longueur l , supposés isothermes et homogènes, et pour lesquels on peut calculer une transmittance moyenne $T_\nu(l)$ [143]. L'équation de transfert radiatif est alors intégrée analytiquement des surfaces au point $P(\vec{r})$ où la luminance incidente est recherchée. Ainsi, l'intégration sur tout le chemin optique peut être faite par partie, en considérant N segments homogènes, et la luminance

peut être calculée sur le trajet en posant :

$$L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) = L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}) T_\nu(\vec{r}_w \rightarrow \vec{r}) + \sum_{i=1}^N (1 - T_\nu(\vec{l}_i)) L_{b,\nu}(\vec{r}_i) \quad (2.84)$$

La précision du calcul dépend du nombre de rayons choisis ainsi que du nombre de segments permettant de représenter les inhomogénéités sur le trajet. De plus le temps de calcul est accru de façon considérable lorsque l'on intègre les phénomènes de réflexion aux parois. Coelho et al. ont produit un benchmark comparant des résultats obtenus par méthode Ray Tracing et par méthode Monte Carlo, à partir de profils de température et de concentrations d'espèces analytiques sur des configurations axisymétriques [28]. Tant que l'on ne considère pas la réflexion aux parois, le Ray Tracing affiche une précision équivalente à celle du Monte Carlo pour des temps de calculs légèrement inférieurs. Cette méthode permet elle d'obtenir des solutions de référence mais est trop coûteuse en temps de calcul pour être utilisée dans des calculs de combustion.

2.2.3.3 *Les méthodes statistiques*

Quand on parle de méthode statistique, on fait allusion à la méthode Monte Carlo. La méthode Monte Carlo consiste à reconstruire les transferts radiatifs par la génération d'un grand nombre d'événements aléatoires à l'issue de laquelle les variables d'état du système sont calculées en moyennant les valeurs obtenues. On modélise un phénomène physique, notamment la trajectoire d'un photon ou « rayon » de son point d'émission jusqu'à son point d'absorption, par une suite de processus aléatoires. Les phénomènes tels que l'émission, l'absorption, la diffusion sont représentées par des lois probabilistes qui régissent alors le comportement de chaque photon émis par un élément du système. La réflexion du rayon aux parois, en fonction de leur émissivité ϵ est aussi représentée. Chaque rayon possède une fréquence d'émission propre qu'il conserve sur son trajet. Dans la méthode Monte Carlo analogue, chaque élément émet un nombre de quanta d'énergie proportionnellement à son émittance.

La **MCM** (Monte-Carlo Method) est la plus apte à modéliser avec précision les transferts radiatifs puisque pour un grand nombre de tirages aléatoire on tend vers la solution exacte. De plus, elle permet de calculer parallèlement l'incertitude associée à chaque résultat - la barre d'erreur provient de l'écart-type. Elle donc considérée comme une méthode de référence dans le domaine de la modélisation des transferts radiatifs.

Une des grandes difficultés liées aux méthodes statistiques est de trouver les lois mathématiques décrivant au mieux la physique du problème.

Howell et Farmer ont largement contribué à faire avancer la méthode de Monte Carlo en produisant de nombreux travaux visant à l'optimisation de cette méthode.[68, 69, 49, 51, 50].

Toutes les autres techniques actuelles de modélisations numériques des transferts radiatifs, même

les méthodes les plus rigoureuses comme la méthode des zones, font une approximation pour ce qui est des fonctions de bases ou du maillage (approches en volumes finis). Excepté pour des cas où la géométrie et les propriétés radiatives du milieu sont simplifiées, il n'y a, à ce jour, aucune solution analytique utilisable de manière universelle dans des géométries complexes.

La méthode de Monte Carlo incorpore tous les effets possibles sans approximation, si ce n'est la modélisation des lois statistiques. Cependant son coût en temps de calcul force à émettre des réserves pour ce qui est de son utilisation directe en combustion.

De récents travaux effectués au sein de notre laboratoire [38, 122] ont montré qu'à partir d'un travail de reformulation des équations intégrales de l'ETR (formulation en PNE, introduction des fonctions de densités de probabilités, utilisation des techniques d'accélération du suivi de rayons propre au domaine de la synthèse d'images), des gains en temps de calculs très significatifs peuvent être obtenus.

Récemment, Tessé et al. [152, 151] ont étudié l'influence du couplage turbulence/rayonnement en s'appuyant sur des calculs de transferts radiatifs par méthode de Monte Carlo au sein d'une flamme de diffusion Ethylène/Air, turbulente et produisant de la suie. Ils ont pu estimer que la prise en compte de ce type d'interaction pouvait correspondre à un accroissement de 30% des pertes radiatives estimées. Dans cette étude, la modélisation de la combustion turbulente a été effectuée par un modèle simplifié basé sur des densité de probabilité. Le choix de la MCM se justifie donc puisqu'il intègre facilement ce type de formulation. Toutefois, le maillage utilisé (environ 9000 cellules) est bien moins dense que ceux utilisés par les codes de combustion actuels. De plus, la nécessité de pouvoir fournir des PDF adaptées au problème posé font que cette méthode n'est pas encore suffisamment flexible.

La méthode Monte Carlo peut être considérée comme une méthode d'intégration. Elle permet par un reformulation du problème de résoudre l'ETR sous sa forme intégrale en effectuant les intégrations qui apparaissent dans la formulation en PNE (cf. § 2.2.3.2). Elle présente alors la particularité intéressante de permettre une modélisation simultanée des dépendances spatiale, angulaire mais aussi spectrale du rayonnement thermique. L'ajout de l'intégrale sur l'espace de fréquences génère une difficulté conséquente pour tous les autres types de méthodes. Pour résoudre des intégrales multiples de ce type, on peut utiliser la méthode statistique qui consiste alors à résoudre la fonction à intégrer pour un grand nombre de tirage aléatoire de point appartenant à l'ensemble des domaines d'intégrations. Dans cette thèse, nous effectuerons une étude (cf. Chapitre 3) en utilisant cette approche de la méthode Monte Carlo. Le gros avantage de cette formulation est de calculer simultanément la participation du milieu et l'émission locale, ce qui permet d'utiliser une méthode de sensibilité basée sur un développement de Taylor de la fonction

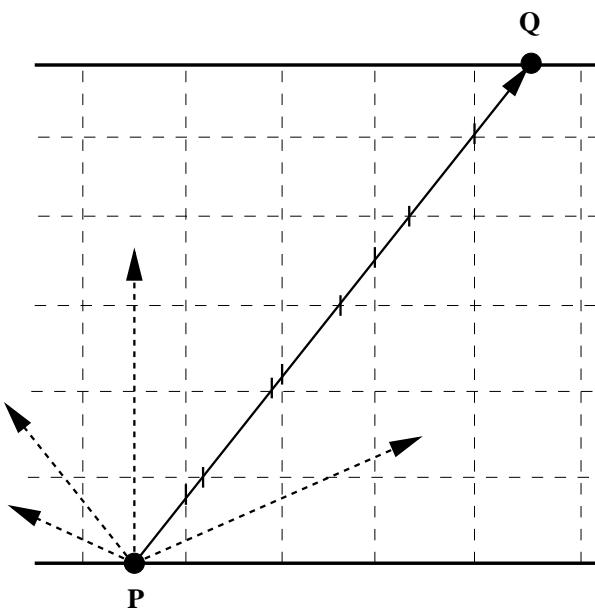


FIG. 2.8 – Tracé de rayon par la Méthode des Transferts Radiatifs Discret (DTRM)

S_r . Ceci sera expliqué plus en détails ultérieurement.

2.2.3.4 *Les méthodes Hybrides*

On réunit sous ce nom toutes les techniques basées sur une combinaison de plusieurs des méthodes citées dans les sections précédentes, permettant de corriger les défauts que celles-ci présentent individuellement. Face aux grands nombres de méthodes hybrides proposées dans la littérature, nous ne présentons ici que deux de ces méthodes, la première étant la plus connue et la seconde étant la plus récente.

La **Méthode des Transferts Radiatifs Discrets** ou **DTRM** a été proposée par Lockwood et Shah en 1981 [99]. Elle a été spécialement développée pour la combustion, combinant méthode des zones, MCM et méthodes des flux. La DTRM est élaborée autour du concept de résolution de l'équation de transferts radiatifs sous sa forme différentielle pour un certain nombre de rayons représentatifs.

L'espace des angles solides autour d'un point P est découpé en un grand nombre de petits angles solides autour des rayons représentatifs choisis. Le domaine physique est découpé en volumes de contrôle qui peuvent être donnés par le maillage. Le point d'intersection de chaque rayon partant de P avec la limite physique du système considéré est déterminé et noté Q . Puis, connaissant le rayonnement émis de la paroi en Q , l'ETR est résolue par parties en passant par les volumes de contrôle qui se trouvent sur la trajectoire QP (c'est une méthode de tracé de rayon). On détermine

ainsi la luminance incidente G_P pour le rayon considéré. Cette opération est effectuée pour chacun des rayons qui auront été définis au point P . Contrairement à la MCM, les directions des rayons ne sont pas obtenues aléatoirement et on ne résout l'ETR que sur un trajet linéaire d'un point à un autre. Il n'y a pas de modélisation directe de la réflexion aux parois). Une procédure itérative est donc nécessaire si les parois ne sont pas noires.

Cette méthode est applicable à des géométries complexes sans pour autant compliquer la physique du problème. Elle est plus précise que la méthode aux ordonnées discrètes et plus rapide que la méthode de Monte Carlo (elle présente tout de même un coût en temps de calcul assez élevée). Comme pour les méthodes aux ordonnées discrètes, la précision peut être accrue en augmentant le nombre de directions pré-déterminées. La DTRM présente un avantage pour les problèmes nécessitant une solution simultanée en énergie et en écoulement en utilisant le même maillage. Pour se faire une idée plus concrète, on peut s'appuyer sur les travaux de Coelho et Carvalho [26, 27] qui ont utilisé la DTRM pour évaluer les transferts radiatifs dans un modèle tridimensionnel d'un système de centrale thermique. Les flux aux parois calculés sont en accord avec les données expérimentales, validant ainsi la qualité des estimations radiatives pouvant être obtenues par la DTRM. Cependant, il est à noter que le maillage utilisé a été optimisé sur le plan radiatif afin de gagner en temps de calcul sans perdre trop de précision sur les résultats. Il était plus grossier que celui utilisé pour résoudre le problème de combustion. De plus, l'évaluation du rayonnement n'était effectuée que toutes les dix itérations du module de combustion afin d'accélérer la procédure. En 1998, Huang et al. [70] ont réalisé le même type d'étude en ne calculant le champ radiatif que toutes les trente itérations. Bien qu'elle soit directement couplable avec la CFD, il semble que cette méthode reste tout de même trop coûteuse en temps de calcul pour pouvoir être utilisée sur des maillages très denses.

Nous pouvons aussi citer les travaux de Yan et Holmstedt [168] qui ont aussi utilisé la DTRM pour modéliser le phénomène radiatif dans le cadre d'une étude sur des flammes de diffusion turbulentes coincées entre deux parois.

La méthodes de rayonnement des éléments par modèle d'émission de rayons ou « **REM**² » est exposée par Maruyama et Aihara en 1997 [105]. Cette méthode utilise des rayons émis d'éléments de surface ou volume pour déterminer les facteurs d'échanges. Elle permet de discréteriser le milieu en polyèdres et les parois diffuses et spéculaires en polygones, puis d'introduire la notion d'aire de rayonnement effective pour chacun de ces éléments (ce qui permet de ne plus faire de distinction entre éléments de surface et éléments de volume) et la notion de facteurs optiques d'extinction, d'absorption et de diffusion pour modéliser les évènements importants en transferts radiatifs. Ces notions contribuent à un calcul rapide et direct des flux d'énergie échangés. Cette méthode peut

être associée à une DTRM étendue à des géométries complexes prédécoupées en polyèdres et polygones standardisés et qui prend en compte la réflexion aux parois. Elle permet de traiter des milieux inhomogènes où les propriétés spectrales ne dépendent pas de la température (dans le cas contraire, comme pour la DTRM, il est nécessaire de recalculer le facteur d'échange à chaque itération). Cependant, le nombre de rayons utilisé est bien plus grand que dans une DTRM puisque chaque type de volumes a une émission angulaire discrétisée qui lui est propre. En 1999, Guo et Maruyama [106, 107] ont appliqué cette méthode à des calculs en milieu inhomogène, non gris et à diffusion anisotrope. Leurs résultats comparés à ceux obtenus par une méthode de Monte Carlo ont montré des écarts de l'ordre de 2% en milieu gris, 10% en milieu non gris et pouvant aller jusqu'à 20% dans ce dernier cas au voisinage des limites (parois). Les temps de calcul affichés sont tout de même supérieur à ceux d'une DOM. Il est à noter que, lorsque que l'on utilise la Rem2 dans des milieux optiquement épais le temps de calcul décroît.

Nous reprenons les méthodes présentées dans cette section dans le tableau 2.1. Il apparaît de manière évidente qu'il n'existe pas de méthode-clef unique prévalant sur les autres, mais plutôt des méthodes plus ou moins adaptées à un certain type de problème. Même si la méthode Monte-Carlo semble être la « méthode tout terrain », il n'est pas encore envisageable de l'introduire dans un modèle de combustion en géométrie réelle, et ce malgré les récents progrès réalisés dans son optimisation [38, 122]. Cependant, nous montrerons au chapitre 3 comment l'utiliser efficacement dans une configuration monodimensionnelle, à géométrie simple, en l'intégrant un modèle basé sur le calcul de sensibilités. Les objectifs sont alors différents : modélisation détaillée du problème et compréhension de la physique associée.

La méthode DOM nous apparaît comme étant une bonne façon de prendre en compte les transferts radiatifs dans les modèles de la combustion. Nous avons donc choisi développé un code de calcul des transferts radiatifs par méthode aux ordonnées discrètes adapté au maillage non structuré. Ceci fera l'objet du chapitre 4.

2.2.4 Modèles de Rayonnement des Gaz

Nous avons introduit l'ETR sous sa forme monochromatique pour clarifier la présentation des principales méthodes permettant de modéliser le rayonnement d'un point de vue géométrique. En réalité, la résolution de problèmes de transferts radiatifs au sein d'un milieu semi-transparent nécessite aussi une intégration en fréquence à cause de la dépendance fréquentielle de la luminance du corps noir, mais surtout de la complexité du spectre d'absorption d'un gaz (ou mélange de gaz)[113, 29]. La luminance qui présente un réel intérêt est une luminance regroupant tous les

TAB. 2.1 – Tableau récapitulatif des méthodes énoncées

Méthodes	Type	Rapidité	Précision	Flexibilité
Méthode P_N	Différentiel	++	-	+
DOM / FVM	Différentiel	++	-	++
Méthode des Flux	Différentiel	++	--	+
Méthode des Zones	Intégrale	-	+	-
Ray Tracing	Intégrale	--	++	--
Méthode Monte Carlo	Statistique	--	++	+
DTRM	Hybride	-	+	++
REM ²	Hybride	-	+	++

flux obtenus à toutes les fréquences du spectre :

$$L(\vec{r}, \vec{s}) = \int_0^{\infty} L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s}) d\nu \quad (2.85)$$

Cela revient soit à avoir une intégrale de plus, soit à résoudre les équations différentielles à chaque longueur d'onde afin de pouvoir sommer les luminances monochromatiques résultantes. On sait parfaitement intégrer la luminance noire sur tout le domaine spectrale (cf. (2.34) ou sur un intervalle fréquentielle (fraction du corps noir tabulée par Siegel et Howell [143]). Cependant, pour pouvoir procéder à une intégration spectrale, il est nécessaire de définir comment varie réellement le coefficient d'absorption des gaz en fonction de la longueur d'onde. Pour cela, il existe de nombreux modèles de rayonnement des gaz plus ou moins appropriés à un besoin donné en précision et/ou en temps de calcul, élaborés et étudiés aux cours des trente dernières années [155, 60, 149]. Nous distinguerons quatre catégories de modèles allant du plus précis, le modèle raie par raie, aux plus grossiers, les modèles globaux.

2.2.4.1 Modèle “Raie-par-Raie” (LBL pour Line-By-Line)

Ce modèle est considéré comme la référence en terme de précision, intégrant une description du mécanisme de base du rayonnement des gaz : les transitions entre niveaux d'énergie. L'état moléculaire d'un gaz est caractérisé par les quatre types de niveau d'énergie suivant : translationnel, rotationnel, vibrationnel et électronique. Le spectre d'absorption est constitué des coefficients d'absorption/émission κ_{ν} , correspondant aux différentes transitions de niveau d'énergie par absorption/émission d'un photon. Les raies spectrales issues de ces transitions sont rattachées à des fréquences discrètes ν et corrigées par des profils d'élargissement.

On distingue trois principaux profils d'élargissement de raie. Le profil de raie de Doppler représente l'élargissement par effet Doppler qui provient du fait que la fréquence à laquelle on observe le phénomène d'absorption (ou émission de photon) diffère selon que l'on se place dans le référentiel moléculaire ou dans celui du laboratoire. Le profil de raie de Lorentz est dû aux collisions intermoléculaires qui ont pour effet de déplacer les niveaux d'énergie de celles-ci. C'est souvent la principale cause d'élargissement des raies dans les conditions de très fortes températures (fours, foyers). Le troisième type de profil rencontré est le profil de raie de Voight obtenu mathématiquement par produit de convolution des deux premiers types de profil, dans des conditions de température et de pression telles que les effets Doppler et Lorentz sont du même ordre de grandeur.

Avec l'aide de ces différents types de profil, on définit la fonction $F(\nu - \nu_i)$ représentant le profil de raie normalisé associé à une raie centrée en ν_i . Pour chaque raie i , on introduit la notion

d'intensité de raie intégré S_i^{raie} donnée par la mécanique quantique telle que :

$$S_i^{raie} = g_1 B_{12} \frac{\exp(-E_1/k_b T)}{Q_p(T)} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_i}{k_B T}\right) \right] h\nu_i \quad (2.86)$$

où les indices 1 et 2 représentent les niveaux bas et haut de la transition i , g_1 le degré de dégénérescence de ce niveau bas, B_{12} le coefficient d'absorption d'Einstein de cette transition, k_B la constante de Boltzmann, E_1 le plus bas niveau d'énergie, $Q_p(T)$ la fonction de partition et ν_i la fréquence de transition de la raie i .

Le modèle LBL permet de reconstruire le spectre d'absorption/émission d'un mélange de gaz en déterminant à une fréquence donnée le coefficient d'absorption κ_ν résultant du recouvrement de l'ensemble des raies :

$$\kappa_\nu = \sum_{k=1}^{N_{espèces}} \sum_{i=1}^{N_{raies}} \frac{X_k p}{k_b T} S_{i,k}^{raie} F_{i,k}(\nu - \nu_i) \quad (2.87)$$

$X_k p$ est la pression partielle de l'espèce k dans un mélange de gaz. Le nombre N_{raies} de raies contribuant au calcul d'un coefficient d'absorption pouvant atteindre le million, les temps de calculs associés seront toujours trop importants pour envisager l'emploi d'un tel modèle sur des configurations réelles. Ce modèle sert avant tout d'outil de validation de modèles simplifiés beaucoup moins lourds et adaptables à certaines applications selon la précision nécessaire [128]. Ces modèles simplifiés consistent en un découpage du spectre en intervalles (ou « bandes ») plus ou moins larges. En fonction de cette largeur de bande, on distinguera trois grandes catégories de modèles : les modèles à bandes étroites, les modèles à bandes larges et les modèles globaux.

2.2.4.2 Modèles à bandes étroites

On appellera bande étroite un intervalle de fréquence sur lequel la luminance noire $L_{b,\nu}$ peut être considérée comme constante. Le principe d'un modèle à bandes étroites est de représenter la dépendance spectrale du coefficient d'absorption κ_ν comme une fonction simplifiée du nombre d'onde, afin de décrire l'essentiel de ce qui se passe sur un petit intervalle spectral recouvrant un grand nombre de raies. Les modèles les plus utilisés sont des modèles statistiques donnant la transmittance moyenne sur une bande étroite $\Delta\nu$ pour une colonne de gaz homogène et isotherme de longueur l :

$$\bar{T}_{\Delta\nu}(l) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} e^{-\kappa_\nu l} d\nu \quad (2.88)$$

Ces transmittances moyennes ne sont jamais calculées directement à partir de cette expression. Leur formulation est généralement basée sur des grandeurs moyennées sur une bande étroite $\Delta\nu$, telles que le coefficient d'absorption moyen :

$$\bar{\kappa}_{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \kappa_\nu d\nu \quad (2.89)$$

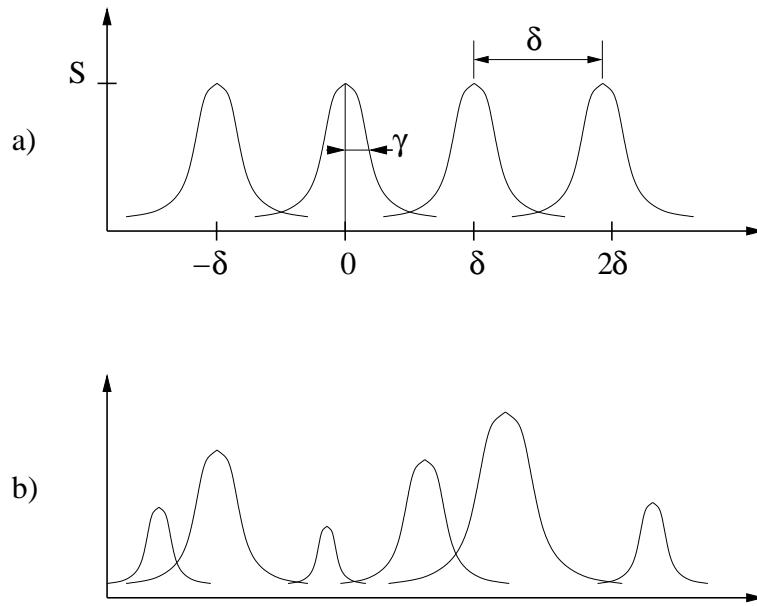


FIG. 2.9 – Raies d'absorption distribuées (a) selon un modèle régulier (type Elsasser) et (b) selon un modèle aléatoire (type Goody)

$\bar{\gamma}$ étant la demi-largeur à mi-hauteur moyenne des raies et $\bar{\delta}$ l'écartement moyen entre deux raies successives sur une bande étroite (cf. Fig.2.9(a)), un paramètre de forme $\bar{\beta}$ peut être défini par :

$$\bar{\beta} = 4 \frac{\bar{\gamma}}{\bar{\delta}} \quad (2.90)$$

Le **modèle à bandes étroites d'Elsasser** (1943) considère que toutes les raies ont la même largeur et sont régulièrement espacées (cf. Fig.2.9(a)). Ceci permet d'écrire l'expression de la transmittance moyenne de la façon suivante :

$$\bar{T}_{\Delta\nu} = \frac{1}{2} \int_0^2 \exp \left[\frac{-\kappa_{\Delta\nu} l \sinh(\frac{\pi\bar{\beta}}{2})}{\cosh(\frac{\pi\bar{\beta}}{2}) - \cosh(\frac{\pi z}{2})} \right] dz \quad (2.91)$$

Le **modèle à bandes étroites de Goody** (cf Fig.2.9(b)) considère des raies de Lorentz espacées aléatoirement et exprime la transmittance moyenne sur une bande étroite de la façon suivante :

$$\bar{T}_{\Delta\nu} = \exp \left[\frac{-\bar{\kappa}_{\Delta\nu} l}{\sqrt{1 + \frac{-\bar{\kappa}_{\Delta\nu} l}{\bar{\beta}}}} \right] \quad (2.92)$$

Le **modèle à bandes étroites de Malkmus** propose pour un même type de raies, espacées en moyenne de $\bar{\delta}$, une formulation où chaque bande étroite est paramétrée par deux grandeurs : le coefficient d'absorption moyen $\bar{\kappa}$ et le facteur de forme Φ . Ce modèle sera plus amplement abordé au § 2.3.2.

2.2.4.3 Modèles à bandes larges

Les modèles à bandes larges, plus grossiers, découpent le spectre en un plus petit nombre de bandes dont la largeur $\Delta\nu$ est de plusieurs centaines de cm^{-1} , se plaçant au delà de la limite de validité de l'hypothèse d'indépendance fréquentielle de la fonction de Planck sur une bande. Obtenus à une autre échelle, les modèles à bandes larges ont pour objectif de décrire les variations des paramètres moyens tel que l'intensité de raie moyenne $\bar{S}_{\Delta\nu}/\delta_{\Delta\nu}$ ou le coefficient d'absorption moyen $\bar{\kappa}_{\Delta\nu}$ sur toute la bande large. Les deux modèles les plus connus sont : le modèle à bande large d'Edwards et le modèle théorique dit “Rigid Rotator, Harmonic Oscillator” [113]. On ajoutera les modèles formulés en k-distribution appliqués sur des bandes spectrales très larges.

2.2.4.4 Modèles globaux

Les modèles globaux permettent de représenter tout le spectre d'un gaz avec un minimum d'informations telle que l'émissivité totale ϵ ou la transmittance totale $\bar{T}_{0\rightarrow\infty}$ du gaz. Les modèles les plus simples permettent ainsi de définir pour un gaz une émissivité constante sur toute le spectre : on dit alors que le gaz est gris.

Hottel [67] présente ceci sous forme d'abaques établies en fonction des grandeurs thermodynamiques P , T et de la fraction molaire X_k , pour des milieux homogènes et isothermes. On peut aussi citer le modèle « somme pondérée de gaz gris » (WSGG pour « weighted sum of grey gas ») de Modest [110] amélioré par Denison et Webb dans le modèle SLW (pour « Spectral Line-based Weighted-sum-of-grey-gas »)[42, 41]. Ce modèle consiste à représenter le comportement d'un gaz par rapport aux variations des grandeurs thermodynamiques comme une somme pondérée des grandeurs représentatives de plusieurs gaz gris. Une logique similaire a donné naissance à des modèles plus récents tels que l'ADF (Absorption Distribution function) et l'ADF-FG (Absorption Distribution function - Fictitious gas) développés par Pierrot et al. [127, 128].

On dispose donc d'un grand éventail de modèles permettant de représenter les propriétés radiatives de mélanges de gaz de façon plus ou moins précise mais aussi, en contrepartie, plus ou moins coûteuses en temps de calcul.

2.3 Modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés (SNB- ck)

Dans notre étude, nous avons fait le choix d'utiliser le modèle à bandes étroites de Malkmus. Pour pouvoir intégrer ce modèle dans une méthode de type différentiel telle que la méthode aux ordonnées discrètes, nous aurons besoin d'une description du spectre en variable κ_ν . Afin de

pouvoir traduire la transmittance moyenne du modèle de Malkmus en coefficients d'absorption, nous utilisons ce qu'on appelle la méthode des k -distributions. Le modèle reposant sur une telle procédure est appelé « modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés » (SNB- ck) et a fait l'objet de nombreuses études. Nous devons notamment à Liu et al. des travaux très intéressants permettant d'optimiser l'application de ce modèle [85, 86, 89, 90, 92, 93, 95, 96]. Goutière et al. ont mené des études comparatives permettant de déduire que le modèle SNB- ck est le modèle de rayonnement de gaz proposant le meilleur compromis entre précision et temps de calculs, à l'heure actuelle [61, 62].

2.3.1 Méthode des k -distributions

Prenons F , une fonction du coefficient d'absorption κ_ν et définissons l'intégrale I de la façon suivante :

$$I = \int_{\Delta\nu} L_{b,\nu} F(\kappa_\nu) d\nu \quad (2.93)$$

où $L_{b,\nu}$ est la fonction de Planck dépendant de la température mais aussi de la fréquence du rayonnement. Si l'intervalle fréquentiel $\Delta\nu$ est suffisamment étroit, on peut écrire :

$$I \simeq \overline{L_{b,\Delta\nu}} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \overline{L_{b,\Delta\nu}} \cdot \Delta\nu \cdot \overline{F_{\Delta\nu}} \quad (2.94)$$

où

$$\overline{F_{\Delta\nu}} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu \quad (2.95)$$

Cette égalité sous-entend que $L_{b,\nu}$ peut être considérée comme constante sur cette bande étroite de fréquence ou, du moins, que sa variation est négligeable sur l'intervalle d'étude $\Delta\nu$.

Afin d'éviter la lourdeur liée à la résolution d'un spectre peu organisé obtenu à partir d'un modèle raies par raies, G.A. Domoto a présenté en 1974 [45] le principe des k -distributions dont le but est de se libérer de la dépendance en fréquence de κ_ν , en utilisant la fonction de distribution des coefficients d'absorption $f(\kappa)$. $f(\kappa)$ représente alors la densité de probabilité de trouver la valeur κ sur l'intervalle $\Delta\nu$. Si l'on considère une bande étroite $\Delta\nu$ suffisamment petite pour que κ_ν soit une fonction de $\nu(\kappa)$ monotone, alors on peut définir sa fonction inverse $\nu(\kappa)$. $f(\kappa)$ est alors simplement définie par :

$$f(\kappa) = \frac{1}{\Delta\nu} \left| \frac{d\nu}{d\kappa} \right| \quad (2.96)$$

Cette hypothèse n'est jamais vérifiée lorsqu'il s'agit de spectres de raies, même dans le cas de modèle à bandes étroites où chaque bande contient un grand nombre de raies (spectre non monotone). On peut néanmoins généraliser cette définition en découplant cette bande étroite $\Delta\nu$ en

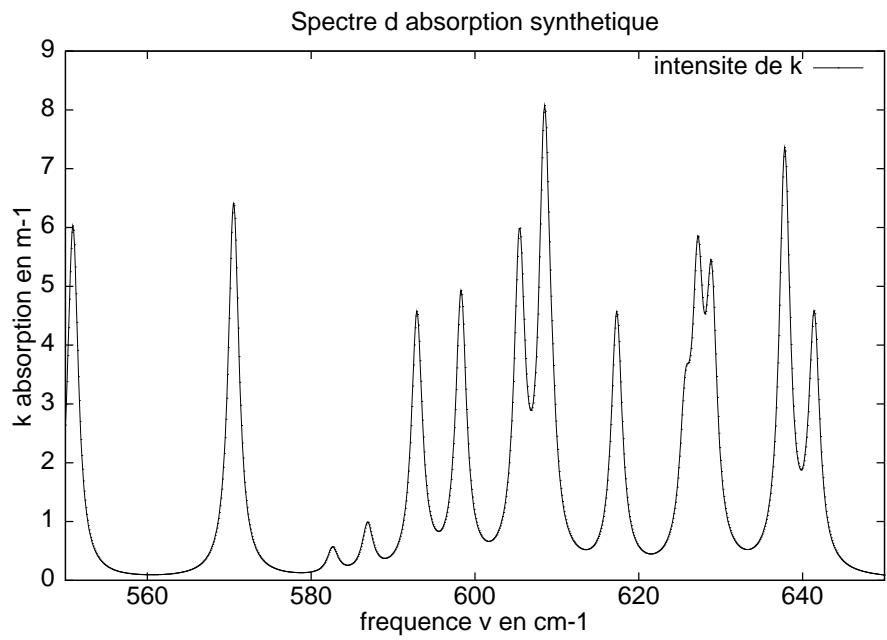


FIG. 2.10 – Spectre d'absorption synthétique obtenu par élargissement de raies définies de manière aléatoire

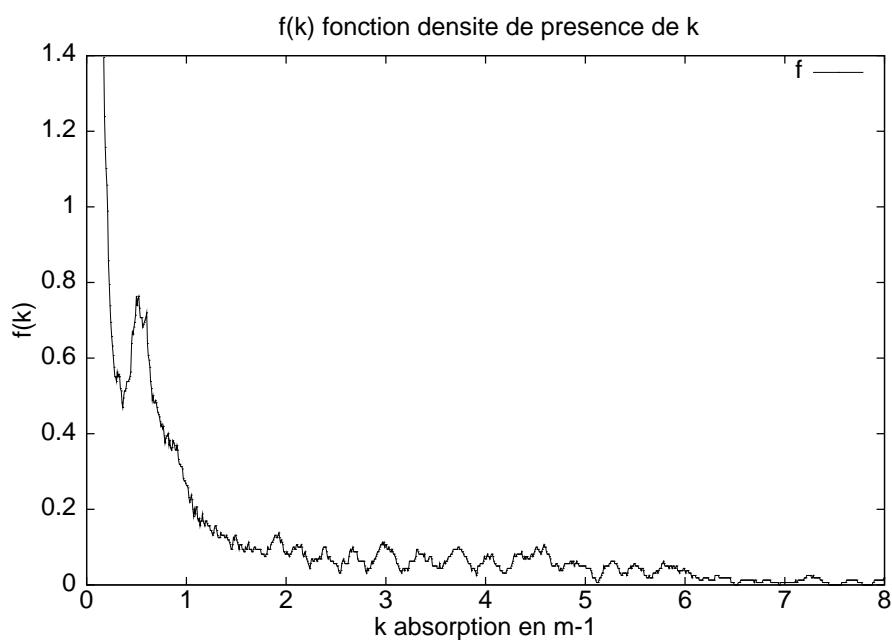


FIG. 2.11 – Fonction $f(k)$ pour le spectre d'absorption synthétique de la Fig.2.10

N sous-intervalles où $\kappa(\nu)$ est monotone avec pour chaque sous intervalle i une valeur minimum $\kappa_{min,i}$ et une valeur maximum $\kappa_{max,i}$ ainsi qu'une fonction inverse $\nu_i(\kappa)$. La densité de probabilité s'écrit alors :

$$f(\kappa) = \sum_i^N \frac{1}{\Delta\nu} \left| \frac{d\nu_i}{d\kappa} \right| \times \{h[\kappa - \kappa_{min,i}] - h[\kappa_{max,i} - \kappa]\} \quad (2.97)$$

où h représente la fonction échelon unité [60].

Dès lors, sans se soucier de la fréquence à laquelle correspond une valeur de κ_ν , on a une possibilité d'intégrer sur κ et non sur ν . **Cela a pour conséquence de faire perdre l'information sur la fréquence (ou les fréquences) d'une valeur de κ donnée pour ne conserver finalement que la probabilité de rencontre de cette valeur de κ sur toute la bande d'étude $\Delta\nu$** (Fig.2.11). Il est important de rappeler que la dépendance fréquentielle dans un problème de rayonnement est double au départ : le spectre d'absorption est décliné en fonction de ν et la fonction de Planck est aussi soumise à cette dépendance. Cependant l'hypothèse de bande étroite permet de nous libérer de cette deuxième contrainte puisque l'on considère un intervalle d'étude suffisamment étroit pour prendre $L_{b,\nu}$ indépendant de ν et donc la seule dépendance en ν est celle des κ . Cette dernière assertion n'est plus problématique une fois que l'on écrit la valeur moyenne de la fonction $F(\kappa_\nu)$ sous une forme probabiliste à partir des équations (2.95) et (2.96) :

$$\bar{F}_{\Delta\nu} = \int_0^\infty F(\kappa) f(\kappa) d\kappa \quad (2.98)$$

On transforme ainsi l'intégrale (2.95) sur ν en une intégrale sur κ . Il est nécessaire de connaître $f(\kappa)$ pour obtenir un outil effectif, ce qui est possible à partir du spectre détaillé en se servant de l'équation (2.97).

Le modèle de Malkmus est un modèle permettant d'obtenir de manière analytique \bar{T} à partir de certaines propriétés de spectres répondant à des hypothèses précises. En appliquant (2.98) à l'équation (2.57) ($\beta_\nu = \kappa_\nu$ pour un milieu absorbant), on obtient la transmittance moyenne sur une bande étroite telle que :

$$\bar{T}_{\Delta\nu}(l) = \int_0^\infty \exp(-\kappa l) f(\kappa) d\kappa \quad (2.99)$$

Domoto [45] a montré qu'il était possible, à partir des modèles de transmittance moyenne, de déterminer $f(\kappa)$, en observant que $\bar{T}_{\Delta\nu}$ est une transformée de Laplace de f qui peut donc s'écrire :

$$f(\kappa) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{T}_{\Delta\nu}(l)) \quad (2.100)$$

$f(\kappa)$ est donc aussi appelée fonction transmittance inverse. Sauf cas particulier, l'allure de cette fonction $f(\kappa)$ n'est pas monotone. A deux valeurs différentes de κ peut correspondre une même

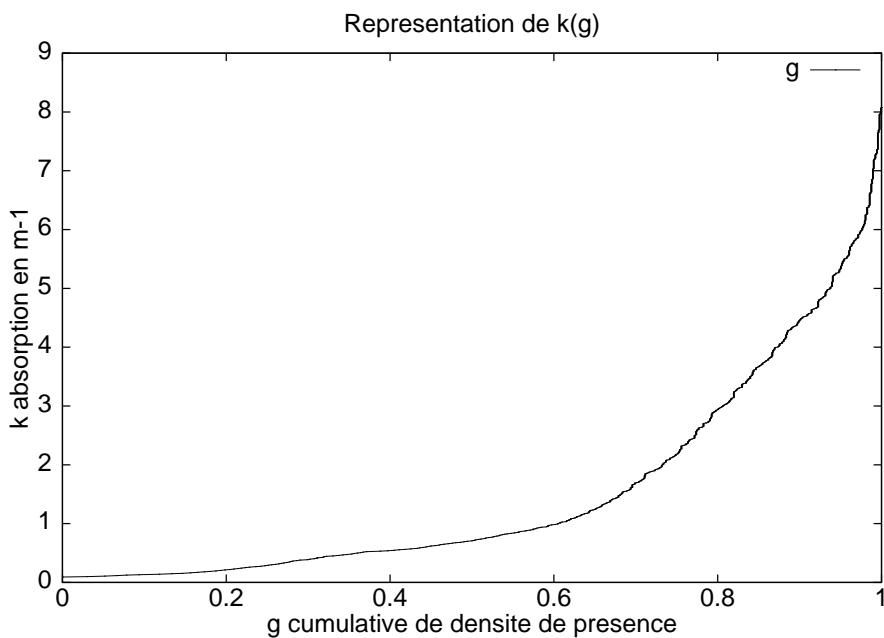


FIG. 2.12 – Fonction $g(k)$ pour le spectre d’absorption synthétique de la figure Fig.2.10

densité de probabilité $f(\kappa)$. Il s’avère plus commode d’introduire la fonction bijective $g(\kappa)$ suivante :

$$g(\kappa) = \int_0^\kappa f(\kappa') d\kappa' \quad (2.101)$$

Cette fonction $g(\kappa)$ est appelée fonction cumulative de la densité de probabilité de κ ou fonction de répartition. Elle est monotone, croissante et définie sur l’intervalle $[0, 1]$, ce qui permet d’obtenir facilement la fonction inverse $\kappa(g)$. Pour toute fonction $F(\kappa)$, on peut obtenir à partir des équations (2.98) et (2.101) :

$$\bar{F}_{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \int_0^1 F(\kappa(g)) dg \quad (2.102)$$

Ceci revient à effectuer un réarrangement de la fonction sur le spectre d’absorption pour la bande $\Delta\nu$ en ordonnant par rapport à la variable g . On peut donc aussi obtenir $\kappa(g)$ en procédant à une réorganisation du spectre raie par raie (ceci est à l’origine du modèle *ck* [146]).

Le véritable intérêt de cette fonction $\kappa(g)$ tient dans le fait que l’on peut en faire une simple approximation puisqu’elle est monotone et croissante sur un intervalle $[0, 1]$. La résolution numérique de cette intégrale en fonction de g (2.102) peut être faite par une méthode statistique ou par une quadrature de Gauss. Dans ce dernier cas on aboutit à une formulation discrétisée :

$$\bar{F}_{\Delta\nu}(l) = \sum_{n=1}^N w_n F(\kappa(g_n)) \quad (2.103)$$

où g_n et ω_n sont respectivement les points de quadrature et les poids associés.

Connaissant la fonction de répartition $g(\kappa)$, la détermination des $\kappa(g_n)$ peut se faire par une méthode simple de résolution d'équation implicite (ex : dichotomie ou Newton-Raphson amélioré [92]). La fonction $\kappa(g)$ étant continue et monotone, sa quadrature est beaucoup plus aisée et requiert moins de points de définition qu'une méthode « raie par raie », pour de représenter le spectre. En première approximation, le gain informatique de la méthode des k -distributions par rapport à la méthode « raie par raie » est donné par le nombre de raies pouvant être contenues dans l'intervalle spectral $\Delta\nu$ choisi et qui peut atteindre une valeur de l'ordre de 10^4 .

2.3.2 Modèle SNB de Malkmus et Distribution Inverse Gaussienne

Le modèle statistique à bandes étroites (SNB) de Malkmus [102] s'avère très représentatif du type de regroupement de raies les plus fréquemment rencontrés en combustion. Beaucoup de recherches effectuées dans le domaine du rayonnement infrarouge dans les milieux gazeux sont basés sur ce modèle. J.Taine et A.Soufiani [146] l'ont notamment utilisé dans leurs études et ont produit des banques de données SNB utilisables que l'ont présente au §2.3.3. Ce modèle est établi sur les hypothèses suivantes :

- les intensités de raies sont distribuées selon la loi de densité de probabilité suivante :

$$p(S) = \frac{1}{S^*} \exp\left(-\frac{S}{S^*}\right) \quad (2.104)$$

où S^* est l'intensité moyenne ;

- toutes les raies ont la même demi-largeur à mi-hauteur $\bar{\gamma}$;
- les centres de raies sont distribués de façon uniforme ;
- le nombre de raies N contenu dans la bande $\Delta\nu$ est suffisamment élevé pour permettre une représentation statistique.

On définit $\bar{\kappa}_{\Delta\nu}$, la valeur moyenne du coefficient d'absorption obtenue par la relation (2.89), comme étant reliée à l'intensité moyenne des raies, par l'égalité suivante :

$$\bar{\kappa} = \frac{S^*}{\bar{\delta}} \quad (2.105)$$

où $\bar{\delta}$ est l'écart moyen entre deux centres de raie contigus.

On introduit Φ appelé le paramètre de forme ou de séparation des raies défini par :

$$\Phi = \frac{2\bar{\gamma}}{\bar{\delta}} \quad (2.106)$$

Φ permet d'évaluer si le spectre d'absorption est composé de raies étroites ou élargies et si les centres de ces raies sont très espacés. Dans le cas de raies étroites, l'absorption est très localisée sur l'espace fréquentiel. Des raies très élargies, se recouvrant grâce à une grande proximité, correspondent à un spectre qui tendra vers celui d'un milieu gris.

Le modèle de Malkmus propose de reconstruire analytiquement la transmittance moyenne d'une bande étroite $\Delta\nu$, sur une épaisseur de gaz l , en utilisant ces deux paramètres $\bar{\kappa}$ et Φ :

$$\bar{T}_{\Delta\nu}(l) = \exp \left[\Phi \left(1 + \left(1 + \frac{2\bar{\kappa}l}{\Phi} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (2.107)$$

A partir de ce modèle, une méthode de k-distribution peut être construite. Afin de déterminer la fonction densité de probabilité $f(\kappa)$, Domoto [45] propose de calculer la transformée de Laplace inverse de $\bar{T}(l)$, en appliquant la relation (2.100) à l'expression (2.107) :

$$f(\kappa) = \sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}}{2\pi\kappa^3}} \exp \left[-\frac{\Phi}{2} \frac{(\kappa - \bar{\kappa})^2}{\bar{\kappa}\kappa} \right] \quad (2.108)$$

La fonction transmittance inverse $f(\kappa)$ a la forme d'une distribution inverse Gaussienne. Il existe de très nombreux écrits sur les propriétés statistiques des distributions inverses Gaussiennes. En particulier, on sait que la fonction de répartition s'écrit :

$$g(\kappa) = \int_0^\kappa f(\kappa') d\kappa' = \operatorname{erf} \left[-\sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}}{\kappa'}} \left(1 - \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} \right) \right] + \exp(2\Phi) \operatorname{erf} \left[-\sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}}{\kappa'}} \left(1 + \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} \right) \right] \quad (2.109)$$

Une présentation succincte des propriétés de cette distribution est proposée dans l'article de Dufresne, Fournier et Grandpeix paru en 1999 [47].

Cependant, la méthode des k-distributions s'appuie sur la connaissance de la fonction $\kappa(g)$. L'expression de $g(\kappa)$ (2.109) n'est pas analytiquement inversible à première vue. Il est donc nécessaire de faire appel à des méthodes numériques d'inversion ou de recherche de racine pour obtenir $\kappa(g)$. Nous présentons l'allure de la fonction $\kappa(g)$ (Fig.2.13) obtenue graphiquement par une simple inversion d'axe.

Une interprétation de cette figure peut se faire sur les deux cas extrêmes : $\Phi=100$ et $\Phi=10^{-1}$. Dans le premier cas, $\Phi=100$, les recouvrements de raies sont très importants ce qui correspond à un milieu gris et il n'existe quasiment qu'une valeur de $\kappa(g)$ possible. Dans le deuxième cas, $\Phi=10^{-1}$, les faibles valeurs de κ sont très probables, ce qui correspond aux espaces entre raies. Les centres de raies rencontrés très rarement ont par contre une très forte contribution à la valeur moyenne $\bar{\kappa}$. Remarquons que seul Φ influence l'allure générale de la fonction $\kappa(g)$ puisque $\bar{\kappa}$ ne fixe en fait que la moyenne des valeurs de κ que l'on observe en ordonnée.

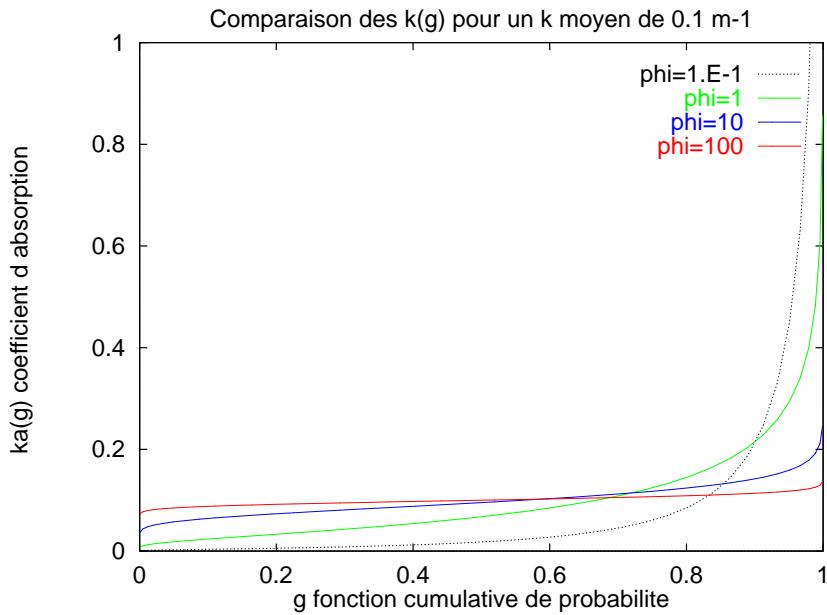


FIG. 2.13 – $\kappa(g)$ obtenue par inversion d’axe a partir du tracé de $g(\kappa)$ pour différentes valeurs de Φ

2.3.3 Banque de Données SNB

Pour nos applications, les espèces rayonnantes qui a priori pourraient contribuer aux transferts radiatifs sont CH_4 , OH , H_2O , CO_2 et CO . Les trois dernières espèces citées ayant les contributions les plus significatives, nous ne prendrons pas en compte dans notre étude l’effet des concentrations en CH_4 et OH au niveau spectral. Pour modéliser le rayonnement des gaz nous avons utilisé les données spectroscopiques fournies par J.Taine et A.Soufiani du laboratoire EM2C de Paris [146]. Cette banque de données fournit deux des trois paramètres importants du modèle de Malkmus : $\bar{\kappa}$ et $\bar{\delta}$. Ces données ont été obtenues par une méthode d’ajustement aux moindres carrés de la transmittance moyenne sur une bande étroite calculée à différentes épaisseurs optiques à partir d’un modèle raie-par-raie. Dans le cas de la vapeur d’eau, la banque de données fournit les paramètres intensifs $\bar{k} = \frac{\bar{\kappa}}{p_j}$ (où p_j est une pression partielle) et $(\bar{\delta})^{-1}$ pour des valeurs discrètes de température allant de $300K$ à $2900K$ par pas de $200K$, et ce pour 367 bandes étroites de largeur $\Delta\nu = 25 \text{ cm}^{-1}$ découpant une plage du spectre comprise entre 150 cm^{-1} et 9300 cm^{-1} . Pour CO_2 , les mêmes paramètres ne sont fournis que sur 96 de ces 367 bandes étroites (sur 4 plages spectrales : $450 \rightarrow 1200 \text{ cm}^{-1}$, $1950 \rightarrow 2450 \text{ cm}^{-1}$, $3300 \rightarrow 3800 \text{ cm}^{-1}$ et $4700 \rightarrow 5250 \text{ cm}^{-1}$). Le CO_2 peut être considéré comme étant transparent dans les régions manquantes. Pour le CO , les paramètres sont fournis pour 48 de ces bandes étroites s’étalant sur deux courtes plages spectrales : $1750 \rightarrow 2335 \text{ cm}^{-1}$ et $3775 \rightarrow 4350 \text{ cm}^{-1}$.

Le paramètre $\bar{\gamma}$ (en cm^{-1}) est supposé identique pour toutes les bandes étroites d’un gaz absorbant. Les auteurs de cette banque de données propose de calculer ce paramètre à l’aide des trois

formulations suivantes, fonctions de la température T , de la pression totale P , et des fractions molaires X des principaux gaz d'un mélange pouvant être influents, c'est-à-dire N_2 , O_2 , H_2O , CO_2 et CO :

$$\bar{\gamma}_{H_2O} = \frac{P}{P_S} \left[\left(\frac{T_S}{T} \right)^{0.5} \times \left[0.079(1 - X_{CO_2} - X_{O_2}) + 0.106X_{CO_2} + 0.036X_{O_2} \right. \right. \\ \left. \left. + 0.462X_{H_2O} \left(\frac{T_S}{T} \right) \right] \right] \quad (2.110)$$

$$\bar{\gamma}_{CO_2} = \frac{P}{P_S} \left(\frac{T_S}{T} \right)^{0.7} \left[0.07X_{CO_2} + 0.058(1 - X_{CO_2} - X_{H_2O}) + 0.1X_{H_2O} \right] \quad (2.111)$$

$$\bar{\gamma}_{CO} = \frac{P}{P_S} \left[0.075X_{CO_2} \left(\frac{T_S}{T} \right)^{0.6} + 0.06(1 - X_{CO_2} - X_{H_2O}) \left(\frac{T_S}{T} \right)^{0.7} \right. \\ \left. + 0.12X_{H_2O} \left(\frac{T_S}{T} \right)^{0.82} \right] \quad (2.112)$$

avec $T_S = 296$ K et $P_S = 1atm$.

Les données spectroscopiques \bar{k} (en $\text{cm}^{-1}\text{atm}^{-1}$) et $(\bar{\delta})^{-1}$ (en cm) étant fournies pour seulement 14 valeurs de température allant de 300 K à 2900 K, il est nécessaire d'effectuer une interpolation linéaire pour obtenir ces paramètres à une température T quelconque comprise entre T_i et T_{i+1} :

$$\bar{\kappa}(P, T, X_j) = P \cdot X_j \cdot \frac{\bar{k}_i(T_{i+1} - T_i) + \bar{k}_{i+1}(T - T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.113)$$

$$\bar{\delta}^{-1} = \frac{\bar{\delta}_i^{-1}(T_{i+1} - T_i) + \bar{\delta}_{i+1}^{-1}(T - T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.114)$$

Le paramètre $\bar{\kappa}_j = \bar{\kappa}(P, T, X_j)$ est obtenu en cm^{-1} .

On peut donc considérer un nombre $N_{bandes} = 367$ de bandes étroites découpant la plus grande plage spectrale sur laquelle les données sont fournies. Pour chaque bande i de gaz rayonnant considéré ($i = 1, \dots, N_{bandes}$), on aura les paramètres suivants :

- Pour H_2O : $\bar{\kappa}_i^{H_2O}$ et $\Phi_i^{H_2O}$
- Pour CO_2 : $\bar{\kappa}_i^{CO_2}$ et $\Phi_i^{CO_2}$
- Pour CO : $\bar{\kappa}_i^{CO}$ et Φ_i^{CO}

Pour les bandes où il n'y a pas de données pour le CO_2 ou le CO , nous considérerons $\bar{\kappa}_i^{CO_2} = 0$ ou $\bar{\kappa}_i^{CO} = 0$. Il est à noter qu'à 300 K, 98,8% de la luminance noire de Planck (cf. (2.34)) est

obtenue en intégrant l'équation (2.36) sur l'intervalle $[150 \text{ cm}^{-1}; 9300 \text{ cm}^{-1}]$. A 2900 K, seulement 70% de cette luminance est obtenue sur le même intervalle. Il sera donc nécessaire d'étendre la plage spectrale au delà de 9300 cm^{-1} dans notre étude, même si les propriétés radiatives ne sont pas fournies dans ce domaine. Nous considérerons que dans cette région étendue tous les gaz rayonnants sont transparents. .

2.3.4 Hypothèse des k -corrélés (ck)

La transmittance moyenne pour un spectre répondant aux conditions de Malkmus permet de traiter la majorité des problèmes lorsque le milieu est inhomogène et/ou anisotherme. Malheureusement, pour un spectre réorganisé, il n'est pas simple d'effectuer les transformations permettant de prendre en compte l'influence des inhomogénéités sur le spectre d'absorption initial. Il est donc nécessaire d'effectuer de nouvelles approximations pour parvenir à utiliser cette méthode de calcul qui s'avère efficace mais à sens unique ($\nu \rightarrow g$).

L'évaluation de l'intégrale (2.109) ne demeure valable que pour une température et une pression fixée. Si l'on veut prendre en compte des variations de température, pression ou concentrations d'espèces rayonnantes dans un milieu inhomogène il faut faire appel à ce que l'on appelle l'hypothèse des k corrélées (notée ck [60, 59]), cette hypothèse ayant donné naissance à la méthode ck . Les intensités des raies appartenant à un spectre d'absorption augmentant ou diminuant avec les variations de P et T , on est amené à supposer que ces fluctuations, le long du trajet du rayonnement, soit n'influent pas trop sur le spectre soit le modifient de manière uniforme. On admet ainsi que le long de chaque chemin optique, seule la valeur moyenne du coefficient d'absorption évolue et la forme de la distribution reste inchangée.

Cette hypothèse ck revient à admettre qu'en chaque point de l'espace le réarrangement ($\nu \rightarrow g$) est identique, ce qui est valable pour un spectre où toutes les raies se déforment de façon comparable (Fig.2.14(a)).

Dans le cas contraire (le plus courant pour un spectre observé dans un milieu caractérisé par de fortes variations de température : par exemple lors de l'observation à plusieurs kilomètres du panache à la sortie d'un réacteur), le long d'un trajet dans un milieu inhomogène, les raies d'absorption varieront de façon très différente (Fig.2.14(b)). Si le fait que les intensités et formes des raies soient modifiées n'empêche pas un passage à $f(\kappa)$ et/ou $g(\kappa)$, les informations perdues sur la localisation en fréquence des raies ne permettent plus de recalculer un nouveau spectre en un point B à partir d'un spectre $\kappa(g)$ connu en un point A. Dans de tels cas, on peut faire appel à la méthode CKFG ou méthode des « gaz fictifs en k -corrélés ». Cette méthode est basée sur un regroupement des raies d'un spectre par familles ayant le même comportement face à une forte variation du paramètre influent du milieu et ceci dans l'optique de pouvoir étudier séparément ces

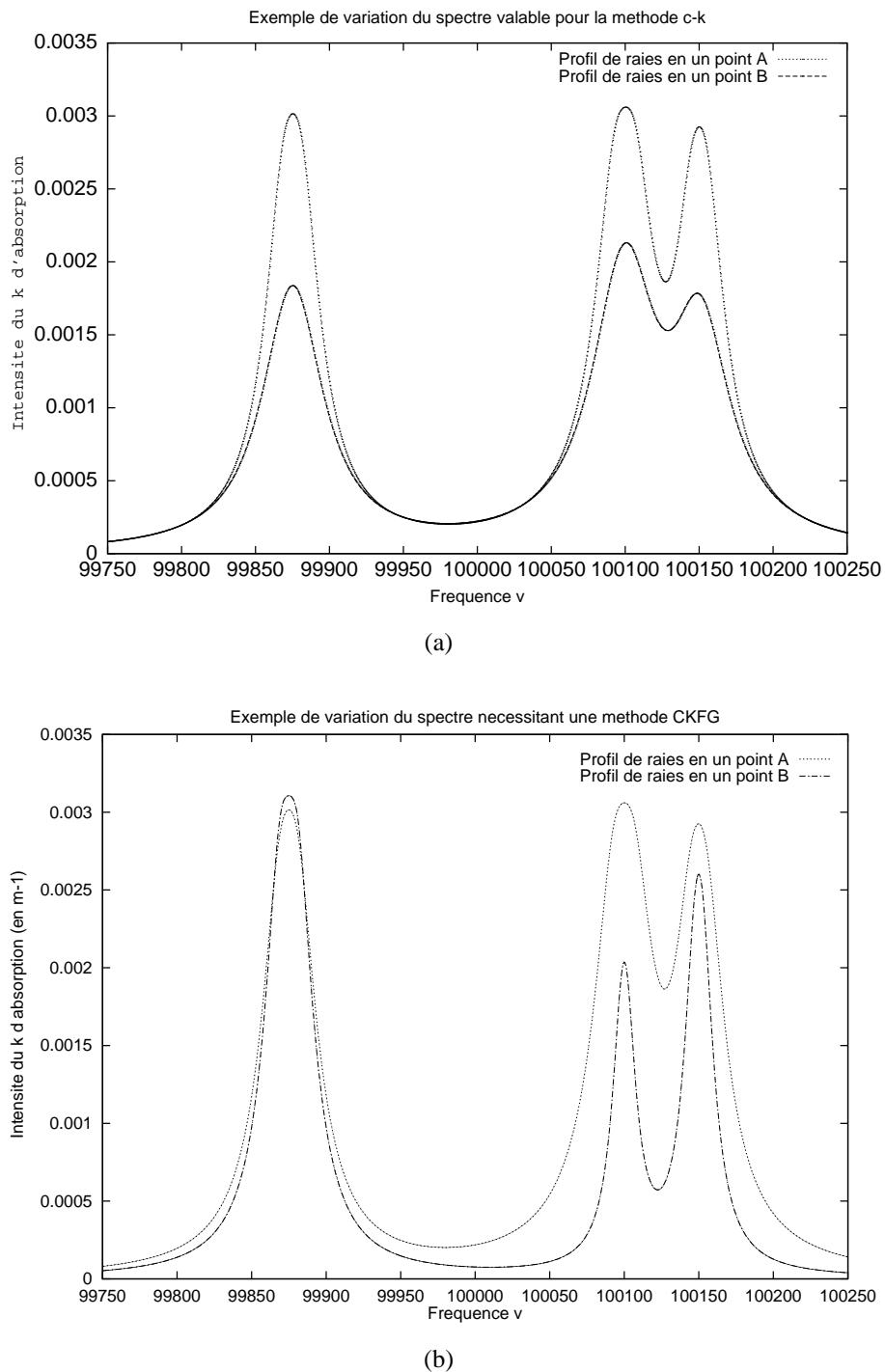


FIG. 2.14 – Comportement d'un spectre synthétique dans un milieu homogène : a) solvable par méthode *ck*, b) nécessitant une méthode *CKFG*

groupements considérés chacun comme un gaz fictif répondant parfaitement aux conditions nécessaires à l'utilisation d'une méthode ck . Ceci a pour finalité de ne travailler que sur un nombre limité N de gaz fictifs pour lesquels, le spectre de κ_ν variant de manière uniforme, on peut simuler simplement l'évolution du spectre de $\kappa(g)$ et ainsi optimiser l'étude des échanges radiatifs dans un milieu thermiquement inhomogène, par exemple. Cette méthode est reprise et amplement expliquée par Taine et Soufiani dans leur article de synthèse [149]. Des résultats convaincants ont été présentés pour des modèles CKFG à cinq et à huit gaz fictifs [135].

Cependant, pour des systèmes dont la taille ne dépasse pas la dizaine de mètres, l'hypothèse ck peut être faite. De nombreuses études ont ainsi été faites sur la base de ces méthodes de k -distributions corrélées. On citera, plus particulièrement, les travaux menés par Liu visant des applications du modèle SNB- ck en combustion [92, 94, 87, 91].

Il s'avère que plusieurs méthodes de calculs des transferts radiatifs par modèle de bande basés sur la transmittance moyenne donnent de façon plus directe de très bon résultats. Cependant, ces méthodes sont généralement de type intégral, ne permettant pas de prendre en compte de façon simple les propriétés radiatives d'un milieu discrétisé sur un maillage non structuré. De plus, les modèles de transmittance moyenne deviennent souvent inutilisables dès que l'on s'attaque aux problèmes de la diffusion. La méthode des k -distribution, faisant l'hypothèse ck , offre une technique de calcul radiatif en milieux inhomogènes pouvant être appliquée dans une région spectrale dans laquelle le spectre à une complexité arbitraire, à la simple condition que la fonction de Planck puissent y être considérée comme constante. Cela permet donc de produire un modèle de rayonnement des gaz formulé en κ pour les méthodes de type différentiel.

L'utilisation d'un modèle SNB- ck pour prendre en compte le rayonnement des gaz de la combustion dans une méthode aux ordonnées discrètes (de type différentiel) ne semble pas souffrir de contre-indication. De plus la formulation en bandes étroites se prête parfaitement à une parallélisation des calculs radiatifs.

Chapitre 3

Étude paramétrique de la flamme laminaire de diffusion

C'est en se basant sur une géométrie simple et suffisamment représentative de la physique de la combustion que l'on peut étudier l'importance du couplage entre le rayonnement et les écoulements réactifs et envisager le développement de nouvelles méthodologies de couplage. Notre objectif est de mener une étude paramétrique sur l'impact du rayonnement sur une flamme à jets opposés de CH_4/Air à pression atmosphérique : estimation de la température maximale, prédition des espèces rayonnantes (H_2O, CO_2 et CO) et des espèces polluantes mineures (NOx). Nous nous intéressons plus particulièrement à la contribution des différents transferts radiatifs en jeu (impact de la non adiabaticité et du phénomène de réabsorption du rayonnement thermique au sein d'une flamme). Deux modèles de rayonnement sont utilisés : un modèle détaillé basé sur la méthode Monte Carlo et un modèle couramment utilisé dans la littérature, le modèle OTL (Optically Thin Limit Model, cf. § 2.2.2.4). Cela nous a permis de déterminer les paramètres influents du problème et de définir les situations où une modélisation fine des transferts radiatifs est nécessaire. Le modèle détaillé de référence développé dans notre équipe, le « Taylor-Like-Model », s'appuie sur une nouvelle méthodologie de couplage basée sur les sensibilités [38, 40, 39] et utilise une modélisation fine des transferts radiatifs par une méthode Monte Carlo optimisé et une cinétique chimique détaillée (GRIMech 2.11¹ prenant en compte 48 espèces dans 279 réactions chimiques élémentaires). Les raisons du choix de la méthode Monte Carlo pour calculer les pertes radiatives S_r pour ce type de flamme sont diverses. La raison principale est la grande précision de cette méthode, coûteuse en temps de calcul mais accessible dans une géométrie et permettant d'intégrer toute la complexité spectrale du calcul. Nous avons pu ainsi déterminer les caracté-

¹http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/

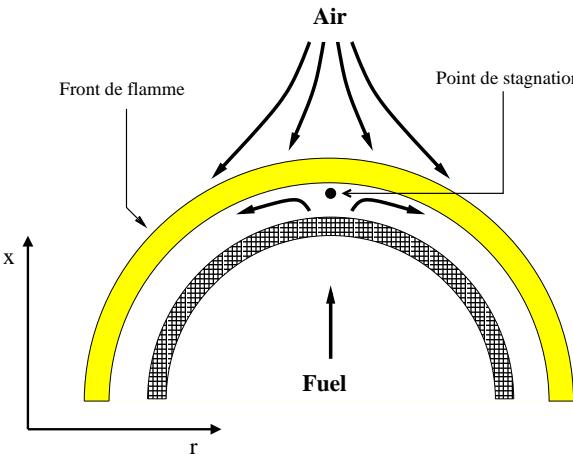


FIG. 3.1 – Brûleur de Tsuji

ristiques des flammes pour lesquelles le couplage rayonnement/cinétique chimique a une réelle influence et estimer quel est l'apport d'un modèle radiatif précis prenant en compte le phénomène de réabsorption au sein de ce type de flamme.

3.1 La flamme de diffusion laminaire monodimensionnelle

3.1.1 État de l'art

La « flamme de diffusion », par opposition à la « flamme de prémélange », est obtenue à partir d'un écoulement gazeux non prémélangé : combustible et comburant ne se rencontrent que sur le lieu de la flamme, ce qui présente au niveau industriel des avantages sécuritaires. Les flammes de diffusion sont étudiées en régime laminaire depuis le début du siècle dernier tant sur le plan théorique (Burke, 1928 [7]) que sur le plan expérimental (Tsuji et Yamaoka dans les années 70 [160], cf. Fig.3.1). Elles représentent un outil d'investigation et de compréhension indéniable en combustion. On peut classer ce type de flammes en deux sous-catégories : les flammes de diffusion à co-courant (**coflow jets diffusion flames**) et les flammes de diffusion à jets opposés (**opposed jets diffusion flames**) (Fig.3.2). Ces dernières présentent un intérêt particulier de par leur caractéristique monodimensionnelle et stationnaire.

Les études asymptotiques des flammes de diffusion à contre-courant débutent vers le milieu du siècle dernier avec les travaux de Zeldovitch [171], puis Spalding [147] et Linan [98]. Ce type d'analyse a encore été utilisé récemment par Liu et al. [94] pour mener une étude sur les limites d'extinction et de flammabilité des flammes de diffusion avec pertes radiatives (par une approximation de milieu optiquement mince).

Parallèlement, de nombreuses études numériques ont été effectuées sur la structure de ces flammes

et leurs limites d'extinction à fort et faible taux d'étirement [43, 44, 166]. Darabiha et al. ont calculé des flammes très étirées, c'est à dire soumise à de forts gradients de vitesse, en intégrant une cinétique chimique complexe [37, 35, 36]. On doit aussi citer les nombreux travaux effectués par Warnatz et Behrendt [2].

De nos jours, l'approche monodimensionnelle de la flamme de diffusion à jets opposés représente encore un outil indéniable pour la compréhension des mécanismes physico-chimiques liés à la combustion. En 1998, Blevins et Gore [5] ont essayé de comprendre les phénomènes liés à la formation de polluants dans ces flammes à faible taux d'étirement. Dans tous ces travaux cités, les transferts radiatifs n'ont pas été pris en compte ou traités de manière simple [6]. La perte d'énergie par rayonnement est le plus souvent réduite à un simple paramètre ajustable en fonction d'hypothèses sur la physique de l'écoulement comme l'a fait Tien [156], par exemple, en 1986, pour caractériser le mécanisme d'extinction par pertes radiatives des flammes faiblement étirées. On doit à Negrelli [117] les premiers calculs de flammes non-adiabatiques prenant en compte l'interaction convection/rayonnement dans le cas d'une flamme de diffusion. Certes, la chimie n'est pas détaillée (une seule équation) mais un modèle de gaz à bandes larges est utilisé, prenant en compte l'hétérogénéité du système et ses effets sur le phénomène de réabsorption. Il faut attendre le début des années 90 pour voir apparaître les premiers travaux sur le couplage entre le rayonnement et la combustion avec mise en oeuvre d'une cinétique chimique plus détaillée. Dagusé et al. [34] utilisent le modèle statistique à bandes étroites pour alimenter un modèle numérique basé sur une méthode de calcul des échanges radiatifs à partir de la formulation intégrale de l'ETR exprimée en transmittance. Par la suite [32, 33], ces mêmes auteurs ont aussi utilisé un modèle *ck* adapté au traitement des inhomogénéités en concentrations d'espèces rayonnantes. Une réelle procédure de couplage entre le rayonnement et la cinétique chimique dans laquelle le terme source radiatif n'est recalculé que lorsque cela est nécessaire (les critères fixés étant a priori des variations de la température de plus de 20K ou des fractions molaires de plus de 10%) est mise en oeuvre. Sivathanu et Gore [144, 145] ont aussi étudié le couplage entre le rayonnement et la cinétique des suies pour des flammes laminaires de diffusion à géométrie cylindrique en prenant en compte le phénomène de réabsorption.

Pourtant, de nombreuses études plus récentes menées sur les flammes de diffusion à jets opposées, se font toujours en utilisant le modèle OTL [64]. En faisant l'hypothèse que la flamme étudiée est un milieu optiquement mince, on considère que les pertes radiatives sont échangées avec le milieu ambiant, au delà de la condition d'adiabaticité dans la plupart des calculs en combustion. Les modèles d'émission radiative sont les seuls à être pris en compte et le phénomène de réabsorption est considéré comme négligeable. Très simple à mettre en oeuvre, le modèle OTL s'est avéré intéressant pour étudier des flammes de diffusion à jets opposés dans le cas de forts taux d'étirement. Law et Egolfopoulos [78] ont utilisé un modèle OTL basé sur des données de rayonnement des gaz

proposées par Tien dans les années 80 afin de modéliser les pertes radiatives pour des flammes de diffusion CH_4/Air non étirées. Ils ont ainsi pu observer l'influence de l'utilisation d'un modèle non adiabatique sur la vitesse de propagation d'une flamme en fonction de sa richesse. Chan et al. [17, 18] utilisent le modèle OTL où les coefficients d'absorption moyen pour un mélange de gaz sont fournis par le code RADCAL² pour les espèces CH_4 , H_2O , CO_2 et CO , afin d'étudier la structure de ce type de flamme. Une modélisation de la chimie cinétique plus détaillée est faite en utilisant le schéma de cinétique chimique GRIMech 2.11. Par la suite, Ju et al. [72, 104] ont étudié le domaine de flammabilité et d'extinction de flammes CH_4/Air à jets opposés, avec ou sans micro-gravité, en prenant en compte le rayonnement par un modèle OTL couplé à une chimie détaillée. Leur modèle OTL prenait en compte le rayonnement des espèces H_2O et CO_2 en se basant sur les données de Tien [155] pour calculer le coefficient d'absorption moyen du mélange. Intégrant ainsi les pertes d'énergies par rayonnement de façon suffisamment significative sans aucun lourdeur, de nombreux autres travaux, visant une compréhension et une modélisation plus juste des structures dynamiques et chimiques des flammes de diffusion à jets opposés, ont été menés en utilisant ce modèle OTL basé sur les données de Tien. Plus particulièrement, Park et al. ont étudié les effets de l'ajout de CO_2 [79] et de la dilution [119, 121, 120] sur des profils de concentrations d'espèces polluantes telles que les NO_x pour des flammes de CH_4/air ou de H_2/Ar en utilisant ce type de modèle OTL prenant en compte les données de Tien pour CH_4 , H_2O , CO_2 et CO associé à une cinétique chimique détaillée. Ces études numériques ont apporté beaucoup d'information sur la modélisation de la structure de ce type de flammes. Cependant il est à regretter l'absence de prise en compte du phénomène de réabsorption pour des flammes sachant que la dilution du fuel est faite par une espèce rayonnante (donc ayant un certain pouvoir d'absorption au niveau radiatif). Dans une autre étude, Ruan et al. [136] utilisent un modèle similaire en se basant sur la banque de données SNB (cf § 2.3.3) pour calculer un coefficient d'absorption moyen sur chaque bande étroite. Cette dernière approximation se justifie par le fait qu'ils cherchaient à étudier les effets du rayonnement pour des flammes de $CH_4/O_2/CO_2$ à haute pression (0.04 à 0.5 MPa).

Un autre modèle radiatif, basé sur les méthodes aux ordonnées discrètes exprimées pour un problème monodimensionnel, est utilisé en association avec cette même banque de données (prise en compte de la réabsorption). Une comparaison est faite entre l'expérience et les résultats numériques obtenus en utilisant ces deux modèles (OTL et DOM) pour prendre en compte le couplage rayonnement/cinétique chimique. Cette étude a confirmé la nécessité d'utiliser un modèle radiatif prenant en compte la réabsorption. De la même façon, récemment, Wang et Niioka ont étudié l'effet du rayonnement sur la formation de NO_x en utilisant la même approche comparative entre un

²Code calculant le coefficient d'absorption d'un mélange de gaz de combustion par un modèle à bandes étroites proposé par Grosshandler en 1992 - <http://fire.nist.gov/bfrlpubs/fire93/PDF/f93096.pdf>

modèle OTL et DOM montrant ainsi les faiblesses du modèle OTL à faible taux d'étirement. C'est dans cette même optique que nous avons cherché à mener notre étude paramétrique sur l'influence du couplage combustion/rayonnement sur la structures des flammes CH_4/Air .

On doit aussi mentionner les travaux expérimentaux menés par Beltrame et al. [3] sur la formation des suies et des NO dans des flammes de CH_4/Air . Le modèle numérique proposé pour représenter les flammes obtenues expérimentalement estime les pertes radiatives par un modèle OTL avec un modèle de rayonnement des gaz WSGG (cf. §2.2.4.4) et un modèle de rayonnement des suies. Cependant le phénomène de réabsorption du rayonnement est loin d'être négligeable pour des flammes contenant des suies. Dans ce domaine, Liu et al. ont montré un réel couplage entre le rayonnement des suies et leurs cinétique de formation. En se comparant à des résultats expérimentaux, ils ont utilisés un modèle OTL et un modèle DOM/SNB-*ck* pour réaliser un couplage avec une cinétique chimique complexe (GRIMech 3.0³ avec 219 réactions) et une cinétique de formation des suies. Les flammes de diffusion d'Ethylène/Air modélisées, dans le cadre des de leur travaux, sont des flammes à co-courant (à deux dimensions) [87] et des flammes à jets opposés [88]. Dans le cas de la flammes à co-courant, une comparaison des résultats obtenus avec les deux différents modèles de rayonnement avec l'expérience montre une grande importance du rayonnement des suies et l'influence de la réabsorption qui modifie la cinétique de formation. Au contraire, dans le cas d'une flamme à jets opposés, c'est le rayonnement des gaz qui est le plus prépondérant et joue un rôle sur le profil de température et le processus de formation des suies. L'apport du modèle radiatif plus détaillé (DOM) est cependant moins marqué.

Au delà de cette propriété d'outil d'investigation, les flammes laminaires de diffusion à jets opposés constituent aussi un élément clef dans la modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée ou partiellement prémélangée faisant appel au concept de la théorie des flammelettes [165, 124, 125, 126]. Dans ce concept, les flammes turbulentes (convectées et déformées par la turbulence) sont représentées par une collection de flammes laminaires monodimensionnelles à jets opposés que l'on identifie par leur taux de dissipation stoechiométrique local ξ (proportionnel au taux d'étirement)[30]. Ce concept a été utilisé par Yamashita et al. [167] pour prédire le taux de production de NO_x dans une flamme de diffusion turbulente à co-courant. Les résultats obtenus dans ces travaux montrent bien que les phénomènes physiques liée à la une flamme laminaire ne sont pas complètement différents de ceux d'un flamme turbulente prise à un instant t .

Nous avons porté une attention particulière aux résultats des travaux de Laurendeau et al. [115, 132, 133] qui ont étudié expérimentalement les flammes de diffusion CH_4/Air à jets opposés et effectué des mesures de concentrations de NO_x pour des flammes peu étirées par une technique de LIF (Laser Induced Fluorescence). Parallèlement, des calculs numériques ont été effectués

³http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/

avec deux schémas de cinétique chimique différents, l'un étant schéma cinétique GRImech 2.11 et l'autre obtenu en incluant une correction personnelle de l'auteur sur le schéma de formation des NO_x . La comparaison de leurs résultats expérimentaux avec les résultats numériques permet de conclure que la prise en compte des pertes radiatives permet de corriger les profils de concentration obtenus. Dans leur dernière étude, les résultats numériques obtenus en utilisant une cinétique chimique GRImech 3.0 et un modèle radiatif de type OTL sont en accord avec les profils de NO_x mesurés par deux méthodes expérimentales différentes (LIF et LSF - Laser Saturated Fluorescence) [115].

Dans notre travail sur la flamme monodimensionnelle, nous chercherons à évaluer, d'un point de vue qualitatif, l'importance des transferts radiatifs à l'échelle de la flamme de diffusion à jets opposés. Dans cette étude nous avons d'abord effectué une recherche des paramètres ayant le plus influence sur la température maximale atteinte au sein de la flamme puis mené observé leur influence sur le couplage combustion/rayonnement en utilisant un modèle OTL basé sur les données SNB de Taine et Soufiani (cf. 2.3.3). Une seconde étude, plus ciblée sur l'impact du phénomène de réabsorption du rayonnement par la flamme, utilise le modèle TLM (pour « Taylor-Like-Model ») et le modèle OTL sur quelques flammes type choisies à l'issue de la première étude.

3.1.2 Formulation monodimensionnelle

La flamme de diffusion à jets opposés est obtenue à partir de deux injecteurs de section identique. Les forces mises en opposition par ces deux jets se rencontrent et imposent une stabilisation de l'écoulement au « plan de stagnation » (lieu où la vitesse axiale s'annule, cf. Fig.3.2) et un étirement de la flamme qui résulte du gradient de vitesse. Le lieu de la flamme ne coïncide pas obligatoirement avec le plan de stagnation même si il n'en est pas très éloigné. Considérons la symétrie de révolution du problème pour écrire les équations en coordonnées cylindriques r et x . Nous noterons $\mathbf{v}(u, v)$ la vitesse en un point de l'écoulement. On écrit alors les équations de conservation (équations (2.20),(2.23),(2.24) et (2.28)) comme il suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho u)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0 \\ \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rr})}{\partial r} - \frac{\partial(r\tau_{rx})}{\partial x} = 0 \\ \rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho(u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rx})}{\partial r} - \frac{\partial(r\tau_{xx})}{\partial x} = 0 \\ \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho(u \frac{\partial Y_k}{\partial r} + v \frac{\partial Y_k}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho Y_k V_{d,k,r})}{\partial r} - \frac{\partial(\rho Y_k V_{d,k,r})}{\partial x} - \dot{\omega}_k = 0 \\ \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p(u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial x}) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \sum_{l=1}^K \rho Y_k V_{d,k,x} C_{pk} \frac{\partial T}{\partial x} + \mathbf{S}_r - \dot{\omega}'_T = 0 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

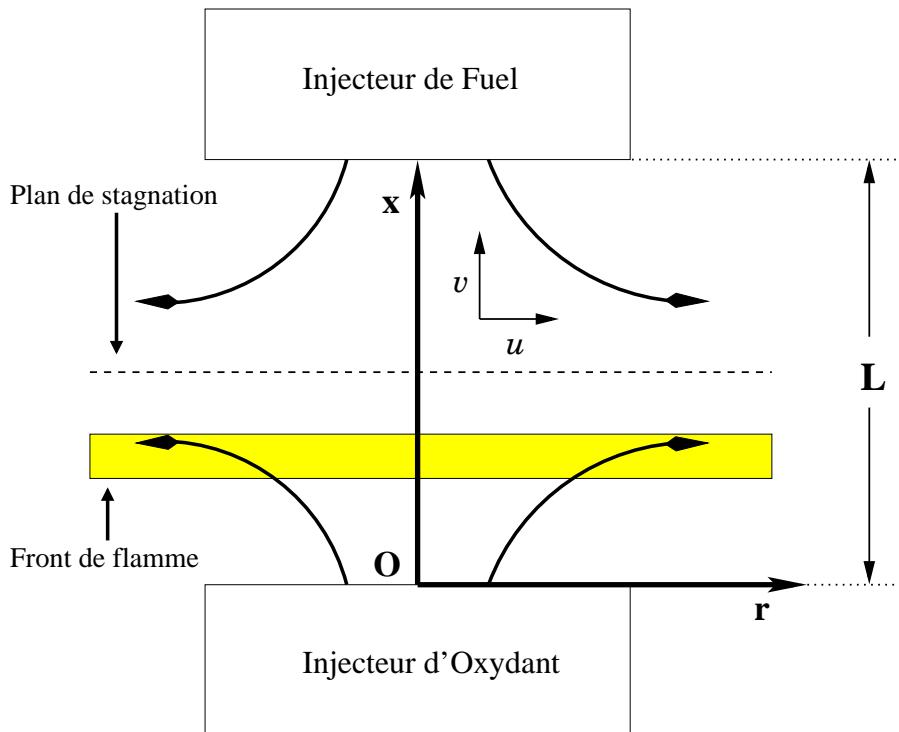


FIG. 3.2 – Flamme à jets opposés

où $V_{d,k,x}$ et $V_{d,k,r}$ sont respectivement les composantes axiale et radiale du vecteur vitesse de diffusion $\mathbf{v}_{d,k}$ de l'espèce k . On considère les hypothèses suivantes proposées par Warnatz et al.[164] :

- la température et les fractions massiques de toutes les espèces en jeu ne sont fonction que de la composante selon x ;
- v est fonction de x uniquement ;
- u est proportionnel à r ;
- la solution est considérée selon l'axe des x .

On définit :

- J_t , le gradient de pression tangentiel tel que :

$$J_t = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r}$$

- G_t , le gradient de vitesse tangentiel tel que :

$$G_t = -\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r}$$

- τ , le tenseur des contraintes visqueuses défini dans l'expression (2.22).

Le système d'équation devient alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + 2\rho G_t + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0 \\ \rho \frac{\partial G_t}{\partial t} + \rho G_t^2 + \rho v \frac{\partial G_t}{\partial x} + J - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (\mu \frac{\partial G_t}{\partial x}) = 0 \\ \rho \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{4}{3} \frac{\partial(\mu G_t)}{\partial x} - 2\mu \frac{\partial G_t}{\partial x} - \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\mu \frac{\partial v}{\partial x}) = 0 \\ \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \frac{\partial Y_k}{\partial x} - \frac{\partial(\rho Y_k V_{d,k,x})}{\partial x} - \dot{\omega}_k = 0 \\ \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v \frac{\partial T}{\partial x} - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_{d,k,x} C_{pk} \frac{\partial T}{\partial x} + \mathbf{S}_r - \dot{\omega}'_T = 0 \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Les conditions aux limites associées s'écrivent :

Coté Fuel :

$$\left\{ \begin{array}{l} u(L) = 0 \\ v(L) = v_F \\ Y_k(L) = Y_k^F \\ T(L) = T_F \end{array} \right.$$

Coté Air :

$$\left\{ \begin{array}{l} u(0) = 0 \\ v(0) = v_O \\ Y_k(0) = Y_k^O \\ T(0) = T_O \end{array} \right.$$

Pour résoudre ces équations avec une chimie complexe, nous avons eu recours au code de combustion OPPDIF de la suite logicielle CHEMKIN-II [101]. Ce code utilise un schéma de discréétisation spatiale aux différences finies et un algorithme itératif fondée sur une méthode de Newton

et incluant une procédure de maillage adaptatif. Cette méthode itérative de Newton converge plus rapidement en partant d'une solution déjà connue dans des conditions proches de celles de la flamme que l'on souhaite modéliser. La résolution du système nécessite le calcul de la matrice Jacobienne pour résoudre dans un premier temps le système constitué des quatre premières équations à profil de température fixé. Puis, à partir de cette première solution, l'équation de l'énergie est résolue et la solution générale est calculée.

La description des cinétiques chimiques est contenue dans des tables fournissant les trois coefficients d'Arrhenius (cf. 2.14). Le schéma que nous avons utilisé dans notre étude paramétrique est GRIMech 2.11. La librairie de routines de CHEMKIN-II permet d'interpréter ce genre de tables de cinétiques chimiques et de calculer toutes les propriétés thermochimiques et les propriétés de transport de l'écoulement.

3.1.3 La Richesse

La caractérisation d'une flamme de combustion se fait d'abord par l'identification des espèces les plus significatives qui permet d'obtenir la flamme : le Fuel **F** contenu dans le combustible et l'oxydant **O** contenu dans le comburant tels que :



On définit alors la fraction massique stoechiométrique :

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{stoech.} = \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} \quad (3.4)$$

ou W_O et W_F sont respectivement les masses molaires de l'Oxydant et du Fuel.

Pour la flamme de diffusion les espèces réactives sont amenées séparément par des injecteurs où la fraction massique et les débits ne sont pas obligatoirement identiques. Si on établit que le Fuel est amené par l'injecteur 1 et que l'Oxydant arrive par l'injecteur 2, on peut alors définir la richesse d'une flamme laminaire de diffusion à jets opposés en prenant en compte les fractions massiques aux injecteurs respectifs de la façon suivante :

$$\Phi = s \cdot \frac{Y_{1,F}}{Y_{2,O}} \quad (3.5)$$

$Y_{1,F}$ est la fraction massique de combustible à l'injecteur 1 et $Y_{2,O}$ la fraction massique d'oxydant à l'injecteur 2. Les réactifs peuvent être dilués : notamment, du côté de l'injecteur 2, l'oxydant sera uniquement l'oxygène, représentant 21% de la composition du mélange *Air*. Cette définition de la richesse caractérise la structure locale de la flamme à l'endroit où les réactifs se rencontrent

en restant équivalente à la richesse d'une flamme de prémélange. Il est donc plus judicieux de s'appuyer sur cette définition, puisqu'on s'intéressera à des phénomènes physiques intervenants dans la région de la flamme (notamment la réabsorption du rayonnement par les produits de combustion).

Une autre définition de la richesse pour un brûleur à deux injecteurs prend en compte les débits \dot{m}_F^1 et \dot{m}_O^2 des réactifs amenés par ces deux derniers. On définit ainsi la richesse globale Φ_g :

$$\Phi_g = s \cdot \frac{\dot{m}_F^1}{\dot{m}_O^2} \quad (3.6)$$

qui peut s'écrire aussi, dans le cas où les injecteurs de comburants ont la même surface de section :

$$\Phi_g = s \cdot \frac{\rho_1 Y_{1,F} v_1}{\rho_2 Y_{2,O} v_2} \quad (3.7)$$

3.1.4 Le Taux d'étirement

Un autre paramètre permettant de caractériser les flammes de diffusion est le taux d'étirement, gradient de la vitesse à la flamme : Deux flammes de même richesse auront des structures identiques si elles ont le même taux d'étirement. Exprimé en s^{-1} , le taux d'étirement est inversement proportionnel au temps de séjour des espèces de la réaction : un faible taux d'étirement traduit un temps de présence des réactifs (au contact l'un de l'autre) plus long, entraînant une combustion plus complète.

Pour estimer, le taux d'étirement d'une flamme à partir des vitesses d'injection v_F (coté Fuel) et v_O (coté Oxydant) et de la distance de séparation des injecteurs L , on peut faire l'hypothèse d'une densité constante dans l'écoulement et utiliser une formulation globale [129] :

$$\Lambda = \frac{|v_F - v_O|}{d} \quad (3.8)$$

Il existe un lien étroit entre le taux d'étirement Λ et le taux de dissipation scalaire ξ . Le taux de dissipation scalaire se définit à partir du scalaire passif ζ (ou fraction de mélange) en posant :

$$\xi = 2\mathcal{D} \frac{\zeta}{dx} \quad (3.9)$$

où \mathcal{D} est un coefficient de diffusion défini pour toutes les espèces.

Bish et al. [4] puis Warnatz et al. [164] définissent le taux d'étirement local de la façon suivante :

$$\Lambda = 2\pi\mathcal{D} \left(\frac{\vec{\nabla}\zeta}{(\zeta^+ - \zeta^-)} \right)^2 \cdot \exp \left(2 \cdot \left(\text{erf}^{-1} \left[\frac{\zeta - \frac{1}{2}(\zeta^+ + \zeta^-)}{\frac{1}{2}(\zeta^+ - \zeta^-)} \right] \right)^2 \right) \quad (3.10)$$

En considérant à la flamme $\zeta = 0$, $\zeta^+ = 1$ et $\zeta^- = -1$ on obtient :

$$\Lambda = \frac{\pi D}{2} (\nabla \zeta)^2 = \frac{\pi}{4} \xi \quad (3.11)$$

Cependant, cette formulation est relativement complexe et sied plus à une modélisation bidimensionnelle de l'écoulement.

D'autres formulations ont été proposées dans la littérature, telle que celle de Chellian et al. [66], utilisée aussi par Lee et al. [79] dans son étude sur les effets de l'addition de CO_2 pour les flammes de diffusion à jets opposés, et qui prend en compte la variation de la densité aux injecteurs :

$$\Lambda = \frac{-2v_O}{L} \left[1 + \frac{v_F}{-v_O} \sqrt{\frac{\rho_F}{\rho_O}} \right] \quad (3.12)$$

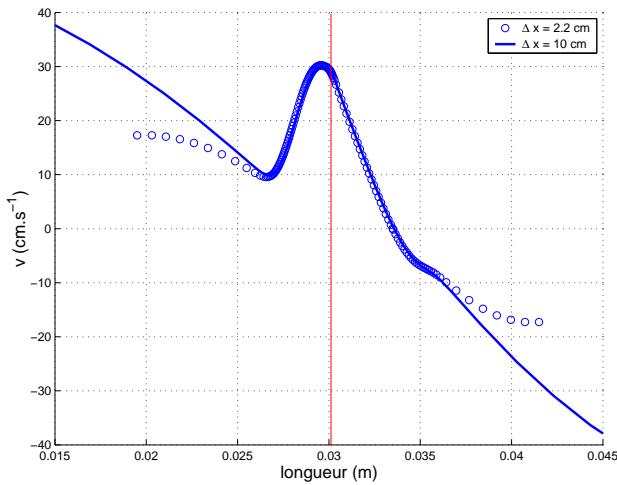
Cette définition permet de se rapprocher des valeurs mesurées expérimentalement mais ne permet pas de paramétriser correctement les flammes. Pour les deux configurations différentes donnant des flammes identiques proposées dans notre exemple ci-après, nous avons calculé deux taux d'étirement différents à partir de cette définition. De plus, elle ne nous permettrait pas d'estimer l'influence de l'utilisation d'un modèle radiatif donné sur le taux d'étirement d'une flamme puisqu'elle s'appuie uniquement sur les conditions aux limites du problème.

Le taux d'étirement caractérisant la façon dont les réactifs alimentent la flamme, il est plus judicieux d'essayer de l'estimer dans la zone de réaction, où la température est maximale. Cependant, les hautes températures qui règnent dans la région du front de flamme provoquent un échauffement qui diminue localement la masse volumique du mélange par dilatation et augmente la vitesse de l'écoulement (cf. Fig.3.3(a)). Le gradient de vitesse seul n'est donc pas représentatif de l'écoulement et il faut prendre en compte les fortes variations de vitesse (cf. Fig.3.3(c)) au front de flamme en considérant plutôt le débit massique ρv [31]. Pour un écoulement stationnaire, l'équation (2.20) permet de considérer un débit massique constant. Nous considérons que la zone qui présente un véritable intérêt est celle s'étendant autour du point où la température est maximale. C'est là que se produisent les réactions les plus importantes et où existe la majorité des espèces précisément que le temps de séjour de certaines de ces espèces est le plus déterminant. Enfin, c'est là que la dynamique de la flamme subit les plus grandes modifications. Dans cette région, la définition suivante du taux d'étirement sera utilisée pour caractériser les flammes de notre étude :

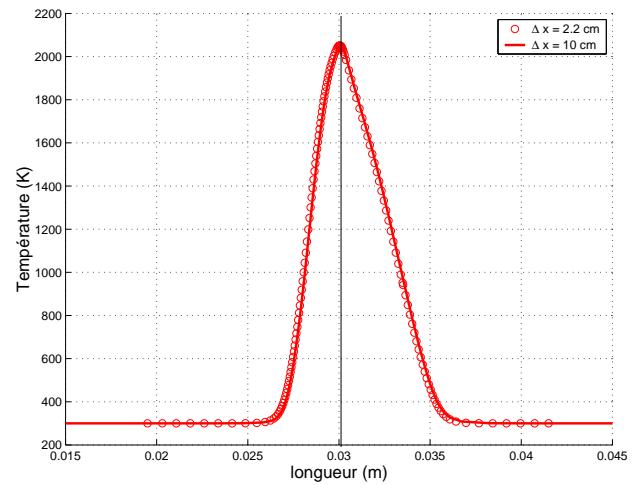
$$\Lambda^* = \left[\frac{1}{\rho} \frac{d(\rho v)}{dx} \right]_{T=T_{\max}} \quad (3.13)$$

Exemple :

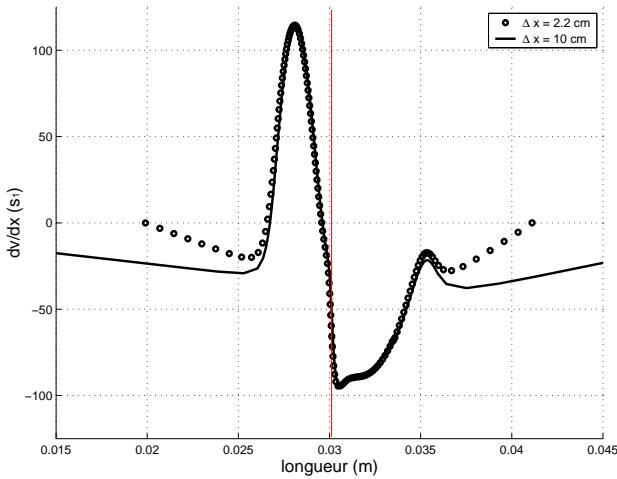
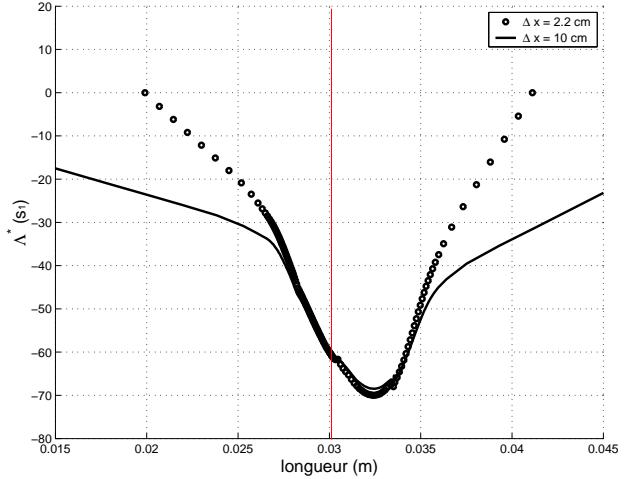
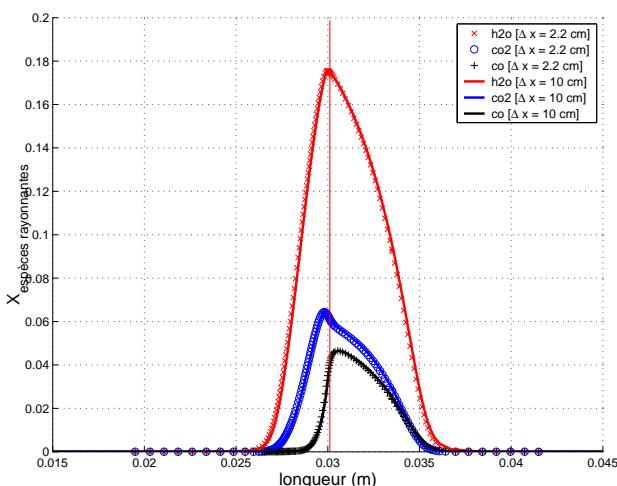
Nous montrons, à la figure Fig.3.3, les profils de température, de concentrations d'espèces, de vitesse et de gradients de vitesse obtenus pour deux flammes de même richesse ($\Phi = 15.63$)



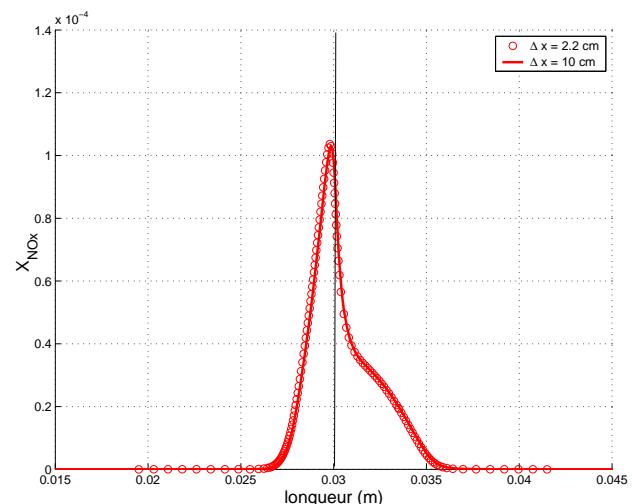
(a) Profils de vitesse



(b) Profils de température

(c) Profils de gradients de vitesse $\frac{dv}{dx}$ (d) Profils de Λ^* 

(e) Profils de concentration des espèces rayonnantes



(f) Profils de concentration des NOx

FIG. 3.3 – Comparaison de deux flammes ayant le mêmes taux d'étirement $\Lambda^* = 60s^{-1}$

modélisées aux mêmes taux d'étirement $\Lambda^* = 60s^{-1}$. Dans le premier cas, deux brûleurs écartés de $\Delta x = 2.2cm$ injectent les réactifs à $v = 17.276cm.s^{-1}$. Dans le second cas, deux brûleurs écartés de $\Delta x = 5.64cm$ injectent les réactifs à $v = 50cm.s^{-1}$. On observe une parfaite similarité des profils dans la région de la flamme sur les profils de température, d'espèces chimiques et de vitesse. Les domaines de définition de ces deux configurations n'étant pas de même dimension, nous avons dû recentrer la flamme obtenue avec un faible écartement des brûleurs pour effectuer la comparaison ; ainsi le domaine de définition s'étend de $x = 0.015$ m à $x = 0.045$ m. Les autres définitions de taux d'étirement donnent toutes deux valeurs différentes.

3.1.5 Indices d'émission

On s'intéresse aux émissions de deux polluants particulièrement dangereux pour la santé : le CO et les NO_x . Une nouvelle grandeur appelée « indice d'émission » permet de quantifier le taux de polluants émis. Elle est définie comme le rapport de débit massique du polluant $\dot{m}_{polluant}$ sur le débit massique de combustible consommé \dot{m}_F .

Ainsi, la concentration de CO produit dans nos flammes de diffusion CH_4/Air est convertie en indice d'émission du CO (**EICO**) :

$$EICO = \frac{\dot{m}_{CO}}{\dot{m}_{CH_4}} \quad (3.14)$$

De la même façon, un indice de NO_x noté **EINOx** est défini. Par le terme NO_x , nous désignons l'ensemble des espèces chimiques NO et NO_2 .

$$EINOx = \frac{\dot{m}_{NO} + \dot{m}_{NO_2}}{\dot{m}_{CH_4}} \quad (3.15)$$

Takeno et al. ont proposé une formulation permettant de calculer ces indices d'émission d'espèces [150], adaptée par Blevins et al. [5] aux données fournies par le code OPPDIF. C'est cette formulation que nous utilisons, donnant pour une flamme laminaire à jets opposés les indices d'émission du CO et des NO_x par :

$$EICO = \frac{\int_0^L \dot{\rho} Y_{CO} dx}{\int_0^L \dot{\rho} Y_{CH_4} dx} \quad (3.16)$$

$$EINOx = \frac{\int_0^L \dot{\rho} (Y_{NO} + Y_{NO_2}) dx}{\int_0^L \dot{\rho} Y_{CH_4} dx} \quad (3.17)$$

où $[x = L]$ est la position de l'injecteur de combustible et $[x = 0]$ celle de l'injecteur d'oxydant.

Par convention, les débits de polluants sont exprimés en $g.s^{-1}$ et les débits de combustible en $kg.s^{-1}$.

Pour notre étude sur le rayonnement, nous introduisons aussi l'indice d'émission de vapeur d'eau EIH_2O et l'indice d'émission de dioxyde de carbone $EICO_2$. Nous les estimerons par une formulation identique à celle utilisée pour définir l'indice d'émission CO :

$$EIH_2O = \frac{\int_0^L \dot{\rho} Y_{H_2O} dx}{\int_0^L \dot{\rho} Y_{CH4} dx} \quad (3.18)$$

$$EICO_2 = \frac{\int_0^L \dot{\rho} Y_{CO_2} dx}{\int_0^L \dot{\rho} Y_{CH4} dx} \quad (3.19)$$

3.2 Modèles de couplage Combustion/Rayonnement

Le rayonnement est un des modes de transfert thermique de la combustion et influence son comportement. Par exemple, Chao [20] a montré que le rayonnement peut modifier significativement la limite d'extinction d'une flamme étirée. A faible taux d'étirement, le temps de résidence des espèces augmente et la flamme s'épaissit, entraînant ainsi une augmentation des pertes radiatives. Ce mode de transfert peut alors devenir prépondérant par rapport à la conduction ou la convection et contrôler l'extinction de la flamme : on parle d'extinction radiative.

Dans notre étude, nous nous sommes intéressés à l'influence du rayonnement sur une flamme à jets opposés de CH_4/Air , à faible taux d'étirement. Dans ce cas, le rayonnement influence fortement le profil de température [17, 57]. Cependant, l'augmentation de l'épaisseur de la flamme et de sa composition en espèces rayonnantes (à savoir H_2O , CO_2 et CO qui sont les produits d'une réaction CH_4/Air) résultent en un accroissement de l'épaisseur optique du milieu. Dagusé [34] a montré que, dans de telles situations, même pour des flammes de petite dimension comme celle que nous étudions, l'hypothèse de milieu optiquement mince s'avère inadaptée. L'objectif de ce travail est d'observer l'impact du rayonnement sur ce type de flamme et d'en tirer des conclusions pour la modélisation. Plus particulièrement, l'apport réel que représente la prise en compte du phénomène de réabsorption de façon plus ou moins détaillée est étudié. Deux modèles de transferts radiatifs sont utilisés. Le premier et le plus simple est basé sur l'approximation de milieu optiquement mince (OTL) et le second utilise une nouvelle méthodologie basée sur les sensibilités que nous avons développée au sein de l'équipe (le modèle TLM).

3.2.1 Couplage avec le Modèle OTL

La résolution des équations de l'aérothermochimie est faite par le code **OPPDIF** présenté au §3.1.2. Elle permet de déterminer les différents profils de température et concentrations d'espèces (réactifs et produits), permettant de calculer le profil du terme source radiatif S_r . Ce terme source est lui-même introduit dans l'équation de l'énergie et permet une prise en compte directe du rayonnement. Cette procédure de couplage directe est très lourde si on utilise un modèle radiatif détaillé, puisqu'il faut refaire un calcul radiatif complet à chaque itération [87, 88, 163]. Le modèle radiatif le plus simple permettant de calculer le rayonnement des flammes est le modèle OTL (cf. §2.2.2.4). Il est basé sur l'estimation des échanges radiatifs avec les conditions limites et sur l'hypothèse que le phénomène de réabsorption est négligeable. Dans le cas de la flamme de diffusion à jets opposés qui est considérée, il n'y a pas de limite physique pour le système. D'un point de vue radiatif, on considérera alors une paroi fictive prise à la température ambiante $T_w = 300$ K. Du point de vue spectral, le modèle OTL utilisé est basé sur les données spectroscopiques du modèle statistique à bandes étroites (données SNB) fournies par le laboratoire de l'EM2C de l'ECP de Paris (cf. §2.3.3). Le terme source radiatif s'écrit donc de la façon suivante :

$$S_r = \sum_{n=1}^{N_{bands}} \overline{\kappa_n} \left[4\pi \overline{L_{b,n}(T(\vec{r}))} - \pi \overline{L_{b,n}(T_w)} \right] \quad (3.20)$$

3.2.2 Couplage avec la méthode Monte Carlo : l'approche TLM

Nous appellerons « modèle TLM » (pour Taylor Like Model) le modèle de couplage avec la combustion basé sur un développement de Taylor au premier ordre des termes sources radiatifs. Il est basé sur la connaissance du profil du terme source et la matrice de sensibilité de ce terme source aux paramètres que sont la température et les différentes concentrations d'espèces. Pour calculer le terme source radiatif, nous nous basons sur la formulation en Puissances Nettes Échangées (2.62) présentée au §2.2.2.3. La méthode Monte Carlo nous permet de calculer les puissances nettes échangées (PNE) par rayonnement entre paires d'éléments du système ((2.63) et (2.64)) [38, 122]. Le modèle spectral s'appuie sur la même banque de données SNB que celle utilisée par le modèle OTL afin que les résultats obtenus à partir des différents modèles radiatifs soient comparables. La particularité de l'approche TLM que nous proposons est d'utiliser un avantage que présente la méthode Monte Carlo qui est de permettre le calcul du terme source radiatif et de la matrice de sensibilité de façon simultanée.

Pour un élément de volume V_i , la formulation en Puissances Nettes Échangées du terme source

radiatif S_r peut être simplifiée de la façon suivante :

$$S_r(V_i) = \sum_{j=1}^{N_{\text{zone}}} \varphi_{i \rightarrow j} \quad (3.21)$$

où $\varphi_{i \rightarrow j}$ représente le terme de puissance radiative nette échangée entre le volume V_i et un autre élément j (surface ou volume). Si nous notons $\delta Z_{k,j} = Z_{k,j} - Z_{k,j}^0$ les petites variations du paramètre $Z_{k,j}$ d'un élément j du système, nous pouvons calculer, par un développement limité à l'ordre 1, un nouveau terme de PNE $\varphi_{i \rightarrow j}$ à partir du terme initial $\varphi_{i \rightarrow j}^0$ comme il suit :

$$\varphi_{i \rightarrow j} = \varphi_{i \rightarrow j}^0 + \sum_{k=1}^{N_{\text{paramètres}}} \frac{\partial \varphi_{i \rightarrow j}}{\partial Z_{k,j}} (Z_{k,j} - Z_{k,j}^0) \quad (3.22)$$

A partir des équations (3.21) et (3.22), nous pouvons calculer le nouveau terme source S_r associé au volume V_i tel que :

$$S_r(V_i) = \sum_{j=1}^{N_{\text{zone}}} \left[\varphi_{i \rightarrow j}^0 + \sum_{k=1}^{N_{\text{paramètres}}} \frac{\partial \varphi_{i \rightarrow j}}{\partial Z_{k,j}} (Z_{k,j} - Z_{k,j}^0) \right] \quad (3.23)$$

soit :

$$S_r(V_i) = S_r(V_i)^0 + \sum_{j=1}^{N_{\text{zone}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{paramètres}}} \frac{\partial \varphi_{i \rightarrow j}}{\partial Z_{k,j}} (Z_{k,j} - Z_{k,j}^0) \quad (3.24)$$

Cela permet de calculer le terme source radiatif, lors des différentes itérations amenant le code de combustion à la solution, sans avoir à refaire un calcul de transfert radiatif complet à chaque itération. Cette approche implique l'hypothèse de linéarité puisqu'on s'arrête à l'ordre 1 dans le développement de Taylor. Pour vérifier la validité de cette hypothèse, un calcul radiatif de contrôle est fait sur la solution convergée puis comparé au champ du terme source obtenu par le modèle TLM. La barre d'erreur associée au calcul Monte Carlo sert de critère de validité. Cette méthodologie de couplage est résumé par l'algorithme représenté à la figure Fig.3.4. Au cours du calcul de combustion, il n'y a pas de calcul complet du terme source radiatif, ce qui en fait une procédure simple et rapide et précise.

Tout problème de non linéarité du terme source nécessiterait une extension du développement de Taylor au second ordre. Cette extension de la méthode est envisagée comme une suite possible à ce travail. En effet, pour de très faibles taux d'étirement, il s'est avéré que le modèle linéaire était insuffisant et ne permettait pas d'obtenir une solution convergée à partir d'une solution déjà obtenue avec OTL. Il a été nécessaire de passer deux à trois fois par la boucle de correction montré à la Fig.3.4.

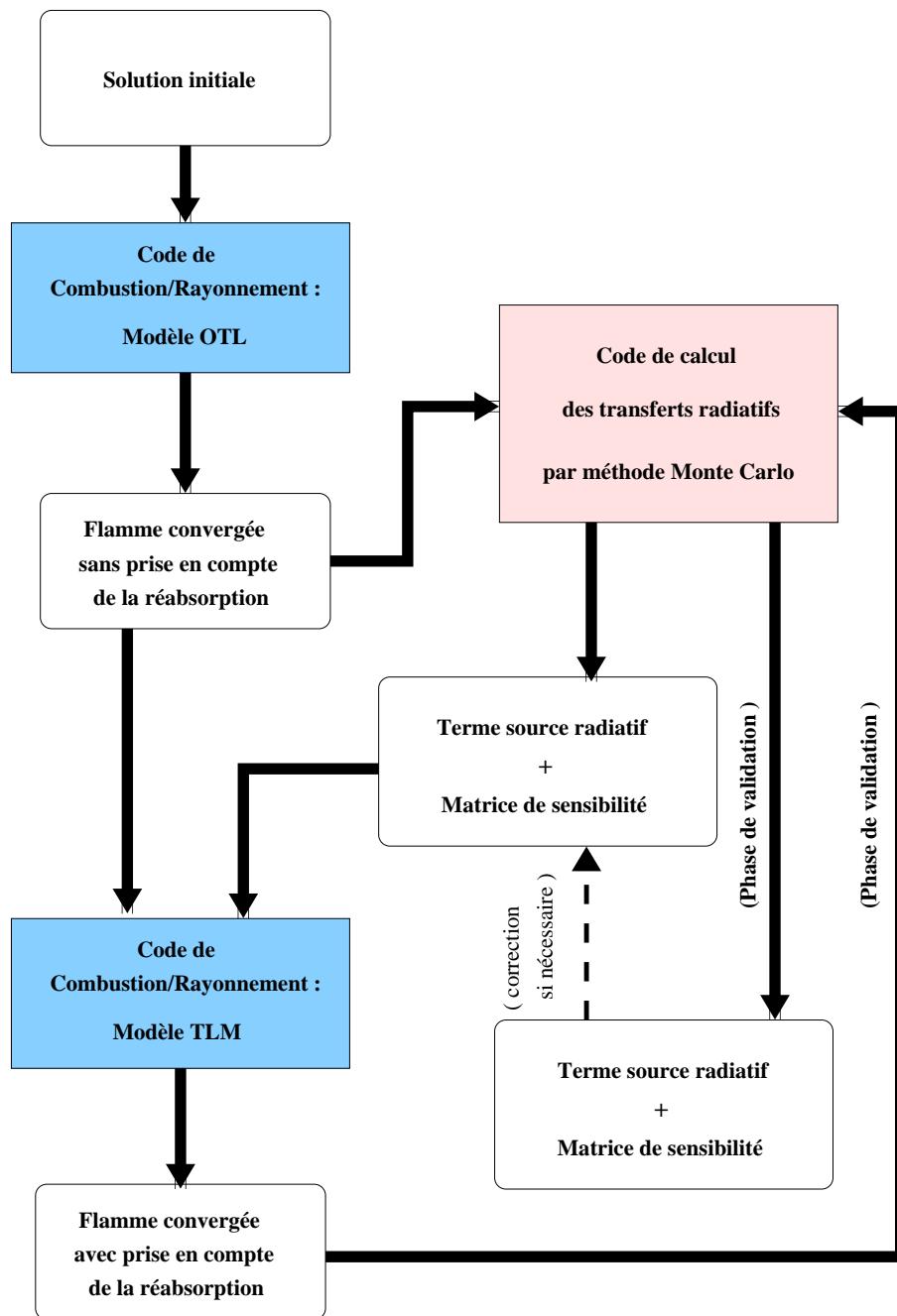


FIG. 3.4 – Procédure de couplage numérique TLM entre le code de combustion OPPDIF et le code de calcul radiatif par méthode Monte Carlo

3.3 Étude paramétrique

3.3.1 Détermination des paramètres influents

L'objectif de l'étude est de déterminer l'influence de plusieurs paramètres physiques sur la structure de la flamme de diffusion à jets opposés. Nous avons retenu cinq paramètres importants auxquels un expérimentateur peut avoir accès indépendamment les uns des autres : la vitesse des jets aux deux injecteurs, la température à chacun des injecteurs (T_{CH_4} et T_{Air}), la richesse de la flamme Φ (cf. 3.5) et l'écartement L des brûleurs. Nous avons calculé la température maximale et les concentrations d'espèces rayonnantes produites sur le profil axial de cette flamme.

Nous exposons d'abord une campagne préalable qui nous a permis de réduire le nombre de paramètres de notre étude. Nous définissons par le terme « adiabatique » (= sans pertes thermiques) les résultats obtenus en faisant abstraction du rayonnement dans l'équation de l'énergie. Puisque les hautes températures favorisent la formation des NO_x et influencent sur la transformation du CO en CO_2 , nous avons étudié mené cette première partie de l'étude en ne considérant que l'influence des cinq paramètres cités sur la température maximale. Nous avons vu (cf. §) que la structure de la flamme était contrôlée par le taux d'étirement. Nous observerons donc l'évolution de T_{max} en fonction du taux d'étirement Λ^* pour chacune des séries de calculs.

3.3.1.1 Influence de la température des jets (cf. Fig.3.5 et Fig.3.6) :

La flamme considérée ici est une flamme riche ($\Phi = 15.32$). L'augmentation de la température d'un des jets d'entrées entraîne un apport d'énergie initial et une modification des conditions limites qui ont pour conséquence d'augmenter la température maximale de la flamme.

Nous avons fait varier la température des jets d'Air de 300 K à 1200 K. Par la suite, nous avons effectué la même opération sur la température du jet de CH_4 . En préchauffant l'un des réactifs, le profil de masse volumique et donc le profil de vitesse se trouvent modifiés. Les vitesses d'injection étant fixées, la diminution de ρ quand la température augmente, à pression constante, entraîne une baisse du débit massique du comburant préchauffé. Nous avons pu observer (Fig.3.5) que la diminution du débit de l'oxydant ou du fuel modifie la dynamique de l'écoulement et abaisse le taux d'étirement local sur le lieu de la flamme. Cependant la température maximale de la flamme augmente puisque le gain en enthalpie compense largement la perte qu'entraîne la baisse du débit massique. Ceci est confirmé par le fait que le préchauffage de l'air a beaucoup plus d'influence sur la flamme que le préchauffage du CH_4 . Bien que la chaleur massique c_{p,CH_4} soit plus grande que celle de l'air $c_{p,Air}$, à la stoechiométrie, c'est à dire sur le lieu de la flamme, la masse d'air étant plus importante que celle du méthane (le rapport est de l'ordre de 16.7), le préchauffage de l'air amène plus d'énergie enthalpique que celui du combustible. Ceci est en accord avec les

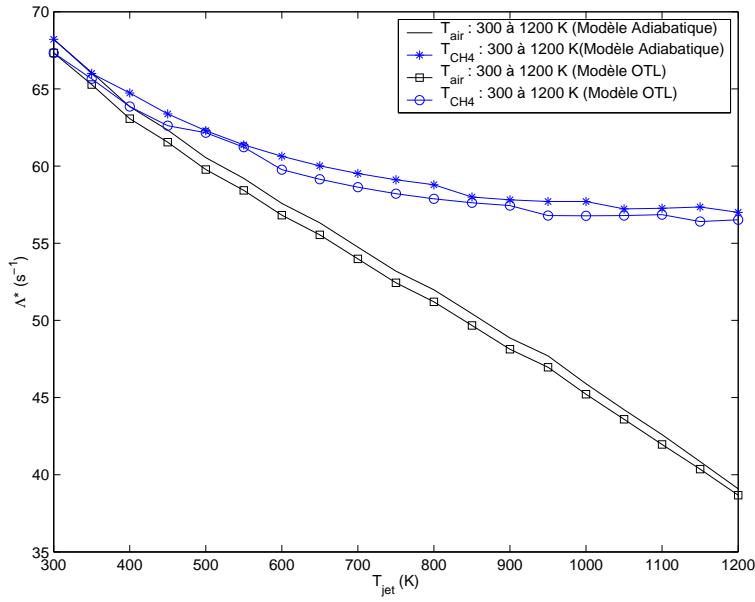


FIG. 3.5 – Influence des températures des jets sur le taux d'éirement

résultats obtenus par Chan en 1998 [18]. Nous augmenterons donc plus facilement la température maximale des flammes en préchauffant le jet d'air et c'est ce paramètre qui a été retenu pour tester l'impact d'une température de flamme élevée sur le rayonnement.

3.3.1.2 *Influence de la vitesse des jets et de l'écartement des injecteurs (cf. Fig.3.7) :*

Ce paramètre a été testé pour une flamme ayant la même richesse que celle étudiée au paragraphe précédent ($\Phi = 15.32$), la température des deux jets étant fixée à 300 K. La formulation globale du taux d'éirement (3.8) montre clairement qu'une diminution des vitesses de jets revient à écarter les injecteurs (écartement noté Δx à la Fig.3.7). Même si le système est différent d'un point de vue géométrique, la température maximale T_{max} n'est fonction que du taux d'éirement Λ^* (cf. § 3.1.4). Les résultats présentés à la Fig.3.7 ont été obtenus à partir d'une flamme ayant des injecteurs écartés de 2.2 cm et des vitesses de jets de 20 cm.s^{-1} , en faisant varier soit les vitesses d'injection ou soit l'écartement des injecteurs. Les courbes en trait plein représentent l'évolution de la température en fonction du taux d'éirement lorsque l'on fait varier la distance entre les injecteurs. Les cercles présentent l'évolution obtenue en abaissant les vitesses d'injection.

Les deux paramètres (vitesse d'injection et écartement des injecteurs) ont bien la même influence sur la structure de la flamme. Cependant la diminution des vitesses entraînent un épaississement de la flamme tel que les limites du domaine sont rapidement atteintes (la flamme touche

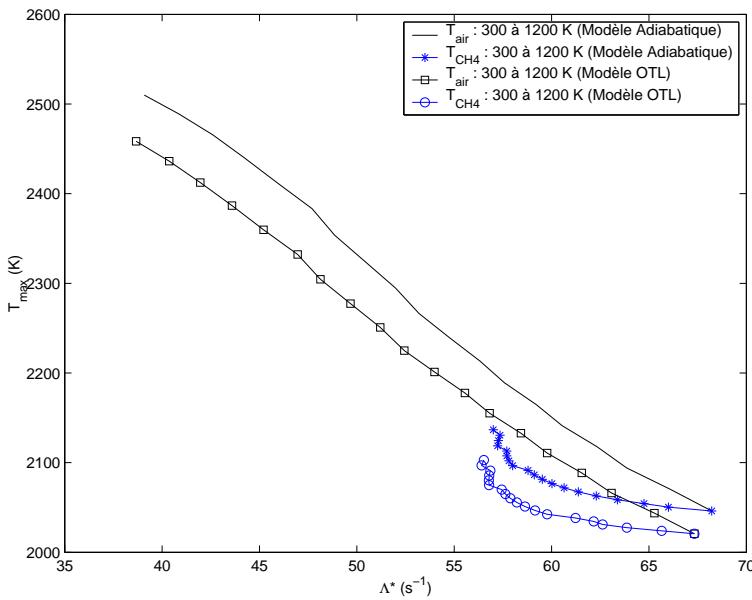


FIG. 3.6 – Influence des températures des jets sur la température maximale

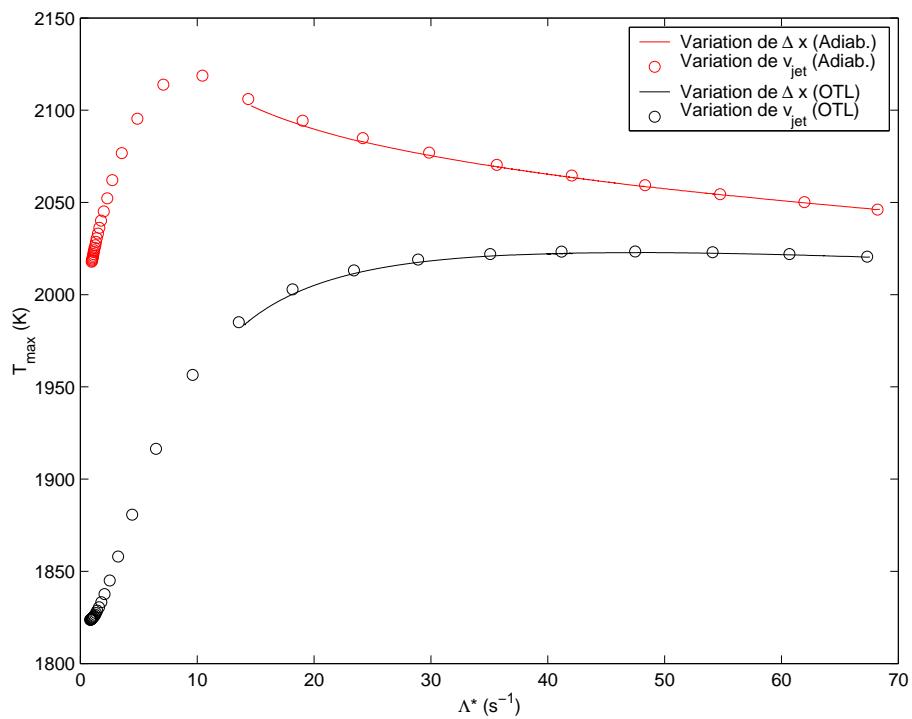


FIG. 3.7 – Comparaison de l'influence de l'écartement et de la vitesse des jets

les injecteurs. Nous nous exposons alors à une forte influence des conditions limites, faussant le comportement de la flamme (cf. Fig.3.7). Nous nous placerons donc dans une configuration où l'écart entre les brûleurs est suffisamment grand (10 cm) pour diminuer le taux d'étirement sans interférer avec les conditions limites.

3.3.1.3 *Influence de la richesse :*

La richesse d'une flamme modifie directement la structure de la flamme. En particulier, elle influence le domaine d'existence de la flamme en fonction du taux d'étirement. En effet, la limite d'extinction par **blow-off** (lorsque le temps de résidence des espèces chimiques n'est pas suffisant pour qu'elles puissent brûler) décroît avec la richesse. De même, l'énergie dégagée par la flamme est moindre lorsque la richesse diminue et les proportions augmentées de gaz inerte non préchauffé en consomment une partie significative. Nous avons effectué des calculs pour différents cas, à vitesses de jets fixes, en faisant varier la richesse de la flamme de $\Phi \approx 15$ à $\Phi \approx 1$, en utilisant le modèle adiabatique et le modèle OTL. Pour cela, nous avons abaissé la fraction massique de CH_4 injecté $Y_{1,F}$, la température des jets étant fixée à 300 K. Nous avons pu observer une croissance puis décroissance du taux d'étirement (sur des plages différentes) lorsque la richesse varie. Ceci est lié au fait que la variation de la masse volumique est prise en compte dans notre définition de Λ . En réalité, la variation de la richesse n'a que très peu d'influence sur le taux d'étirement. Toutefois, nous avons bien pu vérifié que la température T_{max} ne peut être liée à un taux d'étirement Λ^* unique que si la richesse est fixée. Ce paramètre doit donc être défini dès le départ pour mener une étude paramétrique.

L'étude de l'influence des différents paramètres permet finalement de restreindre le champs d'étude à trois paramètres intéressants : les vitesses d'injections, la température du jet d'air et la richesse. Dans la section qui suit, nous observerons l'influence de la richesse en étudiant deux types de flammes : riches ($\Phi \approx 15$) et stœchiométriques ($\Phi \approx 1$).

3.3.2 Influence du modèle radiatif

3.3.2.1 *Rôle des pertes radiatives*

La prise en compte des pertes radiatives provoque un abaissement de la température et influe sur les processus convecto-diffusifs par un accroissement des débits alimentant la flamme, donc du taux d'étirement. Nous nous attendons aussi à ce que la prise en compte du phénomène de réabsorption du rayonnement modifie la structure dynamique de la flamme. Il apparaît que le bon

paramètre de définition de la flamme dans le cadre d'une comparaison des différents modèles est le taux d'étirement tel que nous l'avons défini (cf. (3.13)) et la richesse, ceci étant confirmé par les résultats de l'étude préalable faite dans la section précédente.

Nous nous sommes placés dans le cas d'une configuration où les injecteurs sont séparés de 10 cm afin de balayer une plage de taux d'étirement suffisamment grande sans être confronté au problème que nous poserait une flamme trop épaisse à faible taux d'étirement. Ayant pu observer que la richesse modifie grandement la température maximale de la flamme et sachant que le taux de formation de NO_x est très influencé par les fortes températures, nous avons effectué notre étude paramétrique à deux richesses différentes : $\Phi \approx 1$. et $\Phi = 15.32$.

Nous représentons sur les Fig.3.8 et Fig.3.9 les résultats de l'étude paramétrique menée sur la flamme riche et sur les figures Fig.3.10 Fig.3.11 les résultats obtenus pour la flamme stoechiométrique. Puisque la température du jet d'air modifie notablement la température maximale correspondante, nous avons effectué les calculs pour différentes valeurs de ce paramètre. Pour la flamme riche, nous avons étudié quatre valeurs de T_{Air} : 300 K, 500 K, 700 K et 900 K. Dans le cas de la flamme stoechiométrique, nous avons été confronté au problème d'inexistence de la flamme en l'absence de préchauffage, et dû restreindre l'étude à trois températures : 400 K, 550 K et 900 K. L'unique paramètre que nous modifions pour faire varier le taux d'étirement est la vitesse des jets. Cette vitesse est toujours prise identique aux deux injecteurs ($v_{1,F} = v_{2,O}$).

Dans la première partie de l'étude, l'utilisation du modèle OTL suffit à rendre compte de la nécessité de la prise en compte des phénomènes radiatifs et permet de comprendre le rôle des transferts radiatifs au sein d'une flamme. Les tendances que nous avons pu observer en comparant les flammes « adiabatiques » aux flammes calculées en utilisant le modèle OTL sont semblables pour les deux richesses de flamme considérées.

La figure Fig.3.8 montre les résultats obtenus pour la flamme riche à différentes températures du jet d'air. Nous observons sur la Fig.3.8(d) que la différence entre le modèle adiabatique et le modèle OTL s'accentue vers les faibles taux d'étirement alors qu'elle est quasiment nulle vers des taux d'étirement élevé. Ceci est essentiellement dû à la forte augmentation de la puissance chimique totale (définie comme l'intégrale du terme source chimique pour l'énergie au travers de la flamme) avec le taux d'étirement, alors que la puissance radiative (définie comme l'intégrale du terme source radiatif au travers de la flamme) diminue du fait de la réduction de l'épaisseur de flamme associée (Fig.3.8(a) et Fig.3.8(b)). Ainsi, la contribution du transfert radiatif au bilan énergétique de la flamme devient importante aux faibles taux d'étirement (Fig.3.8(c), rapport exprimé en % des puissances chimique et radiative) : jusqu'à 80% pour une flamme à $T_{Air} = 900$ K. On parle d'extinction par rayonnement à faible taux d'étirement puisque l'extinction de la flamme est alors due à une température de flamme qui diminue par pertes radiatives. Nous n'avons pas

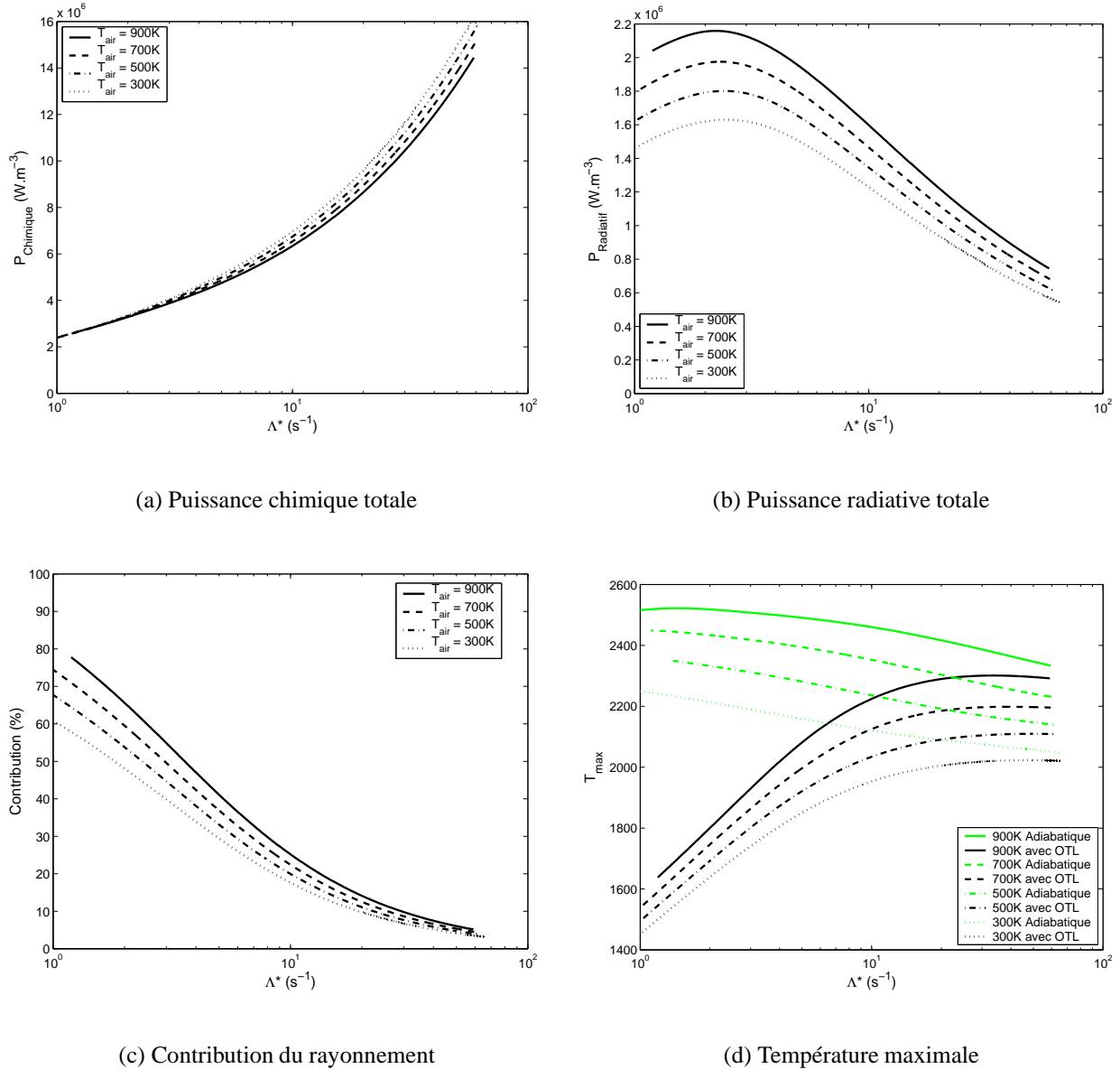


FIG. 3.8 – Résultats pour une flamme de richesse $\Phi = 15.32$ et des températures de jet d'air de : 900K, 700K, 500K et 300K

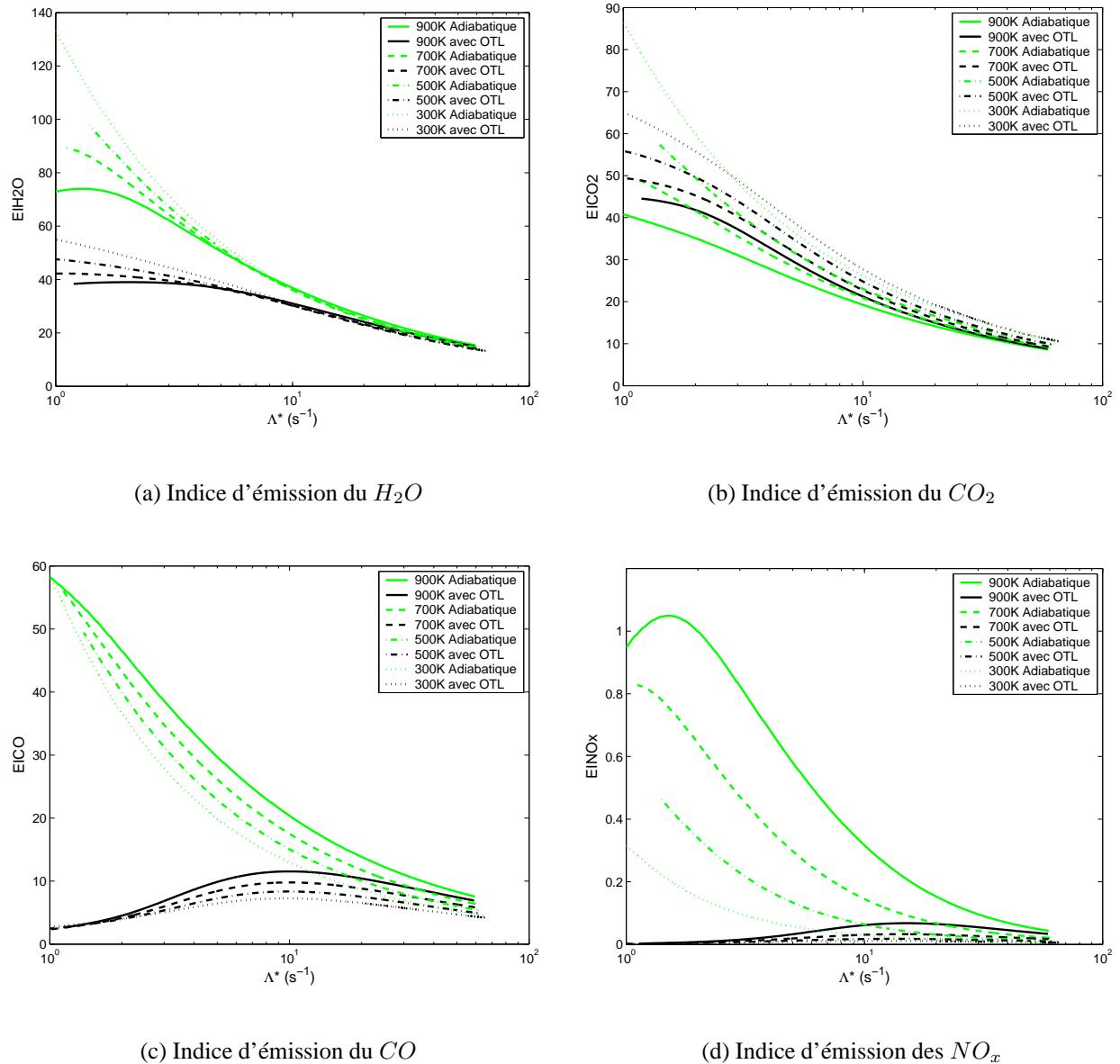


FIG. 3.9 – Indices d'émission pour une flamme de richesse $\Phi = 15.37$ et des températures de jet d'air de : 900K, 700K, 500K et 300K

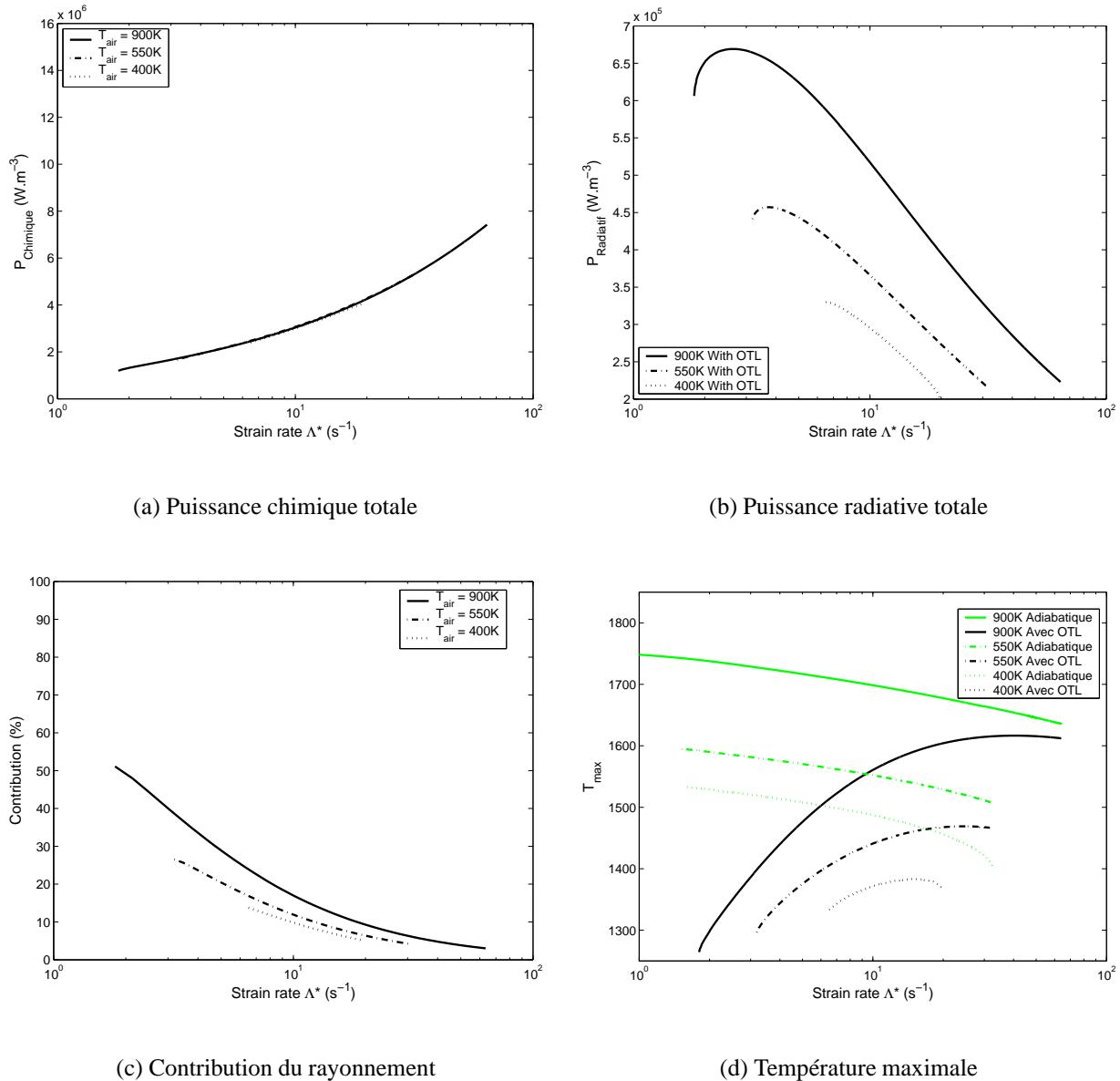


FIG. 3.10 – Etude pour une flamme de richesse $\Phi \approx 1$ et des températures de jets d'air de : 900K, 550K et 400K

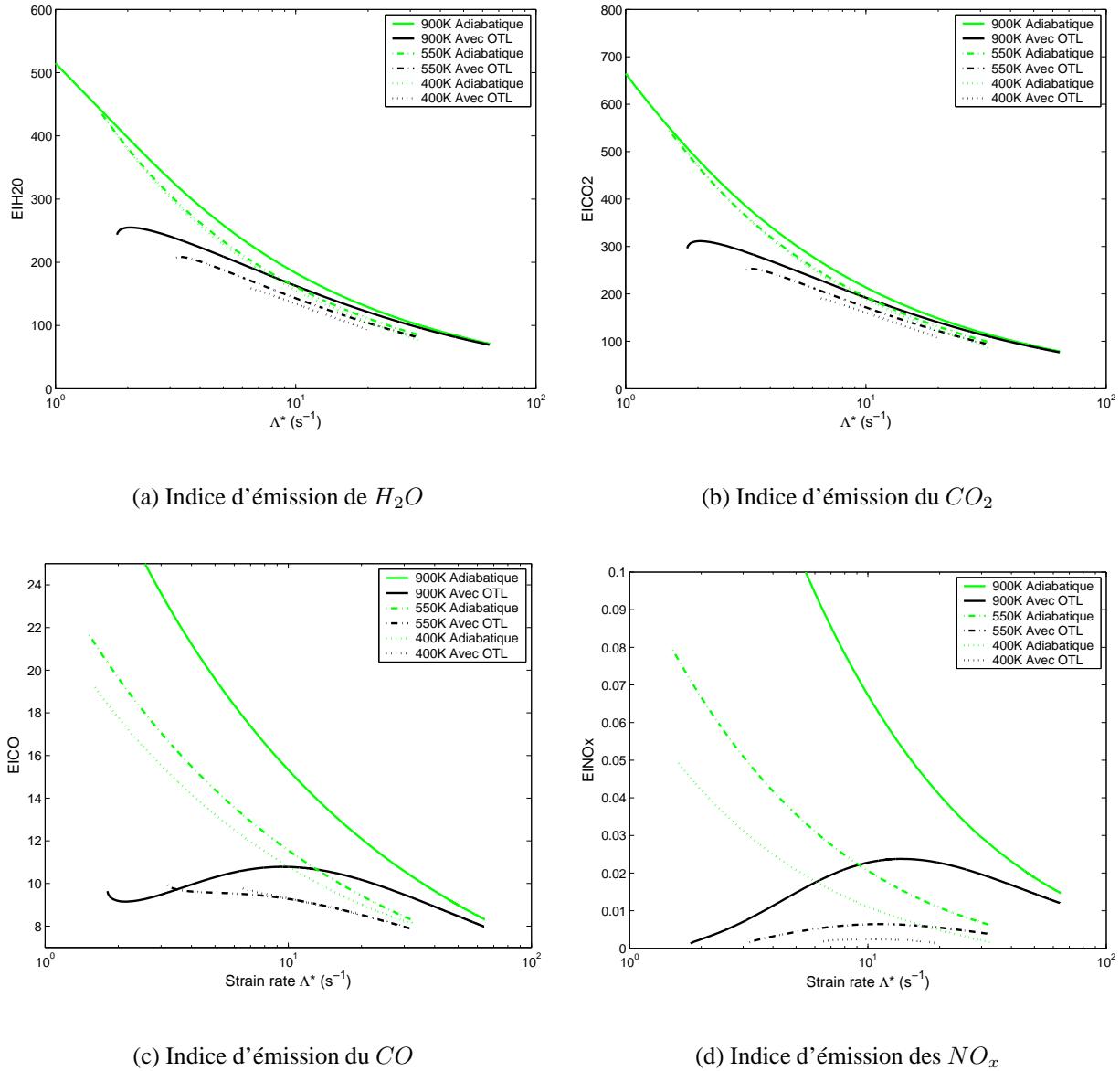


FIG. 3.11 – Indices d'émission pour une flamme de richesse $\Phi \approx 1$ et des températures de jets d'air de : 900K, 550K et 400K

observé d'influence notable du rayonnement sur la puissance chimique dégagée.

La Fig.3.9 montre les indices d'émission obtenus. Quand le taux d'étirement baisse, les concentrations d'espèces rayonnantes sont mal estimées par le modèle adiabatique. La perte d'énergie par rayonnement qui entraîne une baisse de température de la flamme et du taux de production de certaines espèces chimiques. De plus, dans le cas des flammes riches, les fortes températures atteintes par le modèle adiabatique entraînent une surestimation du taux de CO émis aux dépend du taux de CO_2 . Aux faibles taux d'étirement, les concentrations de vapeur d'eau et de dioxyde de carbone augmentent, impliquant un accroissement de la puissance radiative totale dégagée par les flammes obtenues par modèle OTL.

La figure Fig.3.10 montre les résultats obtenus pour la flamme stoechiométrique à différentes températures du jet d'air. Nous observons les même comportements que dans le cas de la flamme riche mais dans des proportions nettement inférieures. Si le préchauffage de l'air n'a aucun effet sur la puissance chimique dégagée, il joue un rôle très important au niveau radiatif lorsque le taux d'étirement diminue (Fig.3.10(c)). La contribution du rayonnement au bilan énergétique est moins importante que dans le cas de flamme riche (Fig.3.10(d)) bien que la puissance chimique totale dégagée n'est pas réduite dans les mêmes proportions. La puissance radiative totale est moindre. Ceci est dû au fait que les ordres de grandeurs des températures maximales des flammes stoechiométriques sont nettement inférieures à ceux des flammes riches. Les flammes riches sont nettement plus rayonnantes que les flammes stoechiométriques.

La figure Fig.3.11 montre les indices d'émission obtenus pour la flamme stoechiométrique. Il est à remarquer que les indices d'émissions sont obtenus par rapport au débit massique de CH_4 , ce qui à pour effet de fournir des indices d'émissions bien supérieurs à ceux obtenus pour la flamme riche. Les températures maximales atteintes étant inférieures à 1800 K, les concentrations de CO_2 sont très influencées (plus de 50% d'écart à faible taux d'étirement) alors que l'impact sur le taux de CO émis est beaucoup moins marqué que dans le cas de la flamme riche.

En comparant les résultats obtenus avec un modèle adiabatique à ceux obtenu avec le modèle OTL, nous avons pu observer des écarts conséquents entre les températures maximales de ces flammes, ceci étant renforcé dans les situations de préchauffage de l'air : jusqu'à 900 K d'erreur possible sur la Fig.3.8(d)). Il en découle que les écarts observés sur les indices d'émissions de NO_x deviennent conséquents.

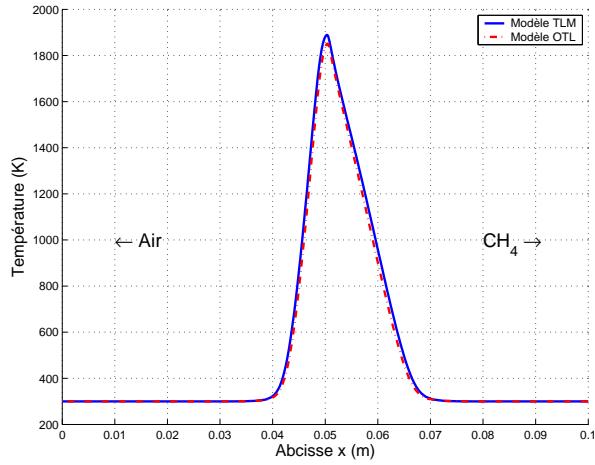
Nous observons donc sur ces calculs menés avec un modèle de rayonnement simple que les transferts radiatifs ont un fort impact sur la structure des flammes tant au niveau chimique que thermodynamique.

3.3.2.2 Rôle du phénomène de réabsorption du rayonnement

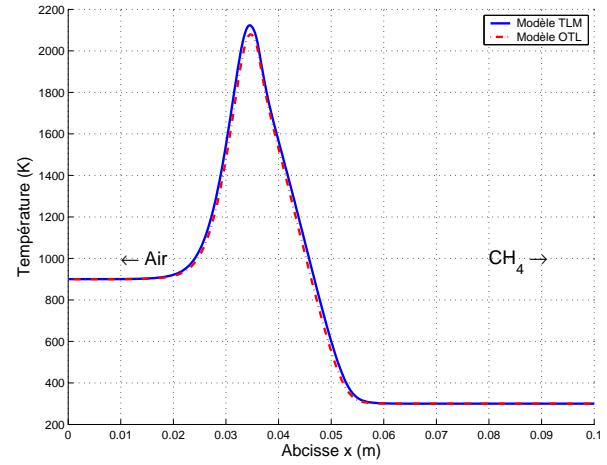
Lorsque le taux d'étirement diminue, l'épaisseur des flammes augmente et les concentrations en espèces rayonnantes sont plus importantes. Ceci signifie que l'épaisseur optique des flammes peu étirées est beaucoup plus importante. Nous avons cherché à modéliser les effets du phénomène de réabsorption du rayonnement au sein de la flamme en comparant les profils de flamme obtenus par un modèle TLM à ceux obtenus par le modèle OTL pour des flammes riches, ayant un taux d'étirement faible de $\Lambda \approx 5.0 \text{ s}^{-1}$ et de $\Lambda \approx 10.0 \text{ s}^{-1}$. A ce taux d'étirement, les concentrations des espèces polluantes CO et NO_x semblent être maximales (cf. Fig.3.9(c) et Fig.3.9(a)). Les calculs ont été menés pour deux températures de jets extrêmes (300 K et 900 K). Les profils de solutions sont regroupés dans les figures Fig.3.12, pour les deux flammes obtenues à $\Lambda \approx 5.0 \text{ s}^{-1}$, et Fig.3.13 pour $\Lambda \approx 10.0 \text{ s}^{-1}$. Sur ces quatre configurations, l'écart sur les profils de concentration est le plus marqué pour le cas présenté à la figure Fig.5.13(c). Les faibles écarts en température observés sont dûs à la modélisation du phénomène de réabsorption par le modèle TLM qui fait que le rayonnement joue son rôle de transport d'énergie des zones les plus chaudes vers les zones les plus froides. Cependant la correction apportée sur l'évaluation de la température maximale d'une flamme et des espèces rayonnantes par la méthode TLM reste négligeable. Il y a à peine 30 K d'écart entre les maxima de température atteints dans le cas de la flamme à $\Lambda \approx 10.0 \text{ s}^{-1}$ avec $T_{Air} = 900 \text{ K}$. Bien que le schéma cinétique utilisé (GRImech 2.11) ne soit pas adapté à une estimation précise des NO_x , ces faibles écarts en température montrent que le rayonnement thermique joue un rôle important sur la production des NO_x et des corrections importantes sont apportées par le modèle TLM. Un calcul à très faible taux d'étirement ($\Lambda^* = 2.0 \text{ s}^{-1}$ à la Fig.3.14) a pu être réalisé pour une flamme riche à $T_{Air} = 300 \text{ K}$, montrant un écart très important de l'ordre de 50% sur le profil des NO_x lié à un écart de plus de 50 K sur la température maximale. Même dans un taux d'étirement aussi faible, l'impact sur la prédictions des espèces rayonnantes reste négligeables.

3.3.3 Discussion

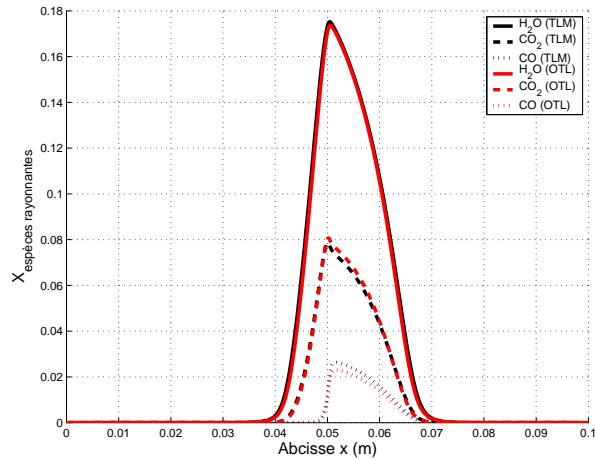
En conclusion seules les flammes riches très peu étirées et ayant une température maximale élevée sont sensibles au phénomène de réabsorption. Les répercussions sur les profils d'espèces rayonnantes restent tout de même négligeables (de l'ordre de quelques pourcents dans le pire des cas). Ceci est dû aux petites dimensions du problème qui ne permettent pas le développement du phénomène d'absorption. L'utilisation d'un modèle OTL se justifie donc bien pour des flammes de faible richesse et/ou à fort taux d'étirement.



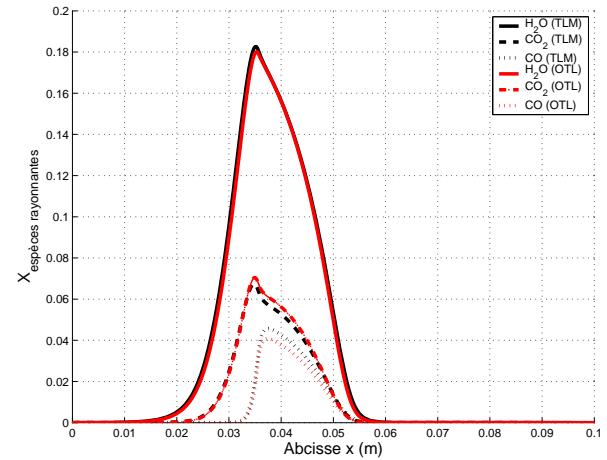
(a) $T_{Air} = 300K$



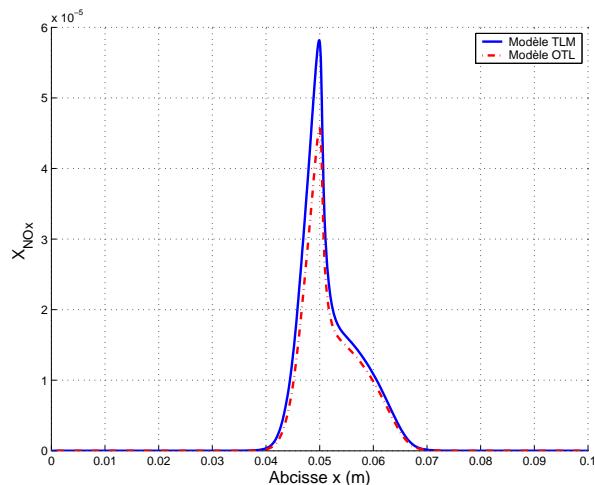
(b) $T_{Air} = 900K$



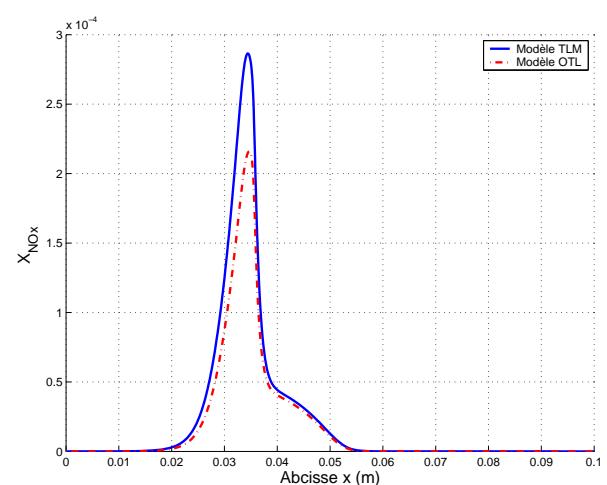
(c) $T_{Air} = 300K$



(d) $T_{Air} = 900K$



(e) $T_{Air} = 300K$



(f) $T_{Air} = 900K$

FIG. 3.12 – Profils de température et de concentrations d'espèces pour la flamme à $\Lambda^* \approx 5.0 \text{ s}^{-1}$: $T_{Air} = 300 \text{ K}$ (gauche) et $T_{Air} = 900 \text{ K}$ (droite)

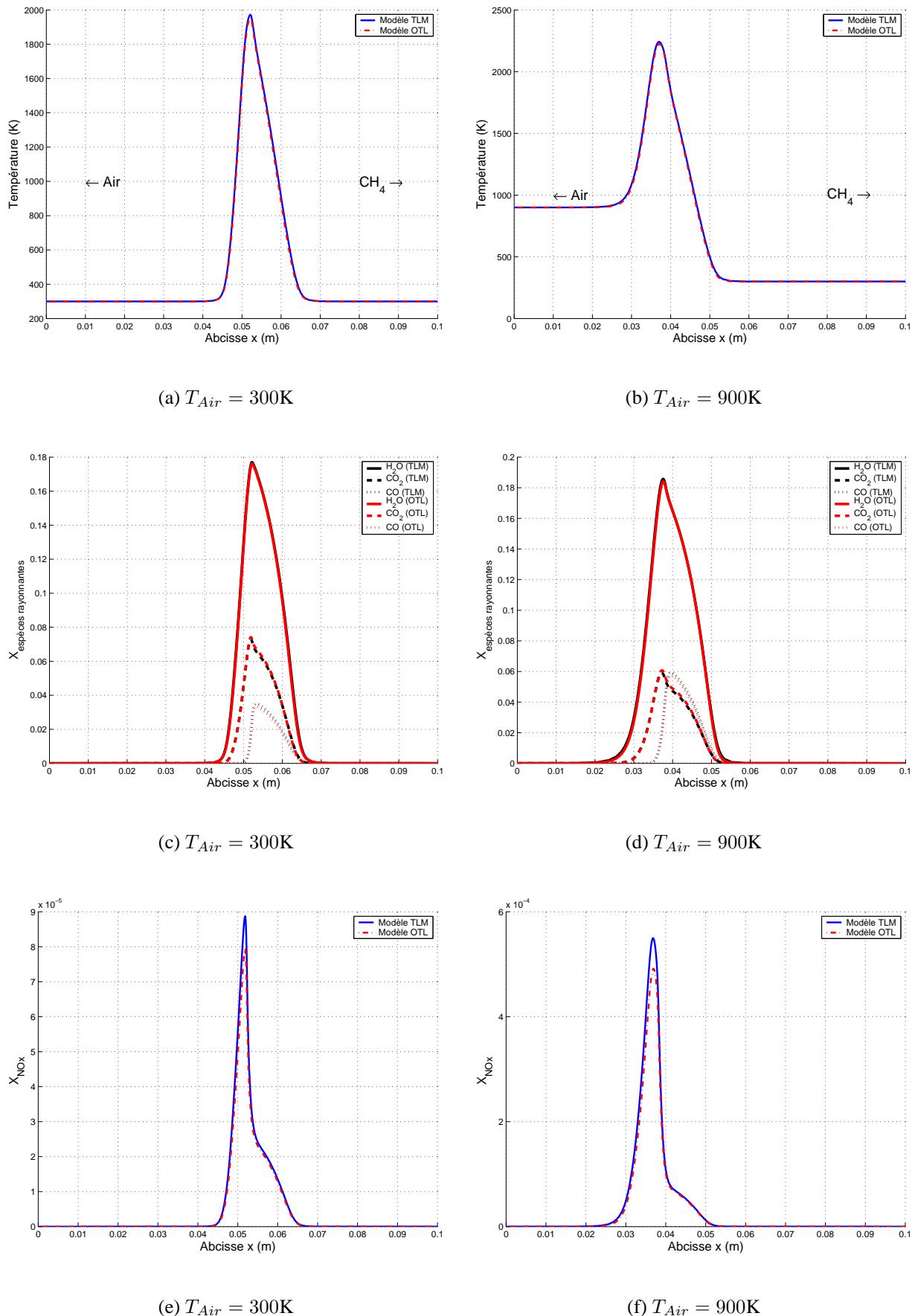


FIG. 3.13 – Profils de température et de concentrations d’espèces pour la flamme à $\Lambda^* \approx 10.0 \text{ s}^{-1}$: $T_{Air} = 300 \text{ K}$ (gauche) et $T_{Air} = 900 \text{ K}$ (droite)

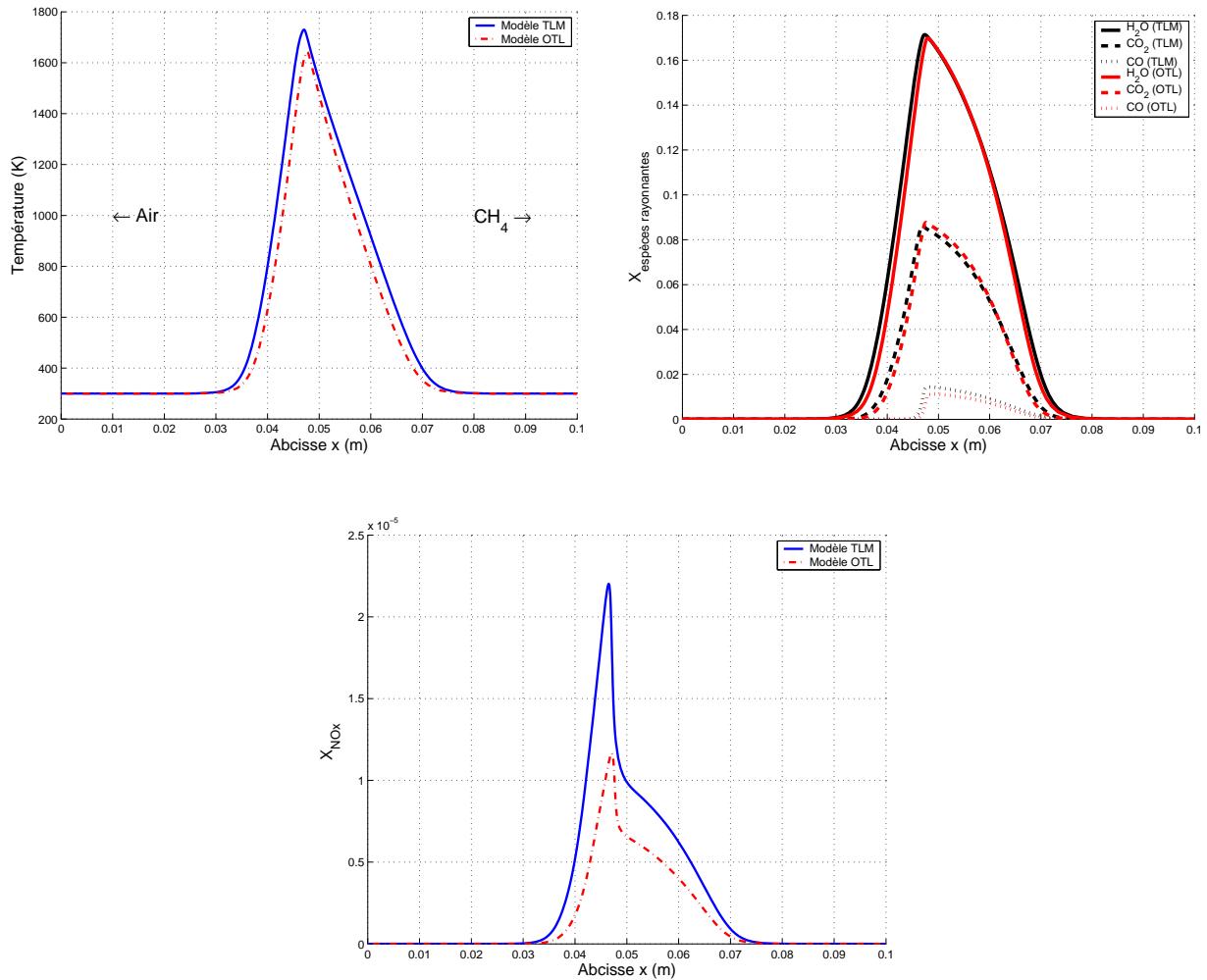


FIG. 3.14 – Profils de température et de concentration d'espèces pour une flamme riche à $\Lambda^* \approx 2.0 \text{ s}^{-1}$ et $T_{Air} = 300 \text{ K}$

Rappelons que Ravikrishna et Laurendeau [115, 132, 133] ont mis en évidence le fort impact des modèles de cinétique chimique des espèces mineures. En modifiant le schéma de cinétique de formation des NO_x , ils ont obtenu un impact de la réabsorption sur les profils de ces polluants bien plus important que ce que nous avons pu obtenir. Par la suite, ces auteurs ont effectué des calculs avec une version plus récente de GRImech et ont retrouvé les résultats expérimentaux. Cependant cette dernière étude ne prenait pas en compte le phénomène de réabsorption, et la question de la validité du schéma reste posée. Ceci montre qu'il y a un réel besoin de disposer d'un schéma de cinétique précis et validé (en prenant en compte tous les paramètres nécessaires), pour espérer quantifier précisément l'impact du rayonnement sur ce type d'espèces chimiques.

Enfin nous n'avons pas traité ici le problème des suies, mais il est connu que ces particules solides sont fortement influencées par le rayonnement en émission et en absorption. Nous verrons également au chapitre 5 comment le phénomène d'absorption agit sur la combustion dans des systèmes de plus grande taille.

Chapitre 4

Développement d'un code radiatif adapté aux géométries complexes

4.1 Introduction

Un de nos principaux objectifs est de produire un outil de calcul qui permette d'estimer les termes sources radiatifs et les flux aux parois à partir des champs de concentration et de température fournis par un code de combustion LES sur des configurations à géométrie complexe. Ce type de géométrie implique l'utilisation de maillage non structuré, ce qui complique le calcul radiatif. L'objectif à long terme est de prendre en compte de manière couplée les transferts radiatifs dans de tels codes. Pour des raisons de coût en temps de calcul, il n'est pas possible à l'heure actuelle d'envisager de coupler directement la combustion et le rayonnement détaillé. Nous avons donc cherché un compromis entre précision et coût en temps de calcul répondant aux questions liées à la modélisation des transferts radiatifs dans les géométries complexes en association avec des modèles spectraux. Ainsi notre choix s'est porté sur la Méthode aux Ordonnées Discrètes (**DOM**). Notre principal souci a donc été de l'adapter aux maillages non structurés sans rendre sa formulation trop complexe et coûteuse en moyens informatiques. Nous exposerons dans ce chapitre la méthodologie liée aux DOM, qui nous a permis de développer le code de calcul **DOMASIUM** (**D**iscrete **O**rdinates **M**ethod **A**pplied with **S**pectral **I**ntegration on **U**nstructured **M**eshes). Nous aborderons d'abord la façon dont on traite la dépendance angulaire du rayonnement, puis nous étudierons différents schémas de discréttisation spatiale permettant de résoudre l'ETR. Nous expliquerons également le modèle que nous avons choisi pour prendre en compte le rayonnement des gaz. Nous discuterons également des résultats obtenus sur des configurations académiques à l'issu de tests visant la validation du code sur le plan angulaire, spatial et enfin spectral.

4.2 La Méthode aux Ordonnées discrètes (DOM)

Dans le domaine de la modélisation numérique de la dynamique des fluides (CFD), le couplage entre le transfert radiatif et la combustion se situe au niveau de la résolution de l'équation de l'énergie (cf. (2.28) et (2.30)). Le terme source de chaleur rayonnée, S_r , est évalué en prenant en compte les profils de température et de concentrations des espèces rayonnantes, obtenus à partir de la résolution des équations de l'aérothermochimie. Parmi toutes les méthodes numériques développées pour calculer les transferts de chaleur par rayonnement, la Méthode aux Ordonnées Discrètes (DOM) et la Méthode des Volumes Finis (FVM) offrent un très bon compromis entre précision et coût en temps de calculs. Ces deux méthodes ont été largement utilisées durant ces vingt dernières années pour résoudre les problèmes de rayonnement thermique, dans des géométries tridimensionnelles, établis en coordonnées cartésiennes ou cylindriques sur des maillages structurés. En particuliers, les DOM, décrites par Chandrasekar en 1950 [19], ont été l'objet d'études plus approfondies menées par Lathrop et Carlson dans les années 60-70 [10], puis par Truelove, Fivelan et Jamaluddin dans les années 80 [54, 55, 56, 71, 159]. Des progrès notables ont été réalisés, durant la dernière décennie, visant la réduction de l'effet de rayon (« ray effect ») et de la diffusion numérique (« false scattering »). Des quadratures angulaires mieux adaptées et des méthodes permettant l'extension de la méthode aux géométries complexes ont été proposées [16, 148, 153, 154]. Nous pouvons aussi citer ici les récents travaux de Li, Flamant et Lu proposant de nouvelles approches pour traiter d'une part les problèmes lié à l'effet de rayon dans le cas de sources radiatives localisés [83, 84] et d'autre les problèmes liés à la diffusion numérique provoquées par la discontinuité des champs de luminances discrets [82].

Néanmoins, le couplage entre le rayonnement et d'autres phénomènes physiques, tels que la combustion et la dynamique des fluides à haute température requiert que la solution de l'équation de transfert radiatif soit obtenue sur le même maillage que celui employé pour résoudre les équations de conservation. Les maillages non structurés sont souvent utilisés en CFD pour leur flexibilité géométrique. Au cours de la dernière décennie, de nombreux travaux ont été menés dans ce sens afin de pouvoir appliquer la FVM, en trois dimensions, sur des maillages structurés non orthogonaux et des maillages non structurés [15, 97, 109, 114, 131]. De même, des méthodes permettant l'extension des DOM aux géométries complexes utilisant de maillages non structurés ont été proposées : Sakami et al. [137, 138, 139, 140] ont développé une méthode de discrétisation spatiale précise prenant en compte le phénomène d'extinction exponentielle du rayonnement et que nous appelons « schéma exponentiel ». Cependant, celle-ci nécessite la mise en œuvre de procédures de prétraitement lourdes. Liu et al. [97] ont utilisé dans leurs travaux le schéma « Step » équivalent du schéma « Upwind » en CFD, et Ströhle et al. [148] ont proposé les schémas d'interpolation en flux moyennés (Mean Flux Schemes). Raithby [130] a montré que les différences entre les DOM

et les FVM ne tiennent réellement qu'en la façon de discréteriser le problème sur le plan angulaire. Il en découle que de nombreuses avancées faites sur le plan de la discréterisation spatiale pour l'une de ces deux méthodes sont applicables pour l'autre. La Méthode d'Interpolation aux Ordonnées Discretes (**DOIM**) est un autre type de discréterisation spatiale des DOM, ne reposant plus sur une intégration de l'équation des transferts radiatifs sur des volumes de contrôle, comme le veulent les DOM classiques ou la méthode FVM, mais plutôt sur l'intégration de l'équation le long d'une trajectoire suivant une direction discrète. Cette méthode a été introduite par Seo et al. en 1998 [142], puis étendue à des maillages non structurés par Cha et al. en 2000 [13]. Récemment, Koo et al. [75] ont pu comparer trois méthodes appliquées à des géométries bidimensionnelles curvilignes : la méthode DOIM précitée, la méthode aux ordonnées discrètes en coordonnées curvilignes et la **DOM-FV-RT** (Discrete Ordinates Method associated to the Finite Volume and Ray Tracing). Cette dernière méthode est une reformulation dans un système à deux dimensions du schéma exponentiel proposé par Sakami.

Il n'existe pas dans la littérature de d'exemple de travaux associant les DOM en non structuré et et des modèles spectraux détaillés pour le rayonnement des gaz. Nous avons donc développé un code de calcul effectuant la modélisation des transferts radiatifs en utilisant la DOM et en prenant en compte la complexité des spectres de rayonnement thermique des gaz de combustion (CO_2 , H_2O et CO). Le code a été écrit spécialement pour des maillages utilisant des cellules tétraédriques en essayant d'éviter toute formulation compliquée pouvant être coûteuse en temps de calcul. Les performances des différentes quadrature angulaire et des différents schémas spatiaux disponibles ont été étudiées et comparés dans des géométries simples. La restriction du code à des cellules tétraédriques se justifie par le fait que le schéma exponentiel qui nous a servi de référence n'est pas, en l'état de nos connaissances actuelles, adaptable à des cellules d'un autre type. Toutefois, nous soulignons déjà que les deux autres schémas spatiaux développés dans le code ne constituent pas un obstacle pour étendre la méthode aux ordonnées discrètes à des maillages « hybrides ».

4.3 Principe

Notre objectif étant de définir le terme source radiatif S_ν , nous cherchons à résoudre l'équation (2.58). Cela nécessite la détermination de la luminance $L_\nu(\vec{r}, \vec{s})$.

Considérons donc un milieu absorbant, émettant et diffusant. La variation de la luminance le long d'un axe de propagation est donnée par les relations (2.51) et (2.52), en fonction de la luminance noire monochromatique $L_{b,\nu}(\vec{r})$, du coefficient d'extinction monochromatique β_ν et de l'albédo de diffusion correspondant ω_ν . Soit :

$$\frac{dL_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \beta_\nu(S_\nu(\vec{r}, \vec{s}) - L_\nu(\vec{r}, \vec{s})) \quad (4.1)$$

avec

$$S_\nu(\vec{r}, \vec{s}) = (1 - \omega_\nu)L_{b,\nu}(\vec{r}) + \omega_\nu \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}', \vec{s}) d\Omega' \quad (4.2)$$

Les conditions aux limites, qui sont celles de surfaces diffuses, sont obtenues à partir des relations (2.73) et (2.76) :

$$L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}) = \epsilon_w L_{b,\nu}(\vec{r}_w) + \frac{\rho_w}{\pi} \int_{\vec{n} \cdot \vec{s}' < 0} L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}') |\vec{n} \cdot \vec{s}'| d\Omega' = \epsilon_w L_{b,\nu}(\vec{r}_w) + \frac{\rho_w}{\pi} H_\nu \quad (4.3)$$

Nous résumerons la méthode aux ordonnées discrètes par les deux approximations suivantes :

- Toute intégration faite sur l'espace des angles solides 4π est remplacée par une quadrature angulaire numérique représentée par un nombre n de directions orientées selon les vecteurs unitaires s_i (ou ordonnées discrètes) sur lesquelles l'équation de transfert radiatif est résolue.
- la résolution spatiale de l'équation pour une direction donnée est faite sur un maillage par une méthode de type volumes finis.

Nous aborderons l'aspect angulaire en premier lieu. Nous exposerons ensuite différents schémas de dérivation spatiale utilisés pour des maillages cartésiens structurés et non-structurés.

4.4 Discrétisation angulaire

L'application d'une quadrature angulaire permet de remplacer toute intégrale sur l'espace des angles solides par une sommation pondérée sur n directions discrètes. On considère que pour toute fonction $f(\vec{s})$, on peut faire l'approximation suivante :

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\Omega \simeq \sum_{i=1}^n \omega_i f(\vec{s}_i) \quad (4.4)$$

où les directions \vec{s}_i doivent être choisies judicieusement et les poids ω_i correspondants correctement définis. Chaque direction discrète \vec{s}_i peut s'écrire dans le repère cartésien $R(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ sous la forme :

$$\vec{s}_i = \mu_i \vec{i} + \eta_i \vec{j} + \xi_i \vec{k} \quad (4.5)$$

où μ_i , η_i et ξ_i sont les cosinus directeurs de \vec{s}_i ou projections de celui-ci sur les axes du repère cartésien. A chaque direction \vec{s}_i est associé un poids ω_i correspondant à un angle solide défini autour de cette direction. Ainsi, pour la fonction unité $f(\vec{s}) = 1$, l'équation (4.4) se ramène à la principale condition nécessaire sur les poids :

$$\sum_{i=1}^n \omega_i = 4\pi \quad (4.6)$$

Les poids ω_i sont des coefficients réels positifs et non nuls. En effet, la luminance intégrée sur un angle solide $d\Omega_i$ autour de la direction \vec{s}_i ne peut en aucun cas être négative. L'ensemble de directions \vec{s}_i et de poids ω_i constitue le set de quadrature.

Les vecteurs directions discrètes s_i étant des vecteurs unitaires :

$$\mu_i^2 + \eta_i^2 + \xi_i^2 = 1 \quad (4.7)$$

En remplaçant dans l'équation (4.4) la fonction $f(\vec{s})$ de façon adéquate, on peut récrire les équations (2.74),(2.75) et (2.76) comme il suit :

$$G_\nu(\vec{r}) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) d\Omega \simeq \sum_{i=1}^n \omega_i L_\nu(\vec{r}, \vec{s}_i) \quad (4.8)$$

$$\mathbf{q}_{r,\nu}(\vec{r}) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}, \vec{s}) \cdot \vec{s} d\Omega \simeq \sum_{i=1}^n \omega_i L_\nu(\vec{r}, \vec{s}_i) \cdot \vec{s} \quad (4.9)$$

$$H_\nu(\vec{r}_w) = \int_{4\pi} L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}) \cdot |\vec{n} \cdot \vec{s}| d\Omega \simeq \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_i < 0} \omega_i L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}_i) \cdot |\vec{n} \cdot \vec{s}_i| \quad (4.10)$$

Pour des parois diffuses, la discréétisation des conditions limites (cf. (4.3)) est directement obtenue en posant :

$$L_\nu(\vec{r}_w) \simeq \epsilon_w L_{b,\nu}(\vec{r}_w) + \frac{1 - \epsilon_w}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_i < 0} \omega_i L_\nu(\vec{r}, \vec{s}_i) \cdot |\vec{n} \cdot \vec{s}_i| \quad (4.11)$$

La divergence du flux radiatif donne $S_{r,\nu}$:

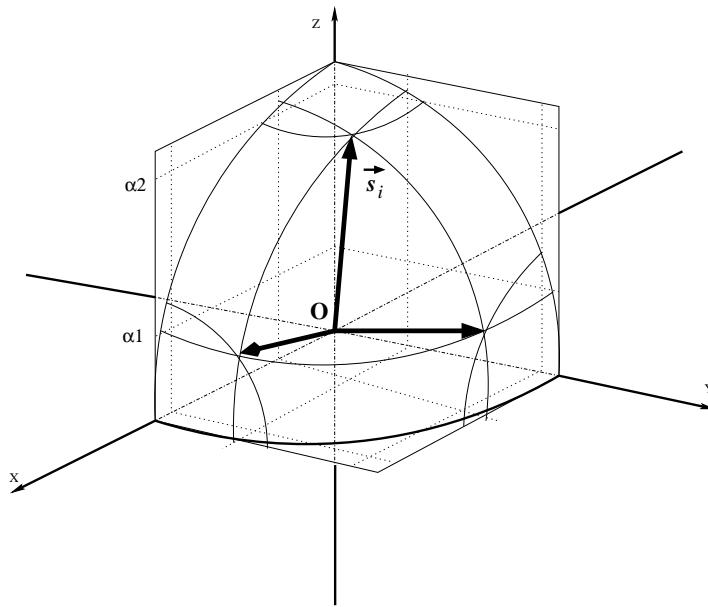
$$S_{r,\nu} = \nabla \cdot \mathbf{q}_{r,\nu} = \kappa_\nu (4\pi L_{b,\nu} - G_\nu) \quad (4.12)$$

et le flux radiatif net $Q_{w,\nu}$ à la paroi s'obtient en posant :

$$q_{w,\nu} = \epsilon \pi I_{b,\nu}(\vec{r}_w) - H_\nu(\vec{r}_w) \quad (4.13)$$

Il apparaît donc que seule la détermination de $L_\nu(\vec{r}, \vec{s}_i)$ aux centres des mailles du système et de $L_\nu(\vec{r}_w, \vec{s}_i)$ aux centres des faces coïncidant avec les parois, pour chaque direction discrète \vec{s}_i imposée, est nécessaire pour calculer nos deux grandeurs physiques importantes : G_ν permettant de définir le terme source radiatif $S_{r,\nu}$ et H_ν représentant le flux radiatif incident aux parois.

Une telle méthode d'approximation de l'intégration angulaire nécessite, comme première optimisation, la recherche d'ordonnées discrètes liées aux directions permettant une bonne couverture de

FIG. 4.1 – Quadrature angulaire S_4

l'espace par une quadrature numérique précise et fiable. Pour cela, différentes quadratures angulaires, que l'on rencontre dans la littérature, peuvent être utilisées : notamment les quadratures S_N [9, 76, 77, 111, 153], les quadratures T_N [153, 154] et les quadratures de type polaire/azimutale plus typique des FVM [97, 114, 131]. Une récente étude menée par Koch et Becker comparent l'efficacité de plusieurs types de quadratures angulaires [73]. Nous avons choisi d'intégrer les trois types de quadrature précités : les quadratures S_N étant les plus communément utilisées et les deux autres présentant l'avantage de pouvoir être formulées analytiquement à tout ordre N . Nous allons donc définir ces trois principales stratégies de quadrature dans les sections qui suivent.

4.4.1 Quadrature S_N

Une quadrature S_N est un set de $n = N(N + 2)$ directions discrètes \vec{s}_i . Carlson et Lathrop dans les années 60 [9], puis Fiveland [52, 53], ont définis certaines lois permettant d'accéder à des sets de quadrature satisfaisants qui répondent à certaines propriétés de symétrie. Les sets de quadrature obtenus sont invariants par toute rotation de 90° autour d'un des axes du repère cartésien. L'orientation des axes du repère utilisé ne doit pas influencer les résultats obtenus. Ils

imposent les contraintes suivantes pour tout $i=1,..,n$:

$$\mu_i^2 + \eta_i^2 + \xi_i^2 = 1 \quad (4.14)$$

$$\sum_{i=1}^n \omega_i = 4\pi \quad (\text{moment d'ordre 0}) \quad (4.15)$$

$$\sum_{i=1}^n \mu_i \omega_i = 0 \quad (\text{moment d'ordre 1}) \quad (4.16)$$

On peut écrire plus généralement pour $i=1,..,N/2$:

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + \frac{2(i-1)}{N-2} \cdot (1 - 3\mu_i^2) \quad (4.17)$$

Le terme μ_1 est un terme arbitraire déterminant la première direction. Il doit cependant être déterminé par une procédure numérique de façon à permettre à l'ensemble du set de quadrature obtenu de respecter les conditions imposées (cf. (4.14),(4.15),(4.16)).

Cependant, depuis la fin des années 80, on évoque par quadrature de type S_N un certain type de set redéfini par Truelove en 1987 [158], bâti sur des propriétés de la physique du rayonnement. Afin d'obtenir une bonne adéquation avec la physique liée au rayonnement, Truelove propose les contraintes suivantes :

$$\sum_{\mu_i > 0}^n \mu_i \omega_i = \pi \quad (4.18)$$

$$\sum_{i=1}^n \mu_i^2 \omega_i = 4\pi/3 \quad (\text{moment d'ordre 2}) \quad (4.19)$$

Les relations (4.16), (4.18) et (4.19) doivent aussi être vérifiées pour les η et les ξ . Ces conditions lui ont permis de déterminer par une méthode de type Newton-Raphson, les sets de quadratures présentés dans le tableau 4.4.1. Dans ce tableau, nous ne présentons les données que pour l'octant (ou trièdre rectangle) défini par les vecteurs $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ où les ordonnées sont toutes positives. Pour définir l'ensemble des n directions, il suffit d'attribuer le signe des vecteurs définissant l'octant considéré aux coefficients respectifs (cf. (4.1)) définis dans le tableau.

Exemple :

Pour tout vecteur direction \vec{s}_i appartenant à l'octant défini par $(\vec{i}, -\vec{j}, -\vec{k})$ les cosinus directeurs η_i et ξ_i auront pour valeurs absolues celles du tableau 4.4.1 mais seront négatifs. Le cosinus directeur μ_i restera positif.

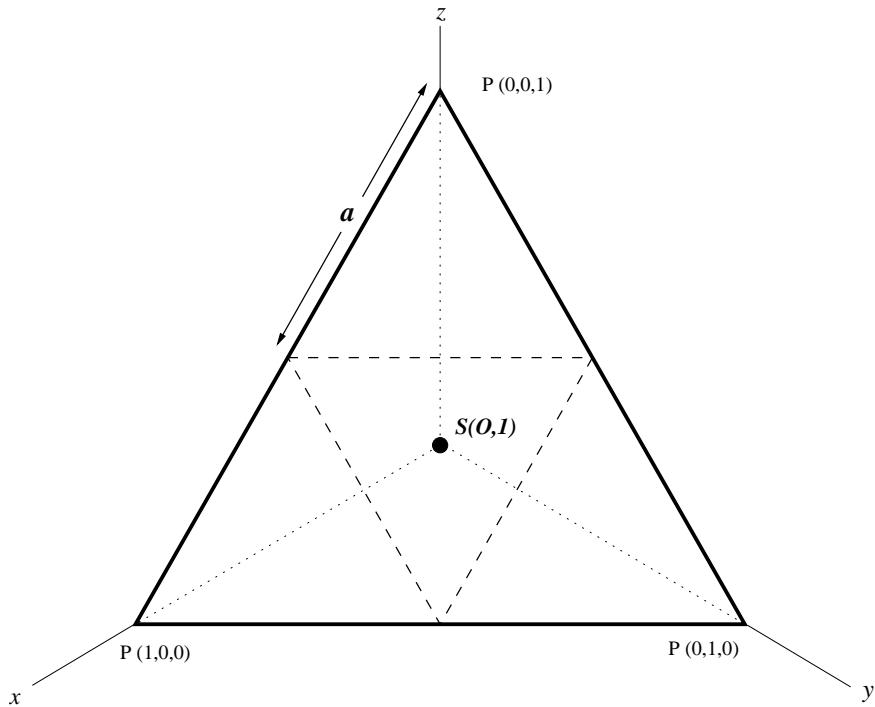
Ordre de quadrature	μ	η	ξ	w
S_2	0.5773503	0.5773503	0.5773503	1.5707963
S_4	0.2958759	0.2958759	0.9082483	0.5235987
	0.2958759	0.9082483	0.2958759	0.5235987
	0.9082483	0.2958759	0.2958759	0.5235987
S_6	0.1838670	0.1838670	0.9656013	0.1609517
	0.1838670	0.6950514	0.6950514	0.3626469
	0.1838670	0.9656013	0.1838670	0.1609517
	0.6950514	0.1838670	0.6950514	0.3626469
	0.6950514	0.6950514	0.1838670	0.3626469
	0.9656013	0.1838670	0.1838670	0.1609517
S_8	0.1422555	0.1422555	0.9795543	0.1712359
	0.1422555	0.5773503	0.8040087	0.0992284
	0.1422555	0.8040087	0.5773503	0.0992284
	0.1422555	0.9795543	0.1422555	0.1712359
	0.5773503	0.1422555	0.8040087	0.0992284
	0.5773503	0.5773503	0.5773503	0.4617179
	0.5773503	0.8040087	0.1422555	0.0992284
	0.8040087	0.1422555	0.5773503	0.0992284
	0.8040087	0.5773503	0.1422555	0.0992284
	0.9795543	0.1422555	0.1422555	0.1712359

TAB. 4.1 – Table des quatre premiers sets de quadratures S_N

4.4.2 Quadrature T_N

Les quadratures de type T_N sont construites de façon géométrique, ce qui facilite l'élaboration des sets qui se définissent analytiquement. Les tableaux de données n'ont donc pas besoin d'être stocker. On définit (T) le triangle basique équilatéral délimité par les points d'intersections de la sphère unité $S(O, 1)$ avec les axes définissant l'octant considéré (dans $R(O, \tilde{i}, \tilde{j}, \tilde{k})$: $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$). Pour une quadrature d'ordre N le triangle basique est subdivisé en N^2 triangles équilatéraux de coté $a = \sqrt{2}/N$ (cf. Fig.4.2). Notons $C_{t,i}$ les centres des triangles équilatéraux. Les N^2 vecteurs directions \vec{s}_i définis dans cet octant seront des vecteurs unités portés par les droites passant par le centre O du repère et par les centres $C_{t,i}$ des N^2 triangles équilatéraux.

Les sommets et centres de chaque triangle équilatéral sont projetés par rapport au centre O , sur

FIG. 4.2 – Mosaïque du triangle équilatéral (T)

la portion de sphère $S(O, 1)$ délimitée par l'octant, de telle sorte que :

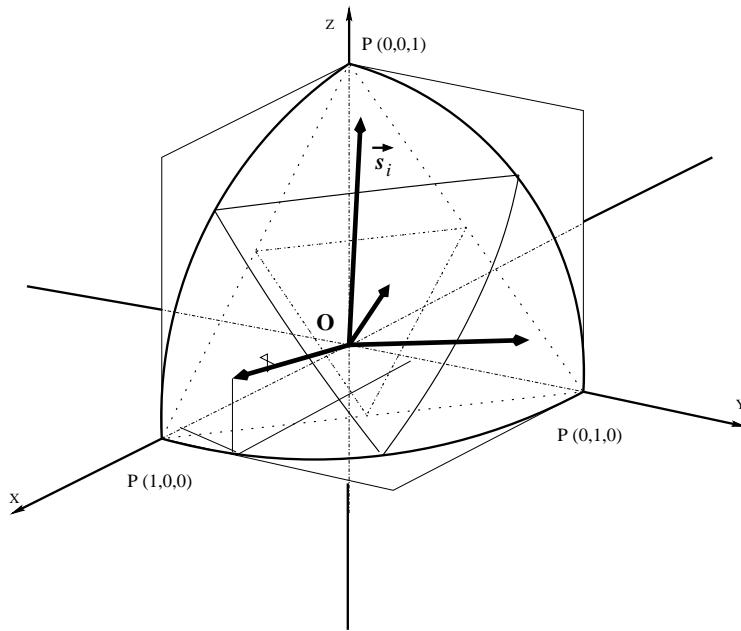
- les sommets et centres des triangles soient alignés avec le centre O de la sphère et leurs projétés respectifs sur la sphère ;
- le vecteur direction \vec{s}_i est déterminé par le bipoint partant du centre de sphère O et arrivant au point $C'_{t,i}$, projeté du point $C_{t,i}$ sur la sphère ;
- les projétés des sommets sur la sphère délimite une portion de sphère dont la surface n'est autre que le coefficient de pondération ω_i associé à notre vecteur \vec{s}_i .

Le set de quadrature défini sur les 8 octants est composé alors de $8N^2$ directions discrètes \vec{s}_i et reste globalement invariant par toute rotation de 90° autour de l'un des axes de notre repère R . On peut établir l'équation du plan auquel appartient le triangle équilatéral de base :

$$x + y + z - 1 = 0 \quad (4.20)$$

La construction de la mosaïque du triangle de base permet de déterminer les coordonnées x_i , y_i et z_i des centres des triangles équilatéraux, $C_{t,i}$. On obtient les coordonnées μ_i , η_i et ξ_i des projétés $C'_{t,i}$, sur la sphère unité, en écrivant :

$$\mu_i = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}} \quad (4.21)$$


 FIG. 4.3 – Quadrature angulaire T_2

$$\eta_i = \frac{y_i}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}} \quad (4.22)$$

$$\xi_i = \frac{z_i}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}} \quad (4.23)$$

Ces trois relations permettent d'écrire de façon analytique les coordonnées des directions discrètes \vec{s}_i permettant de procéder à une quadrature de la sphère unité.

4.4.3 Quadrature polaire/azimutale

Cette discrétisation est typique des méthodes aux volumes finis (**FVM**). Utilisée par Raithby et al. en 1990 [131], pour établir les **FVM** en maillage structuré, puis par Murthy et Mathur pour appliquer les **FVM** en non-structuré en 1998 [114], J.Liu l'applique aux **DOM** en 2000 [97]. Pour créer ce type de set de quadrature on discrétise l'octant en un nombre $n = N_\theta \times N_\phi$ d'angles solides. Prenons notre repère $R(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ et notons θ l'angle polaire par rapport à la droite dirigée par le vecteur \vec{i} et ϕ l'angle azimutal par rapport à la droite dirigée par le vecteur \vec{j} , tous deux compris dans l'intervalle $]0; \frac{\pi}{2}[$. On divise l'angle polaire $\frac{\pi}{2}$ en N_θ angles égaux de valeur $\Delta\theta$ et l'angle azimutal en N_ϕ angles égaux de valeur $\Delta\phi$.

On prendra alors comme directions discrètes, les vecteurs $\vec{s}_i = \vec{v}_{p,q}$ passant par les centres des

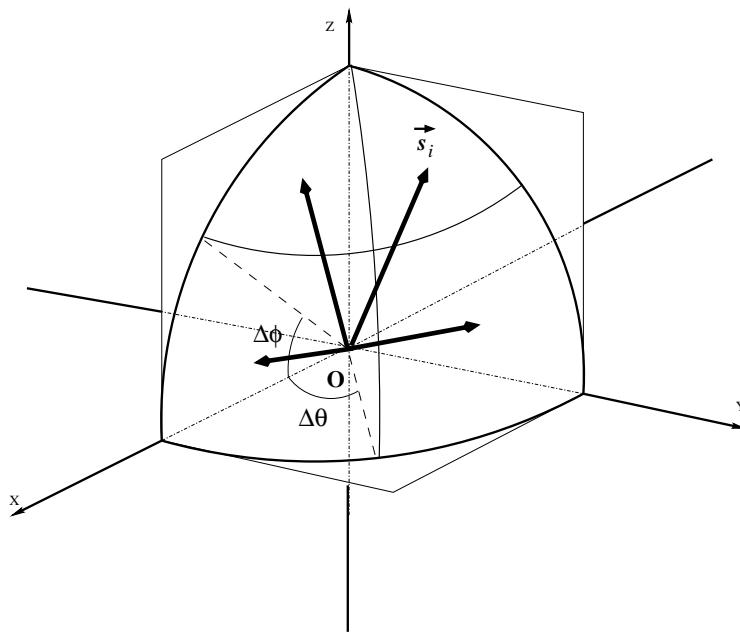


FIG. 4.4 – Quadrature angulaire polaire/azimutale avec $N_\theta = 2$ et $N_\phi = 2$ (FVM 2X2)

angles solides $w_{p,q}$ que l'on définit par les angles θ_p et ϕ_q de telle sorte que :

$$\vec{v}_{p,q} = \sin\theta_p \sin\phi_q \vec{i} + \sin\theta_p \cos\phi_q \vec{j} + \cos\theta_p \vec{k} \quad (4.24)$$

et

$$w_{p,q} = \int \Delta\phi \int \Delta\theta \sin\theta_p d\theta_p d\phi = 2\sin\theta_p \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) \Delta\Phi \quad (4.25)$$

où θ_p prend les valeurs $(p - 1/2)\Delta\theta$ avec $p = 1, N_\theta$ et ϕ_q prend les valeurs $(q - 1/2)\Delta\theta$ avec $q = 1, N_\phi$.

4.5 Discrétisation spatiale

L'application d'une DOM consiste à résoudre l'équation de transfert radiatif pour le nombre fini n de directions \vec{s} , conduisant à un ensemble de n équations différentielles du 1^{er} ordre en fonction de \vec{s}_i . Chacune de ces équations est résolue selon la même procédure. On peut écrire les équations qui suivent de façon générale pour chaque direction \vec{s}_i avec $i = 1, \dots, n$. La résolution de l'équation de transfert radiatif, sous sa forme différentielle, par une méthode de type volumes finis sous-entend une discrétisation spatiale du domaine d'application qui peut-être **structurée** (découpage en cellules hexaédriques disposées de façon régulière) ou **non-structurée** (découpage en tétraèdres, prismes ou autres polyèdres de façon désordonnée). Dans un premier temps, nous allons aborder la résolution de l'ETR pour un maillage cartésien structuré. Cette approche plus

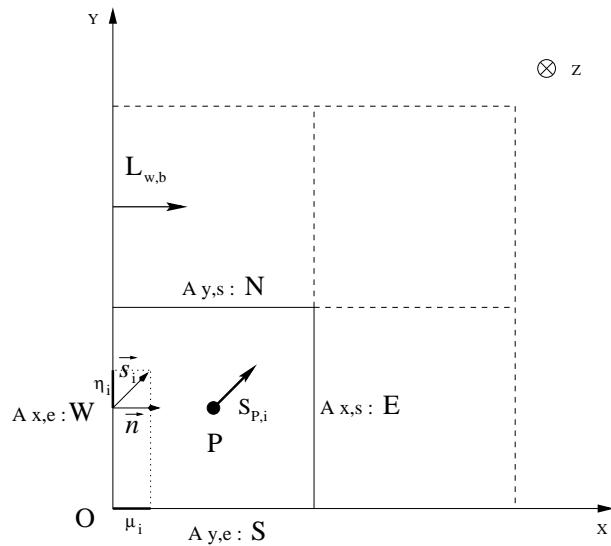


FIG. 4.5 – Vue de profil 1 (2D)

simple, nous permettra de mieux présenter la procédure à mettre en place pour utiliser une DOM. Par la suite nous exposerons les différents schémas de dérivation adaptés un maillage cartésien non structuré que nous avons pu étudier.

Afin d'alléger les formules qui seront présentées dans ce paragraphe traitant uniquement de la discréttisation spatiale, nous noterons, pour une direction discrète \vec{s}_i et en un point $P(\vec{r})$, la luminance $L_i = L_\nu(\vec{r}, \vec{s}_i)$, ainsi que le gain en luminance $S_i = S_\nu(\vec{r}, \vec{s}_i)$ (cf. 4.2). Pour définir les conditions limites aux parois du système, nous noterons $L_{(w, i)} = L_{(\vec{r}_w, \vec{s}_i)}$ la luminance à la paroi (cf. 4.3).

$$L_{w,i} = L_{(\vec{r}_w, \vec{s}_i)} = \epsilon L_{w,b} + \frac{1-\epsilon}{\pi} \sum w_j L_j \mid \vec{n} \cdot \vec{s}_j \mid \quad (4.26)$$

4.5.1 DOM pour maillage structuré

Dans un repère cartésien orthogonal, l'équation (4.1) peut être écrite de la façon suivante :

$$\frac{dL_i}{ds_i} = \vec{s}_i \cdot \nabla L_i = \mu_i \frac{dL_i}{dx} + \eta_i \frac{dL_i}{dy} + \xi_i \frac{dL_i}{dz} = \beta(S_i - L_i) \quad (4.27)$$

Pour déterminer les conditions limites aux parois du système, nous remplaçons la luminance à la paroi $L_{w,i}$ par une formulation discréttisée :

$$L_{w,i} = \epsilon L_{w,b} + \frac{1-\epsilon}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_j < 0} w_j L_j \mid \vec{n} \cdot \vec{s}_j \mid \quad (4.28)$$

Nous prenons V un élément de milieu semi-transparent entourant le point P et étant suffisamment petit et homogène pour considérer S_i et L_i comme uniformes. Nous associerons alors au point P

au centre de ce volume V , les valeurs moyennes $L_{P,i}$ et $S_{P,i}$. En intégrant l'équation de transfert radiatif sur V , nous obtenons :

$$\int_V (\mu_i \frac{dL_i}{dx} + \eta_i \frac{dL_i}{dy} + \xi_i \frac{dL_i}{dz}) dV = \int_V \beta(S_i - L_i) dV = \beta V(S_{P,i} - L_{P,i}) \quad (4.29)$$

En adoptant comme sens de balayage du maillage celui imposé par le vecteur \vec{s}_i , nous indiquons

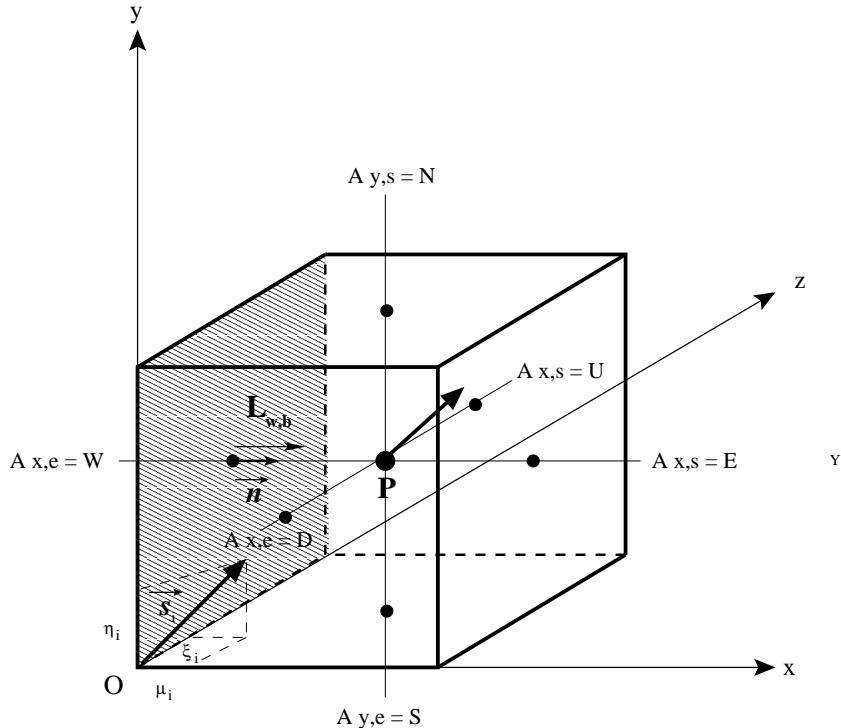


FIG. 4.6 – Système cubique maillée (vue 2D)

les grandeurs liées aux faces d'entrées par l'indice « e » et celles liées aux faces de sorties par « s » ; on indiquera avant l'axe auquel on se réfère par des indices x , y ou z (Fig.4.5.1). En prenant l'élément de volume $dV = dx dy dz$ dans un repère cartésien, nous développons l'expression (4.29) comme il suit :

$$\int_V (\mu_i \frac{L_{xs,i} - L_{xe,i}}{dx} + \eta_i \frac{L_{ys,i} - L_{ye,i}}{dy} + \xi_i \frac{L_{zs,i} - L_{ze,i}}{dz}) dx dy dz = \beta(S_i - L_i)V \quad (4.30)$$

où $L_{xe,i}, L_{xs,i}, L_{ye,i}, L_{ys,i}, L_{ze,i}$ et $L_{zs,i}$ sont les luminances à travers les six faces d'une cellule hexaédrique de volume V d'aires respectives $A_{xe}, A_{xs}, A_{ye}, A_{ys}, A_{ze}$ et A_{zs} (cf. Fig4.5.1). Si $\mu_i > 0$ la variation $dx = x_{xs,i} - x_{xe,i}$ sera positive et inversement si $\mu_i < 0$ alors $dx < 0$. On déduit que pour représenter un élément d'intégration dx toujours positif il faut utiliser la valeur absolue de μ_i et que cette remarque est aussi valable pour η_i et ξ_i . Ce qui revient à écrire :

$$\int_{A_{xs}} |\mu_i| L_{xs,i} dy dz - \int_{A_{xe}} |\mu_i| L_{xe,i} dy dz + \dots = \beta V(S_i - L_i) \quad (4.31)$$

En considérant la luminance comme étant uniforme tout point d'une face, nous obtenons :

$$|\mu_i| (A_{xs}L_{xs,i} - A_{xe}L_{xe,i}) + |\eta_i| (A_{ys}L_{ys,i} - A_{ye}L_{ye,i}) + |\xi_i| (A_{zs}L_{zs,i} - A_{ze}L_{ze,i}) = \beta V (S_i - L_i) \quad (4.32)$$

On résout l'équation (4.32) en utilisant des schémas de dérivation spatiale. Les schémas les plus classiques sont les schémas pondérés de type « diamant » et le schéma « Step ». Les schémas pondérés permettent d'écrire la luminance au centre de la maille, suivant sur les trois axes du repère cartésien (O, x, y, z) :

$$L_{P,i} = \gamma L_{xs,i} + (1 - \gamma) L_{xe,i} = \gamma L_{ys,i} + (1 - \gamma) L_{ye,i} = \gamma L_{zs,i} + (1 - \gamma) L_{ze,i} \quad (4.33)$$

Lorsque l'on a un schéma diamant, on utilise $\gamma = \frac{1}{2}$ ce qui correspond à une attribution du même poids aux luminances entrées et en sorties. Ce schéma peut amener à calculer des luminances $L_{xs,i}$, $L_{ys,i}$ ou $L_{zs,i}$ négatives. Ce qui n'est pas physique. Ceci fait que l'on lui préfère souvent le schéma Step.

Lorsque l'on a un schéma Step, on utilise $\gamma = 1$ ce qui revient à écrire $L_{P,i} = L_{xs,i}$. Ce schéma ne génère donc jamais de valeurs de luminances négatives. Cependant il est généralement moins précis que le schéma diamant.

A partir de ces trois formulations, on peut isoler les luminances aux faces de sortie en fonction de la luminance recherchée $L_{P,i}$ et des luminances connues aux faces d'entrée :

$$L_{xs,i} = (L_{P,i} + (\gamma - 1)L_{xe,i})/\gamma$$

$$L_{ys,i} = (L_{P,i} + (\gamma - 1)L_{ye,i})/\gamma$$

$$L_{zs,i} = (L_{P,i} + (\gamma - 1)L_{ze,i})/\gamma$$

puis les remplacer dans l'expression (4.32). Ce qui permet d'isoler par la suite le terme $L_{P,i}$ et d'écrire de manière générale en tout point P la luminance émise :

$$L_{P,i} = \frac{\gamma \beta V S_{P,i} + |\mu_i| A_x L_{xe,i} + |\eta_i| A_y L_{ye,i} + |\xi_i| A_z L_{ze,i}}{\gamma \beta V + |\mu_i| A_{xs} + |\eta_i| A_{ys} + |\xi_i| A_{zs}} \quad (4.34)$$

avec :

$$A_x = (1 - \gamma) A_{xs} + \gamma A_{xe}$$

$$A_y = (1 - \gamma) A_{ys} + \gamma A_{ye}$$

$$A_z = (1 - \gamma) A_{zs} + \gamma A_{ze}$$

Rappelons que les indices « e » et « s » indiquent que les grandeurs en question sont liées respectivement à la face d'incidence et la face de sortie. Le tableau de correspondance des surfaces en fonction des signes des cosinus directeurs, ci-dessous, complète cette formulation générale (4.34).

$\mu_i > 0$	$\mu_i < 0$	$\eta_i > 0$	$\eta_i < 0$	$\xi_i > 0$	$\xi_i < 0$
$A_{xe} = A_W$	$A_{xe} = A_E$	$A_{ye} = A_S$	$A_{ye} = A_N$	$A_{ze} = A_D$	$A_{ze} = A_U$
$A_{xs} = A_E$	$A_{xs} = A_W$	$A_{ys} = A_N$	$A_{ys} = A_S$	$A_{zs} = A_U$	$A_{zs} = A_D$

La procédure de résolution d'un problème par méthode aux ordonnées discrètes va donc se dérouler en trois étapes :

- On estime S_i et $L_{w,i}$ à partir des données initiales connues ;
- La direction discrète \vec{s}_i ayant déterminée le coin délimitant le système à partir on va débuté un balayage du maillage structuré, on calcule pour chaque maille $P_{nx,ny,nz}$ les inconnues $L_{P,i}, L_{xs,i}, L_{ys,i}$ et $L_{zs,i}$ à partir des valeurs de $L_{xe,i}, L_{ye,i}$ et $L_{ze,i}$ (si la face où l'on désire avoir la luminance d'entrée qui coïncide avec la paroi, cette luminance d'entrée vaudra $L_{w,i}$ sinon on la prendra égale à la luminance de sortie de la cellule précédente ayant en commun la face en question) ; puis on met à jour les luminances d'entrée mailles adjacentes suivantes ;
- On effectue ce balayage pour toutes les directions discrètes imposées par la quadrature angulaire utilisée.
- On peut alors calculer les différentes grandeurs que sont $G(\vec{r})$ et $\vec{q}(\vec{r})$ au centre $P(\vec{r})$ de chaque cellules et $H(\vec{r}_w)$ au centre $P(\vec{r}_w)$ de chaque élément de surface constituant les parois en utilisant les formulations discrétisées (4.8), (4.9) et (4.10).

Si les parois sont réflechissantes et/ou le milieu diffusant, une mise à jour des termes S_i et $L_{w,i}$ est nécessaire et une itération supplémentaire reprenant la procédure que nous venons de décrire doit être effectué. Dans notre étude nous avons considéré la réflexion comme étant diffuse, ce qui permet d'écrire plus simplement :

$$L_w = \epsilon L_{w,b} + \frac{1 - \epsilon}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_i < 0} \omega_i L_i | \vec{n} \cdot \vec{s}_i | \quad (4.35)$$

Nous ne nous sommes pas intéressé au phénomène de diffusion ; toutefois la prise en compte la diffusion isotrope ($\Phi = 1$ pour toutes les directions) peut être formulée comme il suit

$$S_{P,i} = (1 - \omega) L_{b,i} + \frac{\omega}{4\pi} G \quad (4.36)$$

où G a été calculé à l'itération précédente. Ici, ω représente l'albedo de diffusion.

Il faut donc fixer un critère de convergence δ permettant de déterminer si il est nécessaire de faire

une nouvelle itération en fonction du degré de précision recherché sur la solution. Divers critère de convergence ont été déjà proposés dans la littérature [58]. La condition que nous avons retenue est basée sur le rayonnement incident et elle s'écrit :

$$\delta > \frac{(Max(G^n) - Max(G^{n-1}))}{Max(G^{n-1})} \quad (4.37)$$

Un code permettant de calculer les transferts radiatifs dans une enceinte rectangulaire en trois dimensions a été développé avec cette algorithme, afin de fournir les éléments de comparaison pour un étude sur l'effet du maillages (cf. § 4.8.2.1).

Il est possible de simplifier le problème en ne prenant pas en compte la diffusion, ce qui ne modifie donc que le terme $S(\vec{s})$, en le réduisant uniquement à la luminance noire locale du milieu, et en ramenant le coefficient d'extinction au coefficient d'absorption. Dans une première approche, pour nos applications, nous considérons que le milieu n'est pas diffusant et nous fixons $\omega = 0$.

4.5.2 DOM pour maillage non-structuré

Nous avons volontairement explicité toute la procédure de calcul par DOM sur les maillages structuré parce qu'elle est identique à celle utilisée pour des maillages non structurés. L'application de la méthode aux Ordonnées Discrètes en maillage non structuré nécessite une reformulation du problème qui diffère peu de celle que nous avons abordée à la section précédente si ce n'est concernant la discrétisation spatiale utilisée pour définir les luminances aux centres et aux faces des cellules.

Nous avons formulé nos équations en fonction du terme S qui prend en compte l'émission et la diffusion entrante afin de montrer comment la diffusion isotrope peut être facilement introduite dans un calcul par itération. Étant observé que la prise en compte de la diffusion ne change rien à la formulation du schéma spatial, nous considérerons, dans cette section, un milieu émissif absorbant et non diffusant. Le terme S se simplement réduit à un terme de luminance noire émise L_b . L'équation de transfert radiatif est résolue pour toutes les directions discrètes \vec{s}_i :

$$\frac{dL_i}{ds_i} = \kappa(L_b(\vec{r}, \vec{s}) - L(\vec{r}, \vec{s})) \quad (4.38)$$

L'intégration de l'ETR sur le volume V d'un élément de maillage délimité par une surface Σ , et l'application du théorème de la divergence permettent d'écrire :

$$\int_{\Sigma} L \cdot \vec{s} \cdot \vec{n} d\Sigma = \int_V (\kappa L_b - \kappa L(\vec{s})) dV \quad (4.39)$$

Dans le cadre de notre étude, le domaine est discrétisé en cellules tétraédriques, qui sont les formes de volumes de contrôle les plus simples en trois dimensions. En effet, tout maillage structuré ou

non structuré peut-être « sous-maillé » par des tétraèdres. Considérons que L_j est la luminance moyenne sur la $j^{\text{ème}}$ face d'un volume de contrôle, associée au centre de cette face et défini comme il suit :

$$L_j = \frac{1}{A_j} \iint_{A_j} L(\vec{s}) \, dA_j \quad (4.40)$$

où A_j est l'aire de cette $j^{\text{ème}}$ face. Nous définissons aussi $L_{b,P}$ et L_P les luminances moyennées sur le volume V , associée au centre de la cellule P , telles que :

$$L_{b,P} = \frac{1}{V} \iiint_V L_b(\vec{s}) \, dV \quad (4.41)$$

$$L_P = \frac{1}{V} \iiint_V L(\vec{s}) \, dV \quad (4.42)$$

Ayant défini ces grandeurs moyennes pour un volume de contrôle, l'équation (4.39) peut être discréétisée :

$$\sum_{j=1}^{N_{face}=4} L_j (\vec{s}_i \cdot \vec{n}_j) A_j = \kappa V (L_{b,P} - L_P) \quad (4.43)$$

où \vec{n}_j est le vecteur unitaire de la normale sortante à la face j .

Nous définissons aussi D_{ij} comme étant le produit scalaire du $i^{\text{ème}}$ vecteur direction discrète avec ce vecteur normale de la $j^{\text{ème}}$ face du tétraèdre considéré :

$$D_{ij} = \vec{s}_i \cdot \vec{n}_j = \mu_i n_{xj} + \eta_i n_{yj} + \xi_i n_{zj} \quad (4.44)$$

Nous faisons alors l'hypothèse que L_b et $L(\vec{s})$ sont constants sur un volume de contrôle V et que les luminances L_j aux faces sont constantes sur chacune de ces faces. La discréétisation angulaire du problème est identique à celle utilisée en maillage structuré et a été exposée à la section § 4.4. Nous allons donc détailler, pour les trois schémas de dérivation spatial utilisés dans le code développé, les procédures de calcul de la luminance $L(\vec{s}_i)$.

4.5.2.1 Le schéma exponentiel

Sakami et al. ont proposé en 1998 [137, 140] un schéma de dérivation spatiale utilisable dans des configurations en trois dimensions et prenant en compte le phénomène d'extinction exponentielle le long du chemin optique à l'intérieur de la cellule considérée (on le retrouve aussi, dans la littérature, sous le nom de « DOM-FV-RT »). D'un point de vue formulation, ce schéma repose sur des idées employées dans le domaine des Méthodes aux Volumes Finis [131]. Considérons un

chemin optique $t = s_B - s_A$, où s_A et s_B sont respectivement les positions à l'entrée et à la sortie de la cellule, la solution de l'équation de transfert radiatif (cf. (4.38)) peut s'écrire :

$$L(\vec{s}, s_B) = L(\vec{s}, s_A)e^{-\kappa t} + \kappa \int_{s_A}^{s_B} L_b e^{-\kappa(s_B-s)} ds \quad (4.45)$$

L'intégration sur la trajectoire à travers la cellule donne :

$$L(\vec{s}, s_B) = L(\vec{s}, s_A)e^{-\kappa t} + (1 - e^{-\kappa t})L_b \quad (4.46)$$

Pour une direction \vec{s}_i et une position finale s_B à la face de sortie, la position de départ s_A à la face d'entrée et la trajectoire associée t sont fixées. La luminance L_l à travers une face de sortie l , telle qu'elle a été définie précédemment (Eq. 4.40), s'écrit :

$$L_l = \frac{1}{A_l} \int_{A_l} [L(\vec{s}_i, s_A)e^{-\kappa t} + L_b(1 - e^{-\kappa t})] dA_l \quad (4.47)$$

Sakami a démontré [140] que, connaissant l'épaisseur optique $\tau_i = \kappa l_{max,i}$, où $l_{max,i}$ représente la longueur maximale à l'intérieur d'une cellule selon la direction \vec{s}_i (segments [AB] de la figure Fig.4.7), pour les trois différents types d'événements présentés à la figure Fig.4.7, on pouvait calculer la luminance L_l à une face de sortie l comme il suit :

$$L_l = \left(\sum_{\substack{k \\ D_{ik} < 0}} \frac{A_{lk}}{A_l} L_k \right) \chi_i + L_b(1 - \chi_i) \quad (4.48)$$

où A_l est l'aire de la face de sortie et A_{lk} représente l'aire de la portion de la face de sortie l , obtenue par projection de la face d'entrée k sur cette face de sortie l selon la direction \vec{s}_i . χ_i est un coefficient typique du modèle permettant de prendre en considération l'extinction exponentielle à travers la cellule :

$$\chi_i = \frac{1}{A_l} \int_{A_l} e^{-\kappa t} dA_l = \frac{2}{\tau_i} \left(1 - \frac{1 - e^{-\tau_i}}{\tau_i} \right) \quad (4.49)$$

La complexité de ce modèle repose sur le calcul des épaisseurs géométriques maximales $l_{max,i}$ pour tous les cas possibles présentés à la figure Fig.4.7. D'un point de vue numérique, $l_{max,i}$ peut être déterminé si l'on connaît les coordonnées des points A et B. En se référant à l'équation (4.43), L_P est directement calculé par :

$$L_P = L_{b,P} - \frac{1}{\kappa V} \sum_{j=1}^{N_{face}=4} D_{ij} A_j L_j \quad (4.50)$$

D'un point de vue numérique, bien que ce schéma permette d'éviter des valeurs négatives pour toutes les luminances L_j obtenues aux faces d'une cellule, il ne garantit pas que la luminance L_P calculée au centre d'une cellule soit toujours positive, en particulier quand κ devient très petit ($\kappa \ll 10^{-2} \text{ m}^{-1}$).

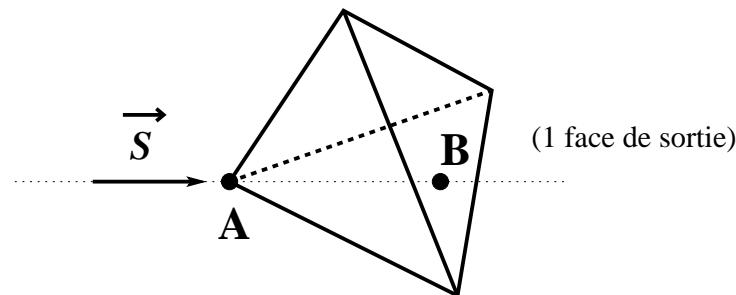
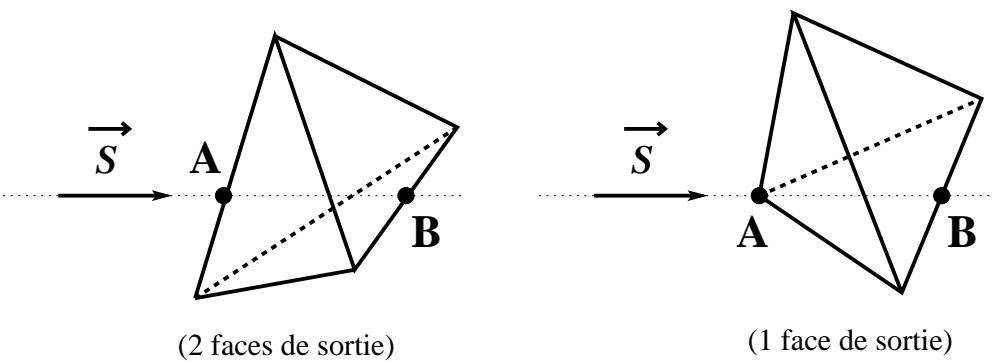
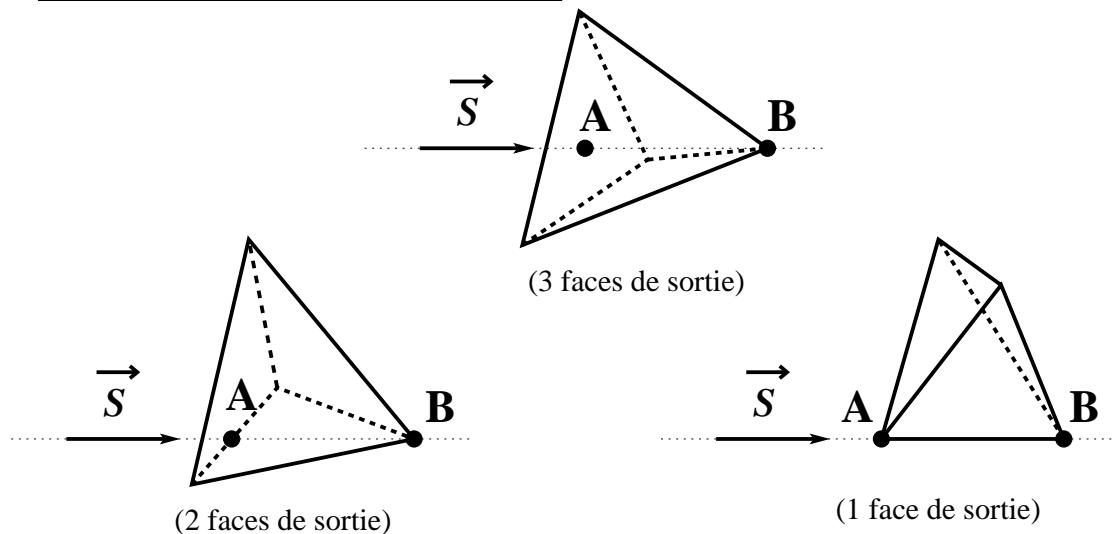
Type d'évènement I : 3 faces d'entréeType d'évènement II : 2 faces d'entréeType d'évènement III : 1 face d'entrée

FIG. 4.7 – Six façons de traverser un tétraèdre du point A au point B en fonction du nombre de faces en entrées et en sorties.

4.5.2.2 *Le schéma Step (ou Upwind)*

En 2000 [97], J.Liu a testé le schéma « Step » qui correspond au schéma « Upwind » habituellement utilisé en CFD. Ce schéma avait déjà été proposé par Chai et al., en 1995 [15], pour résoudre l'équation de transfert radiatif par une Méthode des Volumes Finis dans des géométries irrégulières en utilisant des coordonnées curvilignes. Dans de nombreuses études antécédentes, ce schéma avait été appliqué pour des maillages structurés cartésiens afin d'éviter les luminances négatives qui peuvent apparaître lorsque l'on utilise des schémas tels que le schéma « Diamant » [16]. En ne considérant pas le phénomène de diffusion tel que l'a fait Liu, la luminance L_P peut être obtenue au centre d'une cellule en appliquant la relation suivante :

$$L_P = \frac{\kappa V L_b + \sum_{\substack{j=1 \\ D_{ij} < 0}}^{N_{face}} D_{ij} A_j L_j}{\kappa V + \sum_{\substack{j=1 \\ D_{ij} > 0}}^{N_{face}} D_{ij} A_j} \quad (4.51)$$

où N_{face} est le nombre de faces que possède la cellule considérée ($N_{face} = 4$ dans notre étude). Les luminances aux faces de sorties sont prises égales à la luminance L_P calculée au centre de la cellule.

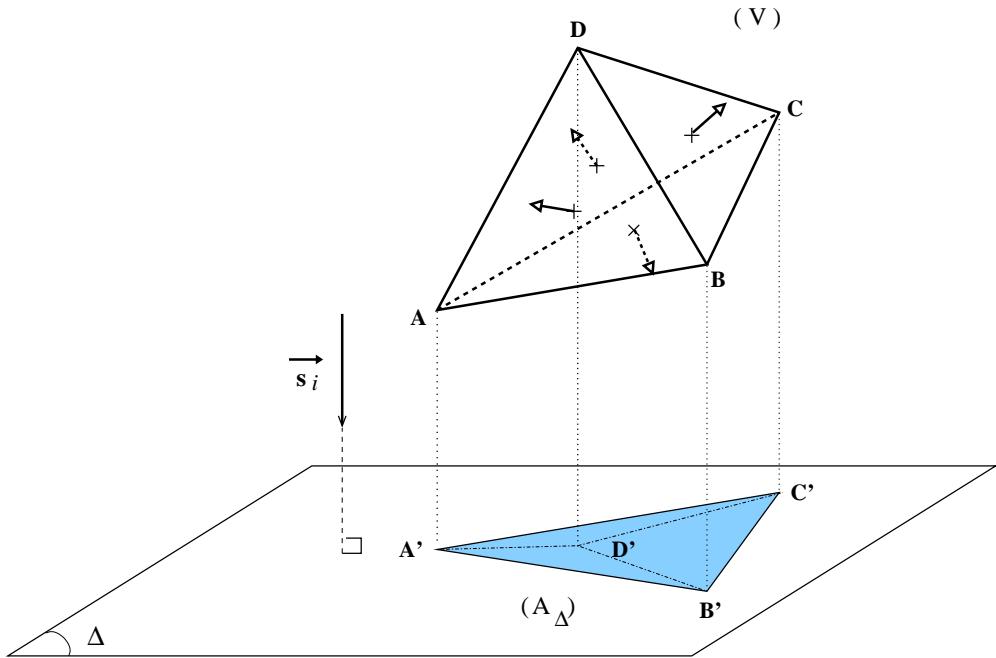
4.5.2.3 *Les schémas de flux moyens (Mean Flux Schemes)*

Afin de calculer les luminances rayonnées aux faces d'un volume de contrôle, Ströhle et al. [148] ont proposé un schéma de dérivation spatial basé sur les flux moyens qui s'avère très intéressant dans le cas de maillages non structurés. Le schéma en question repose sur la formulation suivante :

$$L_P = \alpha \overline{L_{out}} + (1 - \alpha) \overline{L_{in}} \quad (4.52)$$

où $\overline{L_{in}}$ et $\overline{L_{out}}$ sont respectivement les luminances moyennées sur les faces d'entrées et les faces de sortie du volume de contrôle, définies par :

$$\overline{L_{in}} = \frac{\sum_j D_{ij} A_j L_j}{\sum_j D_{ij} A_j} \quad (4.53)$$

FIG. 4.8 – Transformation géométrique liée au terme D_{ij} .

et

$$\overline{L_{out}} = \frac{\sum_j^{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j L_j}{\sum_j^{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j} \quad (4.54)$$

En utilisant $\overline{L_{out}}$ et $\overline{L_{in}}$ dans l'équation (4.43), on obtient après quelques calculs algébriques :

$$L_P = \frac{\alpha V \kappa L_b - \Theta \sum_j^{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j}{\alpha \kappa V + \sum_j^{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j} \quad (4.55)$$

avec :

$$\Theta = \alpha - (1 - \alpha) \frac{\sum_j^{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j}{\sum_j^{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j} \quad (4.56)$$

Comme nous le représentons à la figure Fig.4.8, si nous considérons que le produit scalaire D_{ij} est un terme de transformation analytique correspondant à une projection de la surface A_j , suivant

le vecteur \vec{s}_i , sur le plan Δ perpendiculaire à ce vecteur, nous pouvons écrire l'égalité suivante :

$$\sum_{\substack{j \\ D_{ij} > 0}} D_{ij} A_j = - \sum_{\substack{j \\ D_{ij} < 0}} D_{ij} A_j = A_\Delta \quad (4.57)$$

Ainsi, pour toute valeur de α appartenant à son domaine de définition $]0, 1]$, nous avons $\Theta = 1$ et finalement, l'équation (4.55) peut être reformulée plus simplement :

$$L_P = \frac{\alpha V \kappa L_b - \sum_{\substack{j \\ D_{ij} < 0}} D_{ij} A_j L_j}{\alpha \kappa V + \sum_{\substack{j \\ D_{ij} > 0}} D_{ij} A_j} \quad (4.58)$$

Le cas $\alpha = 1$ correspond au schéma Step (cf. (4.51)) utilisé par Liu et al. [97]. Le cas $\alpha = 0.5$ sera appelé Schéma Diamant en Flux Moyens (DMFS pour Diamond Mean Flux Scheme). Il peut être comparé au schéma « Diamant » utilisé pour des maillages structurés, cependant Ströhle a montré [148] que le DMFS utilisé sur un maillage structuré est différent du schéma Diamant classique. Ceci est lié à l'approximation sous-jacente à la formulation en flux moyens. Les schémas Diamant sont formellement plus précis que les schémas Step.

Après avoir effectué la calcul de L_P à partir de l'équation (4.55), la luminance aux faces pour lesquelles $D_{ij} > 0$ est prise égale $\overline{L_{out}}$ obtenue à partir de l'équation (4.52) (toutes les faces de sortie reçoivent la même luminance). Il peut arriver que ce terme de luminance aux faces de sortie calculé soit négatif. $\overline{L_{out}}$ est négatif sous la condition suivante :

$$L_{b,P} < C_{neg} \cdot \overline{L_{in}} \quad (4.59)$$

avec

$$C_{neg} = (1 - \alpha) - \frac{A_\Delta}{\kappa V} \quad (4.60)$$

Le calcul qui nous a permis de déterminer cette condition de positivité du schéma DMFS est développé à l'Annexe A.

4.5.2.4 Procédure de « réordonnancement » (Sweeping Optimization)

Pour une géométrie simple possédant un maillage structuré, nous avons montré que l'on pouvait balayer les mailles par ordre croissant sur x et y selon la direction discrète \vec{s}_i choisie. Ainsi, à titre d'exemple en deux dimensions (cf. Fig4.5.1), pour une direction discrète \vec{s}_i pour laquelle μ_i et η_i sont positifs, il suffit que les luminances $L(P(nx, ny + 1))$ et $L(P(nx + 1, ny))$ soient connues pour pouvoir calculer la luminance $L(P(nx + 1, ny + 1))$. La chose s'avère automatique si on

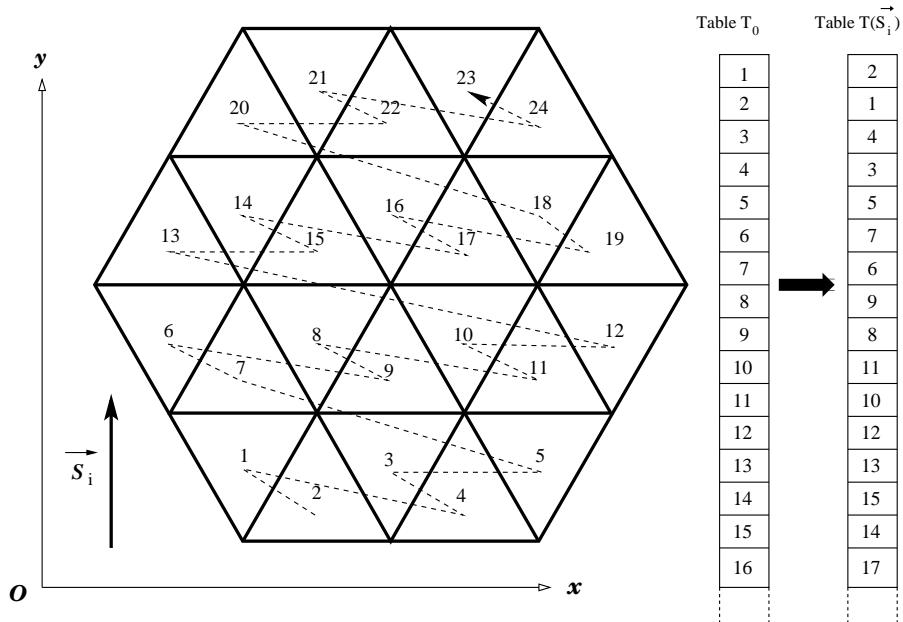


FIG. 4.9 – Principe du réordonnancement

part de la cellule $(1, 1)$ et que l'on calcule toutes les cellules d'une ligne de $(1, j)$ à $(nx + 1, j)$ en faisant varier j de 1 à $ny + 1$. Cette démarche est gouvernée par la direction discrète \vec{s}_i qui permet de définir le quadrant (ou octant en 3D) à partir duquel il faut commencer le balayage.

Lorsque l'on traite un maillage non structuré, et plus particulièrement un maillage composé de tétraèdres, il est impossible de définir la position d'une cellule par un triplet (i, j, k) . De plus, il existe de fortes irrégularités qui font que l'on ne saura jamais, d'emblée, si les luminances aux faces d'entrées nécessaires à la résolution d'une cellule ont déjà été calculées. Une façon de surmonter ce problème consiste à effectuer des itérations jusqu'à connaître les valeurs de ces luminances et qu'elles soient en accord avec la solution. Ceci présente les désavantages notables d'être lourd en temps de calcul et de nécessiter un critère de convergence fixant la fin des itérations (la solution obtenue est donc une solution approchée).

Pour éviter cela, les volumes de contrôle doivent être traités en suivant un ordre de balayage tel que les luminances aux faces d'entrées des cellules soient toujours connues. Il suffit de savoir exactement l'ordre dans lequel les cellules doivent être résolues, une à une, et ce pour chaque direction discrète. Les cellules d'un maillage non structuré sont numérotées dans un ordre arbitraire défini par le maillage dès leur génération. Un procédure de réordonnancement ou optimisation du balayage permet de lister, pour une direction donnée, l'ordre de traitement des cellules garantissant que chaque cellule sera calculable (cf. Fig. 4.9). Un algorithme d'optimisation du balayage a été utilisé dans nos travaux. Nous avons remarqué que cette procédure d'optimisation permet de créer un tableau (ensemble des listes de balayages obtenues pour chaque direction) qui reste

valable pour le maillage donné et la quadrature choisie quelles que soient les données physiques du problème (ceci est très important pour pouvoir envisager le couplage à long terme). Cette procédure d'optimisation du balayage a donc été construite comme un post-traitement des données de maillage en dehors du code de calcul des transferts radiatifs.

Nous résumerons cette procédure de la façon suivante :

- Pour réordonner les cellules, nous devons avant tout défi nir la direction discrètes \vec{s} .
- Pour chaque cellule du maillage, nous défi nissons, pour cette direction, le nombre total de faces d'entrées $N_{f,entre}$ et le nombre de faces d'entrées connues $N_{f,connue}$ (initialement, seules les faces communes avec les parois sont considérées comme connues).
- Nous effectuons une recherche par tri (type « tri à bulles ») des cellules pour lesquelles l'égalité $N_{f,entre} = N_{f,connue}$ est vérifi ée.
- Dès qu'une cellule de ce type est repérée, elle intègre la liste de balayage et une mise à jour des données $N_{f,connue}$ est faite pour les cellules dont les faces d'entrées correspondent aux faces de sorties de la cellule repérée.
- Nous réitérons la procédure de recherche par tri sur les cellules restantes jusqu'à l'obtention de la liste complète puis nous retournons au premier point afi n de défi nir une nouvelle direction pour créer une nouvelle liste associée.

L'utilisation d'une méthode basique de « tri à bulles » reste lourde en temps de calcul pour des maillages aussi denses que ceux utilisés en CFD. Il est envisageable d'améliorer cette procédure d'optimisation du balayage.

Dans le cas de problèmes où l'on considère les parois comme étant noires, le problème est fermé et l'optimisation de balayage permet d'obtenir la solution « exacte » (par opposition à celle approchée en utilisant un critère de convergence) directement en une seule itération. L'optimisation de balayage permet aussi d'éviter un trop grand nombre d'itérations pour les cas où le milieu est diffusant ou les parois réflechissantes.

4.6 Discréétisation spectrale : Modèle SNB-*ck*

Pour prendre en compte la dimension spectrale du rayonnement, nous avons intégré sur l'espace des fréquences les grandeurs physiques obtenues par résolution de l'ETR, telle que nous l'avions formulée en monochromatique :

$$\frac{dL_{\nu,i}}{ds_i} = \kappa_{\nu}(L_{b,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) - L_{\nu}(\vec{r}, \vec{s})) \quad (4.61)$$

Nous défi nissons ainsi le terme source radiatif S_r comme étant le bilan radiatif, sur toutes les fréquences et dans toutes les directions de l'espace la différence entre ce qui est émis et ce qui est

absorbé en un point $P(\vec{r})$ de l'espace :

$$S_r(\vec{r}) = \int_0^\infty S_{r,\nu}(\vec{r}) d\nu = \int_0^\infty \int_{4\pi} \kappa_\nu (L_{b,\nu}(\vec{r}, \vec{s}) - L_\nu(\vec{r}, \vec{s})) d\Omega d\nu \quad (4.62)$$

soit finalement :

$$S_r(\vec{r}) = \int_0^\infty \kappa_\nu (4\pi L_{b,\nu}(\vec{r}) - G_\nu(\vec{r})) d\nu \quad (4.63)$$

Afin de prendre en compte le rayonnement des gaz de combustion, plus précisément des espèces rayonnantes H_2O , CO_2 et CO , nous avons utilisé le modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés développé précédemment (voir § 2.3). L'espace des fréquences est donc découpé en N_{band} bandes étroites. Sur chacune de ces bandes la luminance noire est considérée comme étant constante. Nous notons, pour une bande étroite, $\overline{L_{b,\Delta\nu_i}}(\vec{r})$ la luminance noire obtenue à la fréquence ν_i au centre de la i^{me} bande de largeur $\Delta\nu_i$. Pour une bande étroite i , nous pouvons définir les paramètres du modèle de Malkmus $\overline{\kappa}_i$ et Φ_i , à partir de la banque de données *SNB* fournie par le laboratoire EM2C de Paris [146]. Nous calculons, par une méthode de k -distribution, les N_{quad} coefficients d'absorption κ_{ij} correspondant aux N_{quad} points de quadrature g_j permettant de discréétiser l'intégration faite sur la bande étroite réorganisée i (cf. §2.3.1, (2.103)) et à leurs poids associés ω_j . Nous résolvons l'ETR pour chaque point de quadrature j donné dans chaque bande étroite i . Nous déterminons ainsi les grandeurs G_{ij} et $H_{w,ij}$ calculées en prenant $\kappa_\nu = \kappa_{i,j}$ dans l'équation (4.61). Le terme source radiatif, prenant en compte la dépendance spectrale du rayonnement des gaz, peut donc être discréétisé et mis sous la forme suivante :

$$S_r(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_{band}} \Delta\nu_i \sum_{j=1}^{N_{quad}} \omega_j \kappa_{i,j} (4\pi \overline{L_{b,\Delta\nu_i}}(\vec{r}) - G_{i,j}(\vec{r})) \quad (4.64)$$

Nous intégrerons aussi le flux incident aux parois sur le domaine fréquentiel en posant :

$$H(\vec{r}_w) = \sum_{i=1}^{N_{band}} \Delta\nu_i \sum_{j=1}^{N_{quad}} \omega_j H_{i,j}(\vec{r}) \quad (4.65)$$

Liu et al. ont effectué en 2001 une étude comparative sur les différents modèles actuels permettant de représenter les propriétés radiatives de mélange de gaz composés d'espèces rayonnantes en prenant en compte les phénomènes de recouvrement de bandes [96]. Le modèle que nous avons retenu, car proposant le meilleur compromis entre précision et gain en temps de calcul, est le modèle basé sur la limite optiquement mince et donnant $\kappa_{mélange}$ et $\Phi_{mélange}$ pour un mélange de N_{gaz} gaz tels que :

$$\overline{\kappa}_{mélange} = \sum_{i=1}^{N_{gaz}} \overline{\kappa}_i \quad (4.66)$$

et

$$\frac{\bar{\kappa}_{mélange}^2}{\Phi_{mélange}} = \sum_{i=1}^{N_{gaz}} \frac{\bar{\kappa}_i^2}{\Phi_i} \quad (4.67)$$

Nous nous sommes appuyé sur une autre étude de Liu et al. [92] afin de pouvoir estimer la qualité de la quadrature de Gauss-Legendre que nous utilisons par rapport à celle de Gauss-Lobatto proposée par Rivière et al. [135]. Cette étude a montré qu'il n'était pas nécessaire de prendre un grand nombre de points de quadrature pour pouvoir bien représenter la dépendance spectrale sur une bande étroite.

4.7 Parallélisation du code DOMASIUM

La parallélisation d'un code consiste à partager et répartir sur différents processeurs les actions qu'ordonne ce code. Dans la littérature, certains auteurs ont déjà abordé le problème de la parallélisation de la méthode aux ordonnées discrètes. Coelho et al. [58] ont observé qu'il était préférable de répartir les directions discrètes sur différents processeurs plutôt que de répartir des portions de maillages. En effet, un interfaçage permettant la transmission de données entre les différentes portions de maillage est nécessaire, alors que chaque calcul pour une direction discrète est totalement décorrélé des autres. Même pour le traitement de la réflexion et de la diffusion, toutes les informations sont d'abord réunies avant de procéder à une itération supplémentaire. Cependant, cette étude a été menée dans le cas d'un milieu gris (un seul calcul spectral). Dans notre étude, l'introduction d'un modèle spectral aussi élaboré que le modèle SNB-ck, nous amène à effectuer plus de 1600 calculs monochromatiques pour reconstruire les luminances intégrées sur le spectre des fréquences. Chaque calcul monochromatique doit être effectué sur toutes les directions discrètes afin de reconstruire les G_{ij} . Nous avons donc choisi de procéder à une parallélisation par rapport aux bandes étroites. La principale raison de ce choix est que la procédure de calcul des coefficients d'absorption du modèle SNB-ck est coûteuse (inversion de la fonction $g(k)$ faite par dichotomie, cf. §2.3.1) et ne doit donc pas être effectuée pour chaque direction puisque les données spectrales calculés pour toutes les cellules ne changent pas. Il n'est pas envisageable de stocker des milliers de coefficients d'absorption pour chaque cellule de maillage en sachant que les maillages de la CFD actuels atteignent le million de mailles.

Toutefois, il est possible de paralléliser la méthode sur les directions discrètes. Cela peut s'avérer plus judicieux si l'on souhaite associer au DOM un modèle global du type WSGG sur un grand nombre de processeurs (ex. : cinq gaz gris sur dix processeurs).

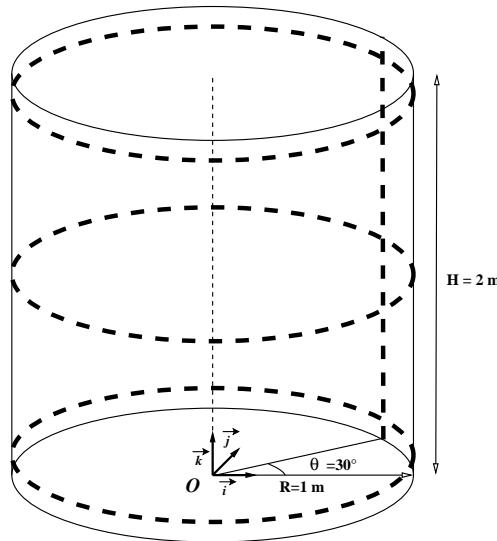


FIG. 4.10 – Cas test du cylindre contenant un milieu transparent

4.8 Validation : Résultats et discussion

Nous avons développé un code de transfert radiatif basé sur la Méthode aux Ordonnées Discrètes permettant de travailler sur des maillages non structurés, directement issus de meilleurs tels que GAMBIT (Fluent) ou CFDGeom. Le code radiatif recrée lui même la table de connectivité et repère les mailles et faces juxtaposées aux parois. Pour prendre en compte les propriétés spectrales des gaz de combustion nous avons intégré un modèle SNB-*ck*, ainsi que les différents schémas de discrétisation angulaire et spatiale que nous avons présentés dans les sections § 4.4 et § 4.5.2. Le module de création de la table de connectivité entre cellules et la fonction d'optimisation du balayage s'avèrent coûteux en temps de calcul mais ne sont effectués qu'une fois avant le calcul. Nous avons mené de nombreuses campagnes de validation afin de s'assurer de l'efficacité et d'évaluer la précision de ce code.

4.8.1 Etude de la dépendance angulaire

Le code a été testé au niveau de l'efficacité des sets de quadrature angulaire qu'il intègre. Un test mettant en évidence l'effet de rayon (« ray effect ») a été mené. Ce phénomène se traduit par une incapacité des **DOM** à prendre en compte les contributions de la luminance pour des directions n'appartenant pas au set de quadrature. Pour éliminer les effets de rayon il suffit d'augmenter le nombre de directions discrètes. Nous avons donc modélisé un cylindre de hauteur $H = 2 \text{ m}$ et de rayon $R = 1 \text{ m}$, décomposé en 26000 tétraèdres environ. Nous avons considéré que la paroi latérale et la face supérieure étaient noires et froides et que la face inférieure était noire et à une

température T_w . Le milieu est considéré comme transparent ($\kappa = 0. \text{ m}^{-1}$). Une solution « pseudo-exacte » a été déterminée par une méthode de tracé de rayon (cf. § 2.2.3.2) en prenant un très grand nombre de rayons ($N_{\text{rayons}} = 200000$). Nous avons testé les quadratures suivantes :

- **FVM** 10x10 (800 directions), **FVM** 5X5 (200 directions), **FVM** 3X3 (72 directions), **FVM** 2X2 (32 directions)
- T_{10} (800 directions), T_5 (200 directions), T_3 (72 directions), T_2 (32 directions)
- S_{12} (168 directions), S_8 (80 directions), S_4 (24 directions),

sur les lignes représentées en pointillés gras sur la figure 4.10.

Le flux aux parois adimensionné par σT_w^4 est obtenu le long d'une ligne parallèle à l'axe du cylindre (tel que $\theta = 30^\circ$) et sur la circonférence du cylindre aux hauteurs $H = 0.05Z_0$, $H = 0.5Z_0$ et $H = 0.95Z_0$, Z_0 étant la hauteur du cylindre. Les résultats sont tracés sur les Fig.4.11, 4.12 et 4.13. Les solutions obtenues par Ray Tracing sont représentées en trait continu sur ces figures. Il apparaît qu'augmenter le nombre de directions discrètes permet de mieux représenter les variations angulaires du rayonnement sur 4π et donc de réduire l'effet de rayon. Bien sûr le temps de calcul est proportionnel au nombre de directions. A titre d'exemple, un test simple effectué sur cette géométrie avec une quadrature T_2 (soit 32 directions) dure environ 30 secondes mais passe à environ 550 secondes avec une T_{10} (800 directions). Nous pouvons aussi conclure qu'aucune méthode n'élimine réellement le problème d'oscillations dû aux discontinuités que génère la quadrature angulaire.

Si on compare les différentes quadratures à nombre de directions discrètes égales, la supériorité générale d'un type de quadrature sur l'autre n'est pas flagrante. Nous pouvons donc utiliser de façon totalement arbitraire un type de discrétisation angulaire plutôt qu'un autre. Cependant une S_4 (24 directions) permet d'avoir des résultats du même ordre qu'une T_2 (32 directions) ou une **FVM** 2X2 (32 directions) pour 25% de directions et donc de temps de calcul en moins. Les méthodes S_N reste donc plus adaptées pour un problèmes ne nécessitant pas beaucoup de directions discrètes.

Nous avons aussi étudié l'influence du maillage sur le « ray effect ». Ceci fait l'objet de l'annexe C.

Récemment, Koch et al. ont pu mener une étude beaucoup d'autres types de quadrature [73]. Ils en ont aussi déduit qu'aucune quadrature angulaire (pour un nombre de directions raisonnables) ne permettait d'éliminer l'effet de rayon mais que certaines étaient plus aptes à le réduire. Ils recommandent tout de même deux quadratures qui semblent efficaces : la LC_{11} de Lebedev (96 directions) et la DCT020-2468 (48 directions). Nous adopterons les quadratures S_N dans la plupart des tests effectués par la suite. Nous utiliserons aussi comme référence la quadrature LC_{11} proposée par Koch.

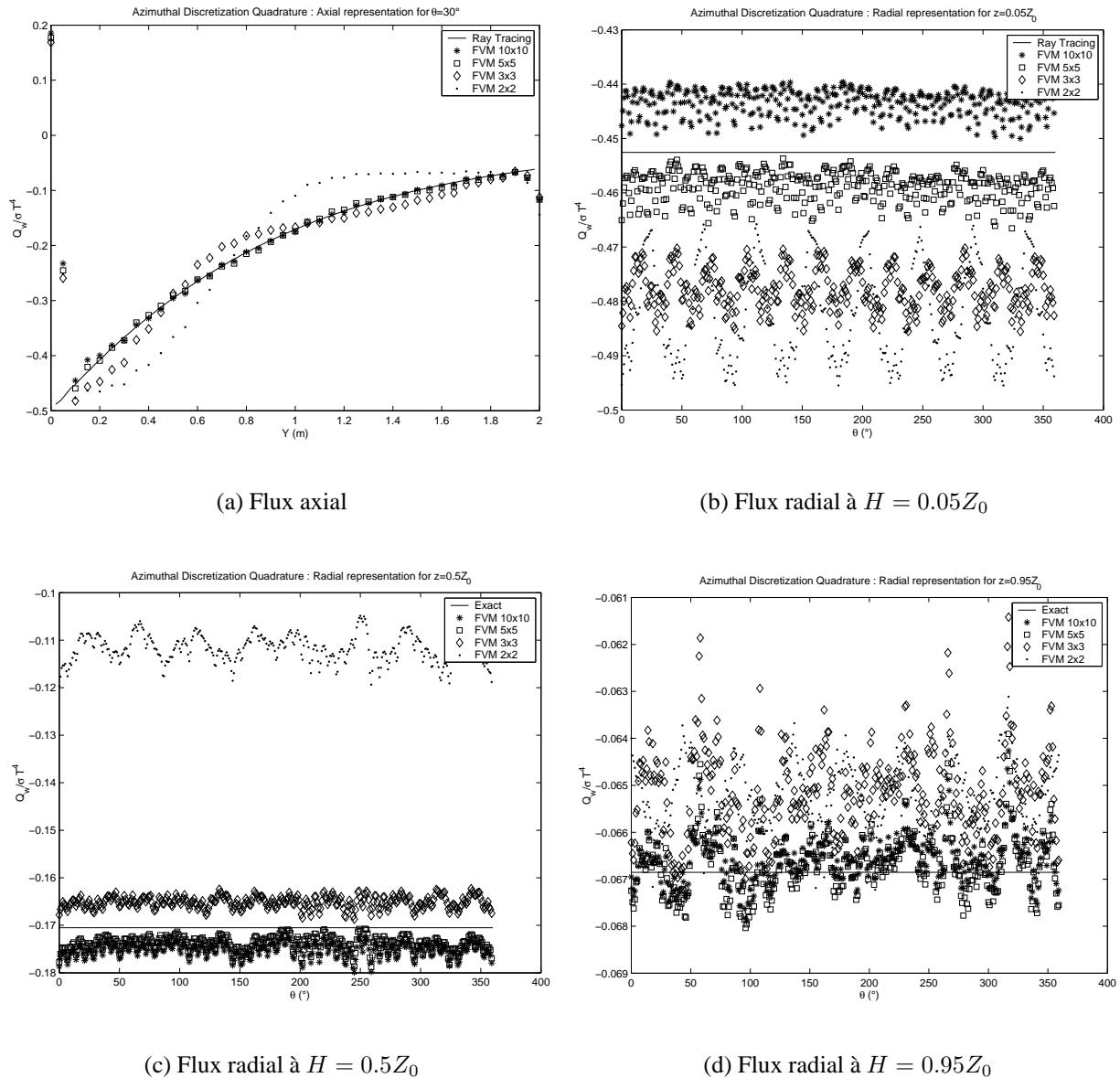
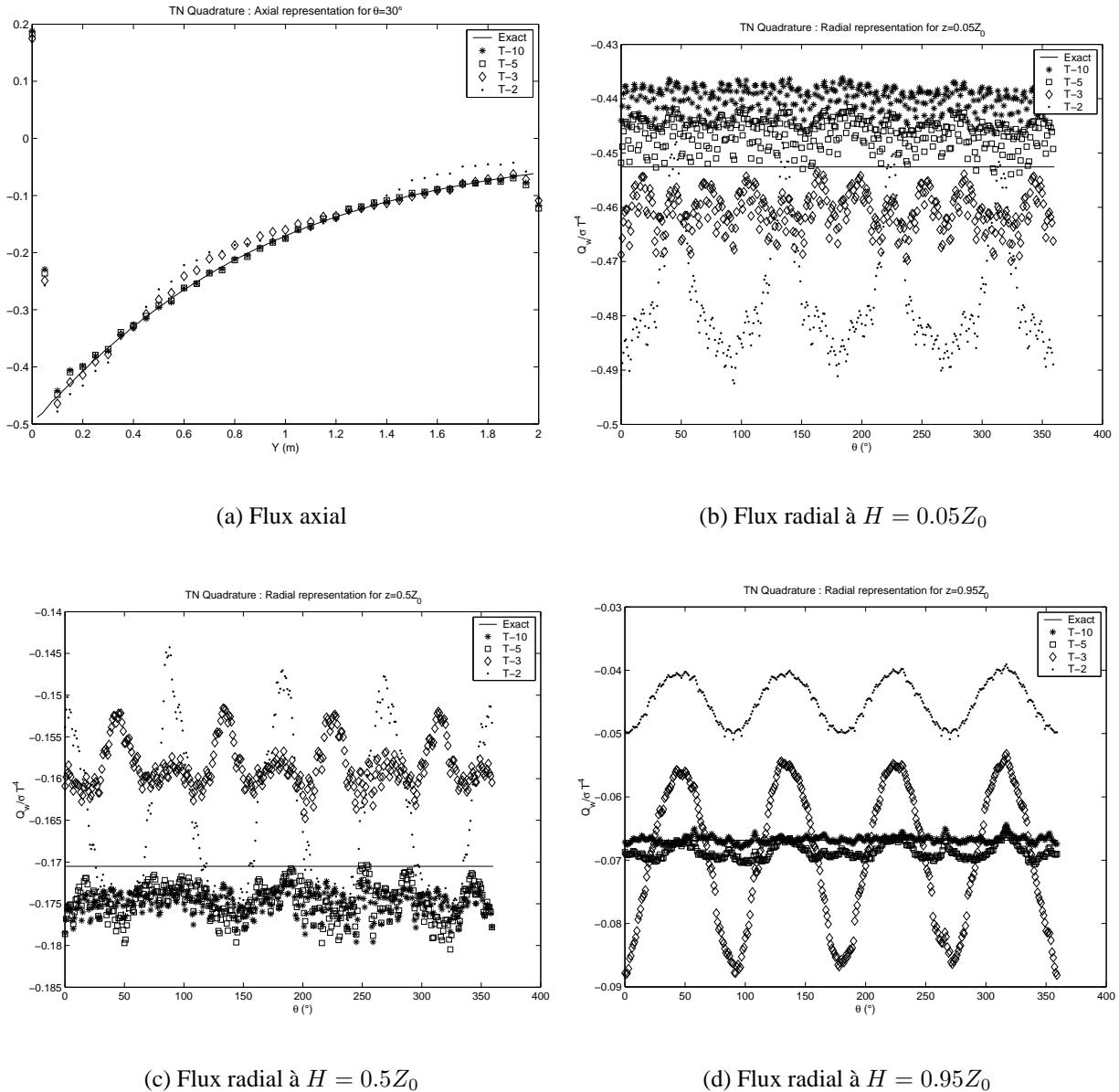
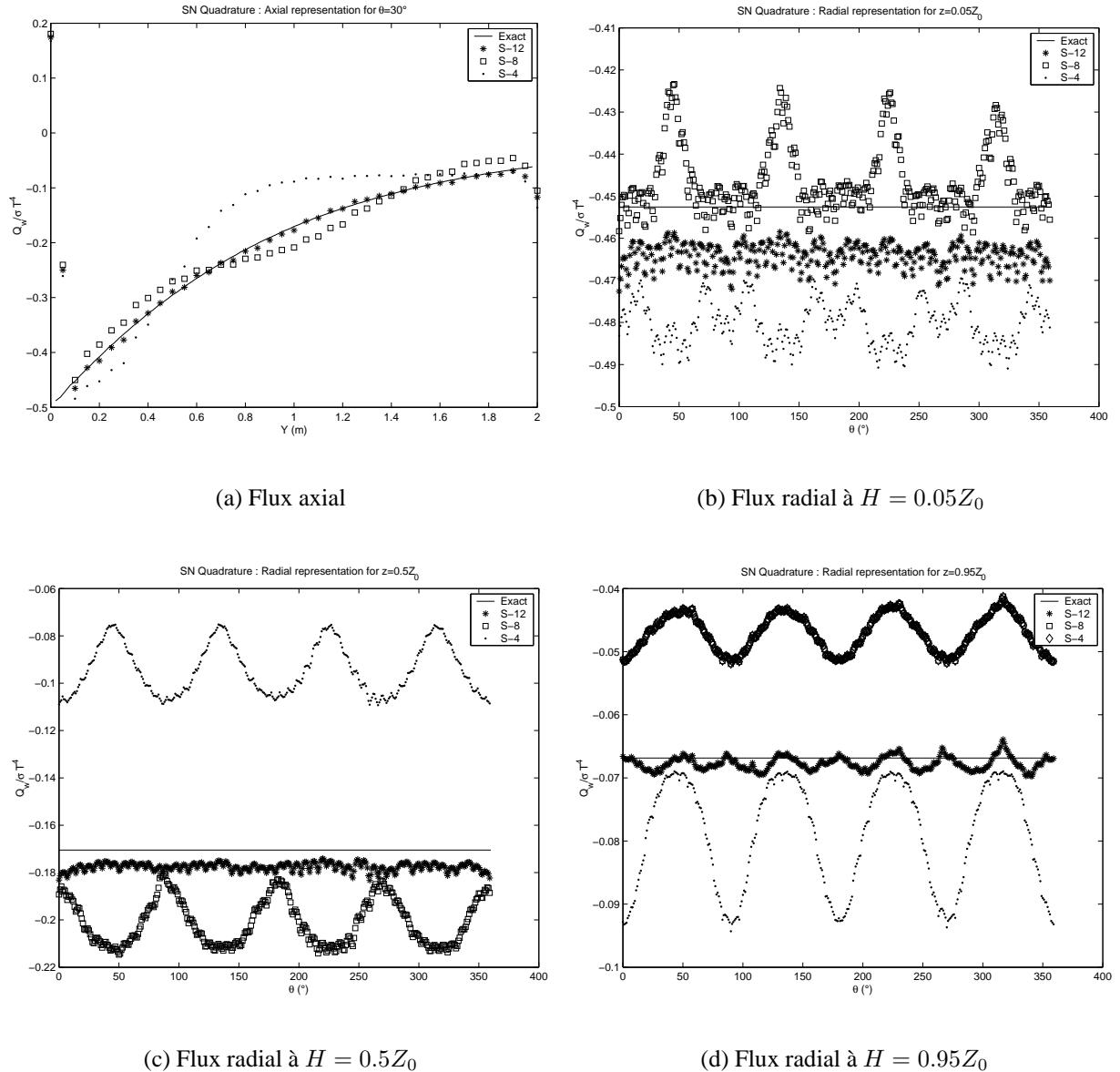


FIG. 4.11 – Flux aux parois adimensionné aux parois pour les quadratures polaires/azimutales


 FIG. 4.12 – Flux aux parois adimensionné pour les quadratures T_N

FIG. 4.13 – Flux aux parois adimensionné pour les quadratures S_N

4.8.2 Etude des schémas de dérivation spatiale

L'étude menée sur l'efficacité des différents schémas de dérivation spatiale que nous avons pu utiliser dans le code DOMASIUM a fait l'objet d'un rapport interne soumis à la publication dans une revue scientifique internationale. Nous reprenons donc ici la partie de ce document traitant spécifiquement des applications et résultats que nous avons obtenus et des conclusions qui ont été faites.

4.8.2.1 *Gray media cases*

Several simple test cases have been carried out to compare the efficiency of the spatial differencing schemes for different types of enclosures containing a participating and homogenous medium that are summarized in the following table :

Type of geometry	Participating medium	Calculations
Parallelepipedic	Gray and Isothermal	Q_w
Cylindrical	Gray and Isothermal	Q_w and S_r
Spherical	Gray and Isothermal	$S_{r,C}$
Spherical	Gray and Non-Isothermal	$S_{r,C}$
Spherical	Non-Gray and Non-Isothermal	$S_{r,C}$

A first test using the parallelepipedic geometry allows us to compare the solutions obtained using structured and unstructured grids, and to have a good representation of the hemispherical wall flux by the angular quadrature. This configuration type commonly used for validation exercises allows to have a good representation of three dimensionnal wall fluxes by the angular quadrature. The next test concerns the cylindrical geometry to illustrate the influence of the angular quadrature on the radiative heat flux at the walls. The third test, that is more academic than the two first ones, has the advantage of yielding an analytical solution of the radiative source term at the center of the sphere. It's used to further investigate the conclusions of the preceeding test case in regards of typical combustion situations. In particular, the influence of the optical thickness has been investigated in details in a wide range representative of infra-red gaseous line spectra. To go towards combustion situations, we perform then a calculation that integrates the gaseous line spectra properties of water vapor. It should be pointed out that for output purposes an interpolation is done

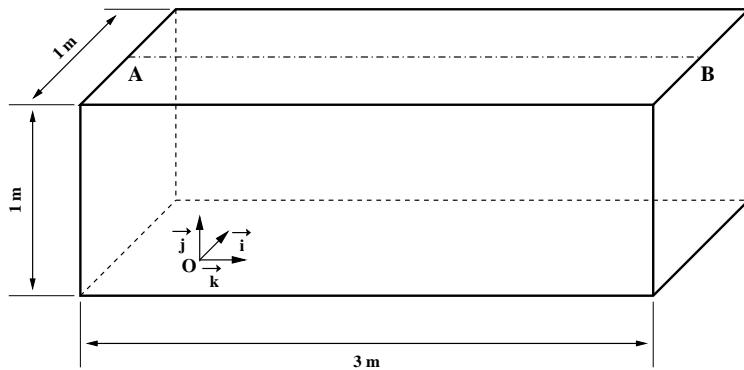


FIG. 4.14 – Parallelépipedic enclosure

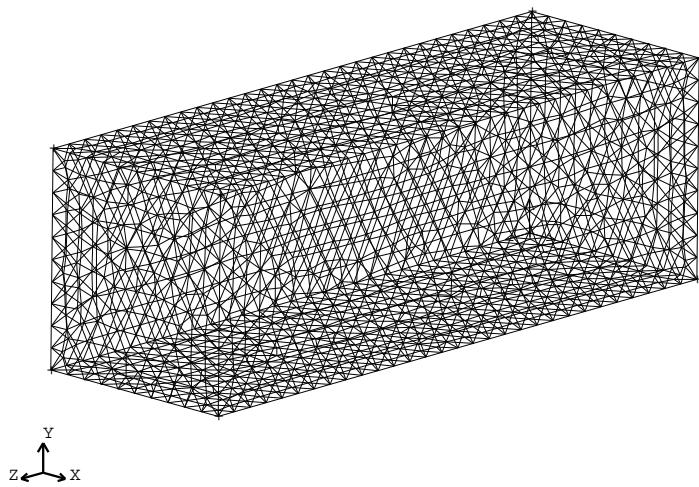


FIG. 4.15 – Black walled rectangular enclosure grid (number of control volumes = 20425 tetrahedra).

on the results obtained with the unstructured code in order to have the values for a given axis or a given point. This 3D-interpolation can generate inaccuracies, especially for the points taken near the walls or when the grid is coarse.

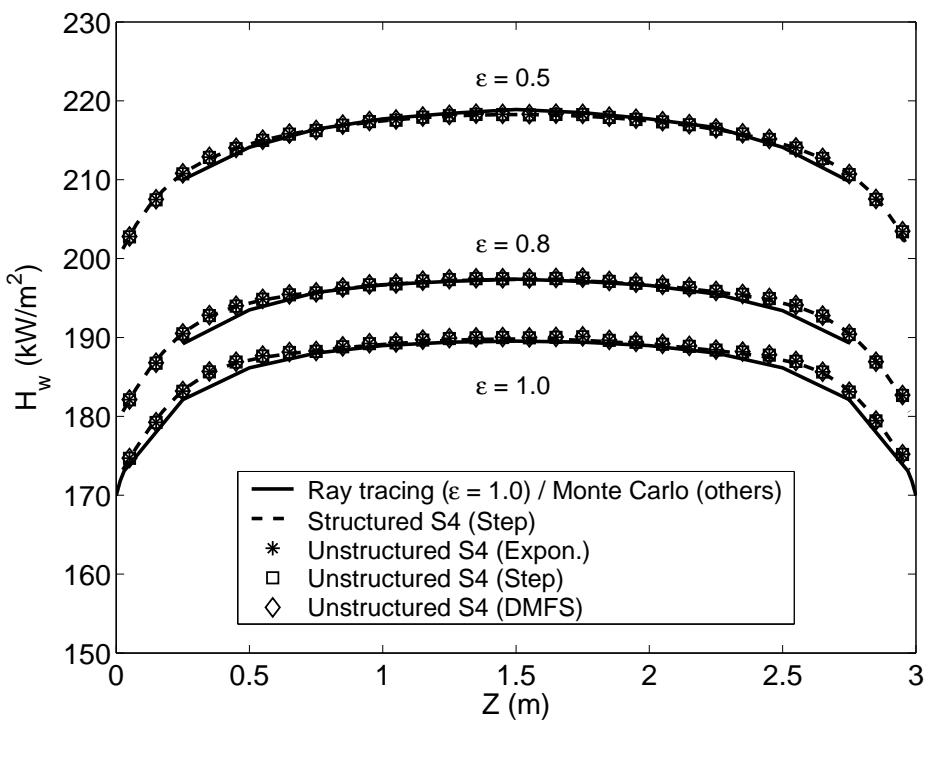
Black or gray walled rectangular enclosure The first test case is made on a box-shaped furnace enclosure ($1\text{m} \times 1\text{m} \times 3\text{m}$). The walls are black ($\epsilon = 1.0$) or gray ($\epsilon = 0.8$ or 0.5) at $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ and the medium is gray with $\kappa = 0.1\text{ m}^{-1}$ and at a temperature of $1500\text{ }^{\circ}\text{C}$. A fine grid (20425 tetrahedra, see Fig.4.15) has been used. For the case where $\epsilon = 1.0$, the results are compared with those calculated using a Cartesian grid with $20 \times 20 \times 60$ control volumes and a reference solution calculated using the Ray Tracing method with 80000 rays (in this way, the results can be considered as numerically quasi-exact). For $\epsilon = 0.8$ and 0.5 , the available reference solution is computed

by a Monte Carlo method.

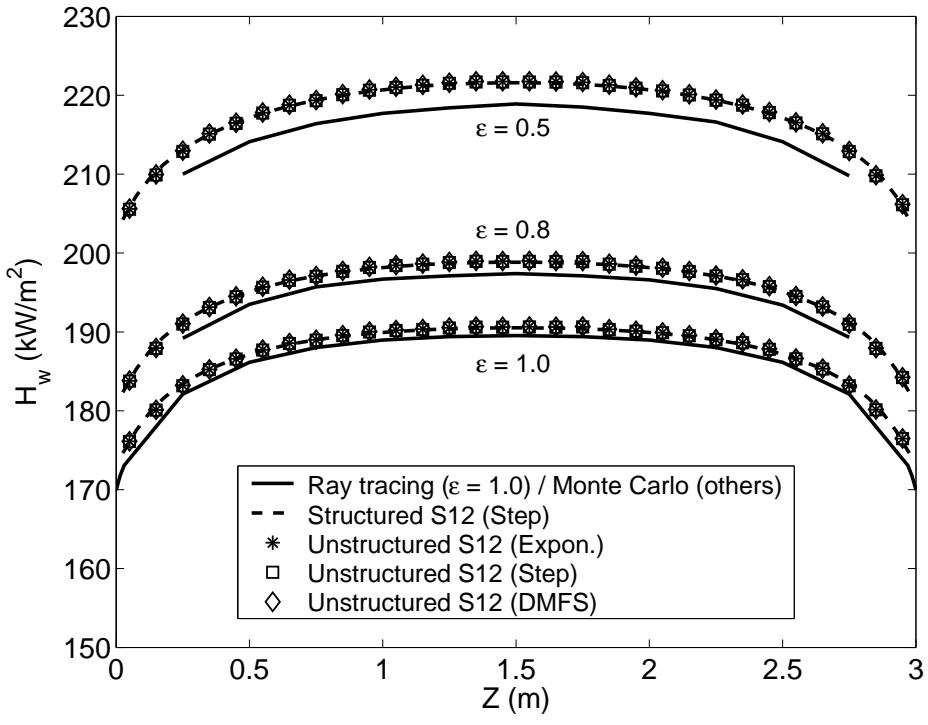
The incident heat flux, H_w , along the centerline of the largest walls is shown in Fig.4.16(a) and Fig.4.16(b). The tests have been performed for two different S_N quadratures - S_4 and S_{12} - and the three different spatial differencing schemes - exponential scheme, Diamond Mean Flux Scheme ($\alpha = 0.5$) and Step scheme. Independently of the order of the considered angular quadrature, if the number of cells used are of the same order, results obtained using structured grids and unstructured grids are very close (see Fig. 4.16(a) and 4.16(b)). We also have noticed that there is no significant difference between the solutions obtained by using the three different numerical schemes. The results obtained using unstructured meshes are in good agreement with the reference solution regardless of the angular quadrature and the differencing schemes used.

Black walled cylindrical enclosure A cylinder ($h = 3\text{m}$ and $r = 0.5\text{m}$) containing a gray isothermal medium at $T = 1200\text{K}$ is considered. The walls are black and at $T_w = 300\text{K}$. The radiative heat source S_r along the central axis of the cylinder and the radiative net heat flux Q_w at the side wall are obtained with the unstructured code using the three different spatial discretization schemes described previously and the S_8 quadrature is employed. Two grids are used in this test case : a coarse one (18920 tetrahedra) and a finer one (140010 tetrahedra) (see Fig.4.17(a) and Fig.4.17(b)). A third comparison is made on the same fine grid using a more accurate angular discretization (S_{12}). Results are compared to those obtained with the ray tracing method using 320000 rays. In the case of a homogeneous medium, the results of the ray tracing method are independent of the grid.

Three different values have been chosen to represent weak ($\kappa = 0.1\text{m}^{-1}$), intermediate ($\kappa = 1.0\text{m}^{-1}$) and strong ($\kappa = 10.0\text{m}^{-1}$) optical thicknesses. In the case of optically thin media (see Fig.4.18), the peak of the net heat flux at the wall predicted by the DOM is about 10% lower than the ray tracing solution. This is due to the fact that the distribution of optical thicknesses in the medium is function of the angular direction and consequently needs a good angular representation (what can be linked to the well known « ray effect »). Increasing the order of the angular quadrature (Fig.4.18(c)) improves the accuracy of the results. However, such an order of accuracy is compatible with today's expectations in combustion problems. For medium and strong optical thicknesses (see Fig.4.19 and 4.20), the ray effect is softened. The aforesaid distribution of optical thicknesses is less sensitive to angular variation. For optically thick media, the increase of the absorption coefficient of the medium yields also an increase of the wall heat flux. The walls receive the radiation mainly from the closest cells of the medium, so there is no need to refine the grid and the angular discretization. In the case of optically thin media (see Fig.4.18), the radiative heat source term solutions are in good agreement. Refining the grid gives better results. Increasing

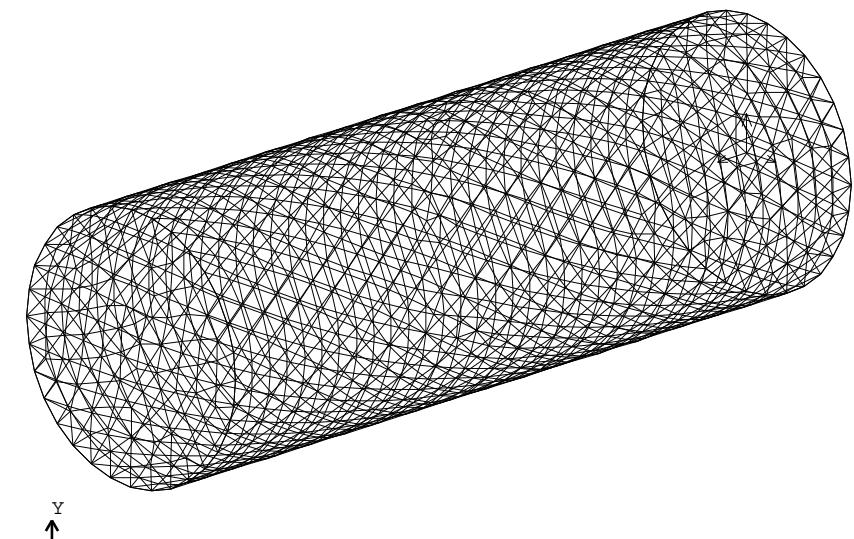


(a)

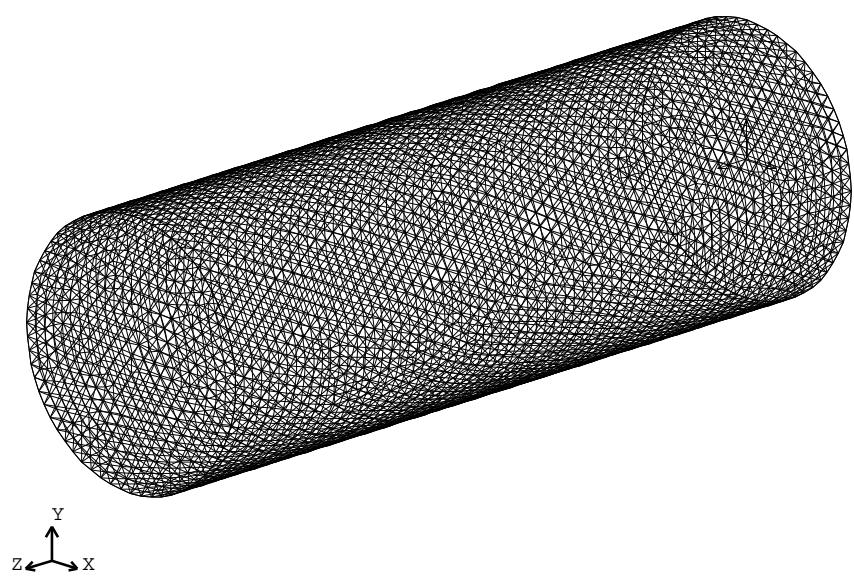


(b)

FIG. 4.16 – Black walled rectangular enclosure case : a) Radiative heat flux along the wall using the S_4 quadrature, b) Radiative heat flux along the wall using the S_{12} quadrature.



(a)



(b)

FIG. 4.17 – Cylindrical enclosure grids : a) Coarse grid (number of control volumes = 18920 tetrahedra), b) Fine grid (number of control volumes = 140010 tetrahedra).

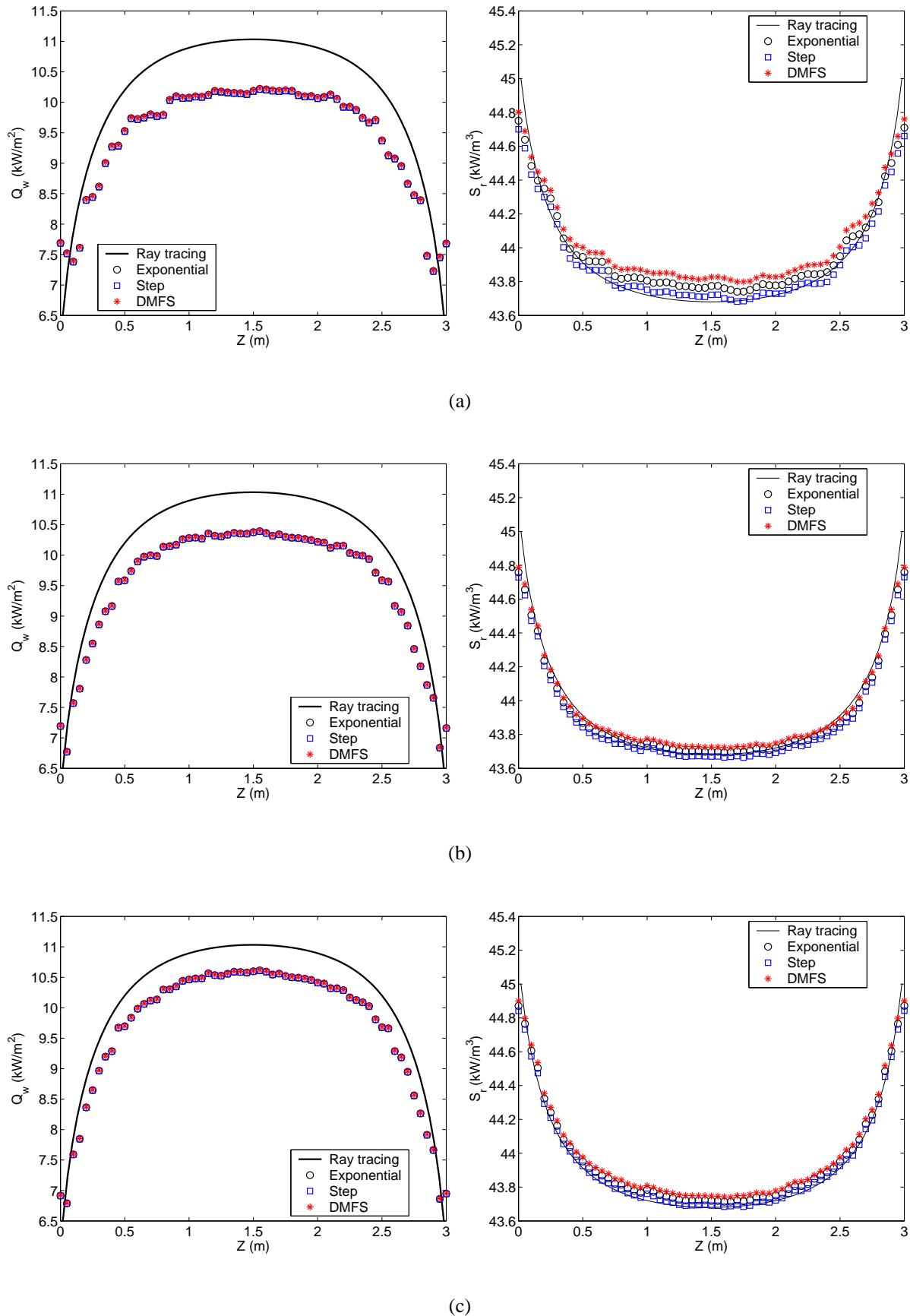


FIG. 4.18 – Q_w on the side wall and S_r on the central axis for $\kappa = 0.1 \text{ m}^{-1}$ of a cylindrical enclosure with participating gray medium : a) - Unstructured coarse grid (18920 cells) and angular quadrature S_8 , b) - Unstructured fine grid (140010 cells) and angular quadrature S_8 , c) - Unstructured fine grid (140010 cells) and angular quadrature S_{12} .

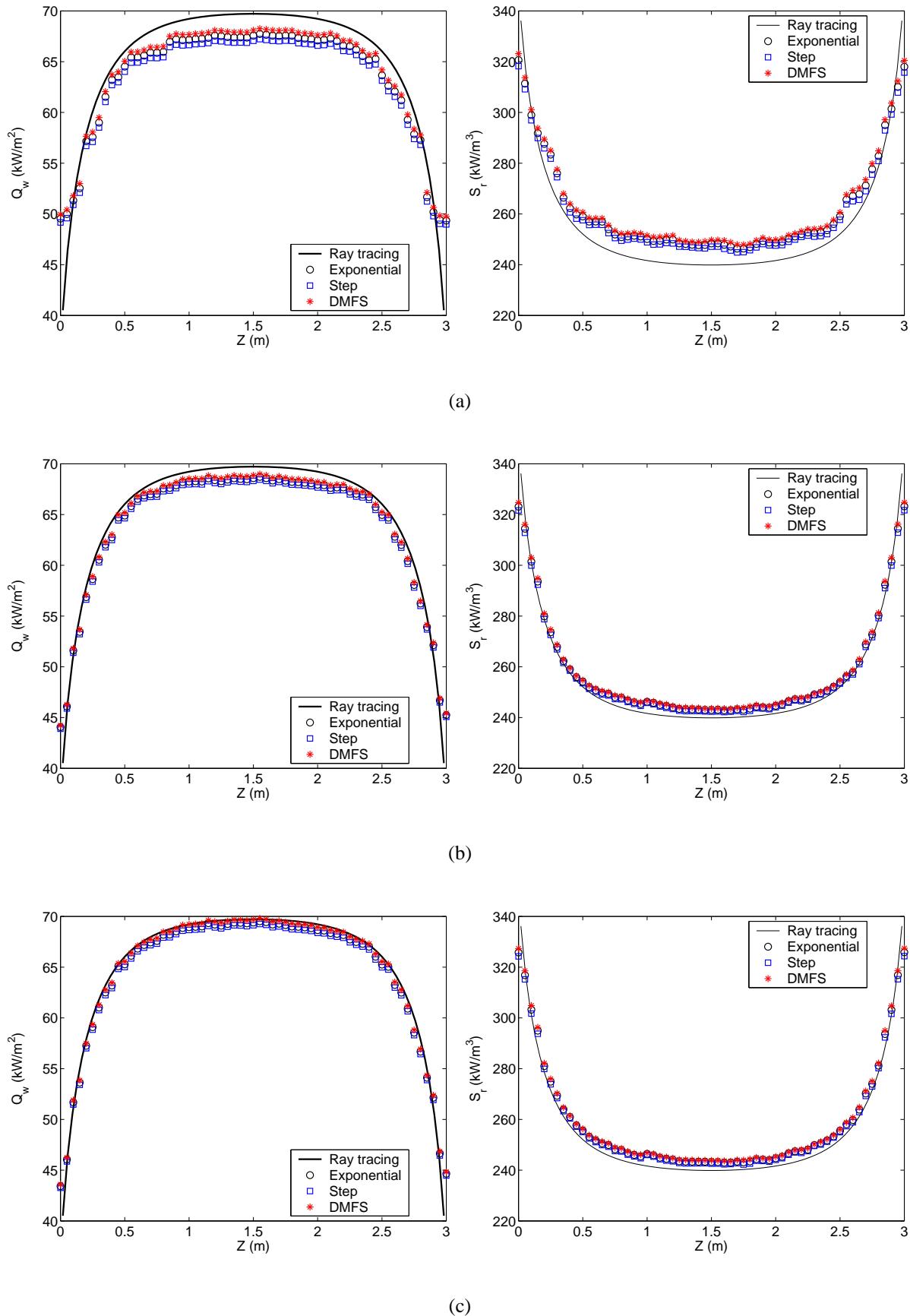


FIG. 4.19 – Q_w on the side wall and S_r on the central axis for $\kappa = 1.0 \text{ m}^{-1}$ of a cylindrical enclosure with participating gray medium : a) - Unstructured coarse grid (18920 cells) and angular quadrature S_8 , b) - Unstructured fine grid (140010 cells) and angular quadrature S_8 , c) - Unstructured fine grid (140010 cells) and angular quadrature S_{12} .

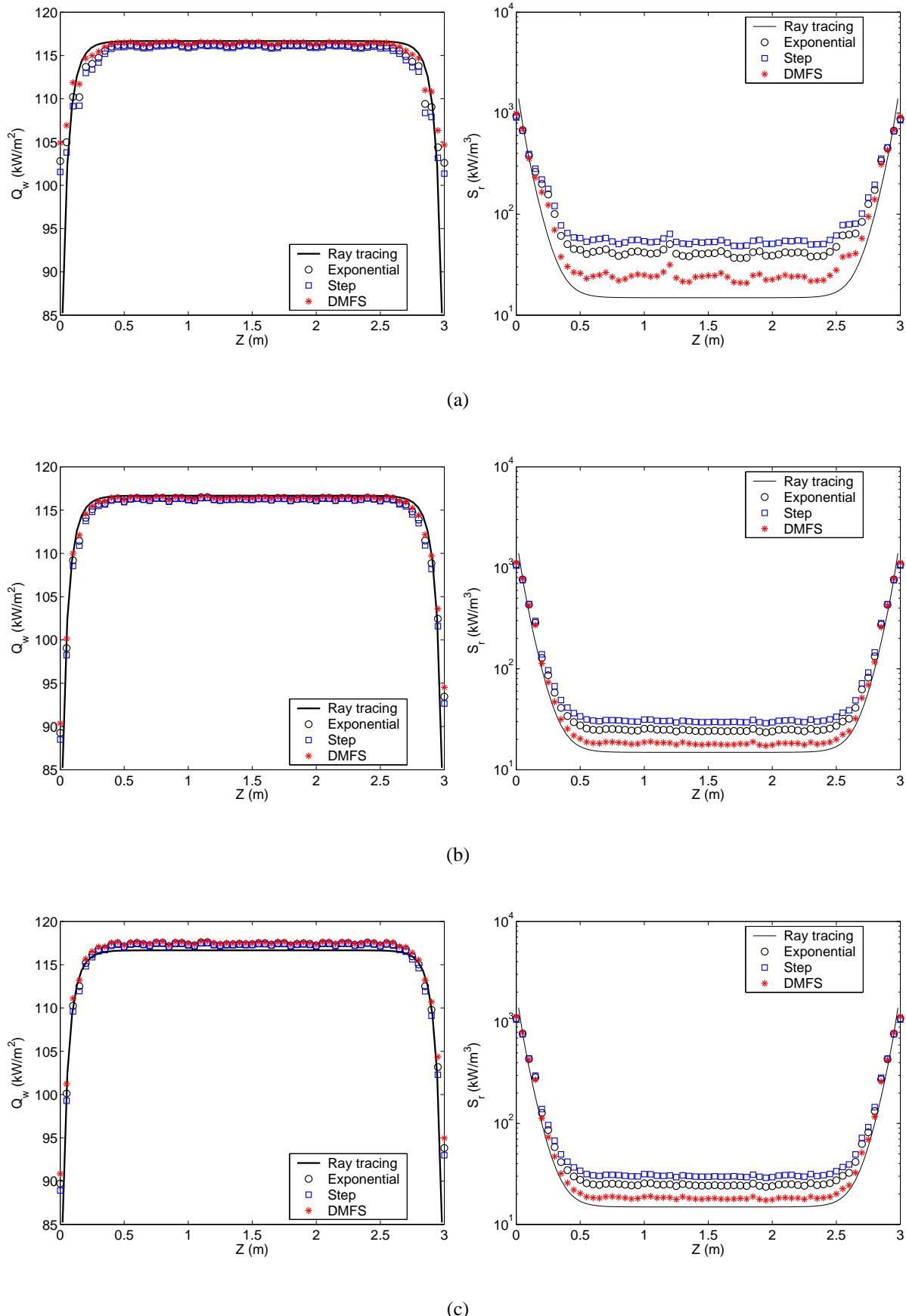


FIG. 4.20 – Q_w on the side wall and S_r on the central axis for $\kappa = 10.0 \text{ m}^{-1}$ of a cylindrical enclosure with participating gray medium, a) - Unstructured coarse grid (18920 cells) and angular quadrature S_8 , b) - Unstructured fine grid (140010 cells) and angular quadrature S_8 , c) - Unstructured fine grid (140010 cells) and angular quadrature S_{12}

the absorption coefficient of the medium leads to decrease the accuracy obtained for the radiative source term solutions (see Fig.4.19(a) and 4.20(a)). The relative difference between the DOM and the ray tracing solutions is negligible in the vicinity of the walls and becomes significant far from the walls. Most of the energy emitted by the medium is absorbed within a short distance. That leads to a strong exponential extinction that none of the three spatial differencing schemes succeeded in representing if the grids are not sufficiently fine (Fig.4.19(a) and 4.19(b)). So, in the next section, a particular attention will be paid to the accuracy on the radiative source term estimation in a simpler configuration. The Step scheme gives better results in optically thin case and the DMFS is the most accurate for very absorbing medium. The angular refinement do not really govern the accuracy of the source term along the centerline. We have noticed that the grid refinement influence is stronger than the angular one when we compare the three spatial differencing schemes. The angular refinement do not really govern the accuracy of the heat source term along the centerline.

Maximal, mean and minimal relative errors for the source term given in the tables 4.2 and 4.3, are computed for the three different spatial differencing schemes as follows :

$$E = \left| \frac{S_{r,DOM} - S_{r,RT}}{S_{r,RT}} \right| \times 100 \quad (4.68)$$

and for the wall heat flux :

$$E = \left| \frac{H_{w,DOM} - H_{w,RT}}{H_{w,RT}} \right| \times 100 \quad (4.69)$$

with *RT* standing for the Ray Tracing. E_{Mean} is simply the averaged values of relative errors calculated in several points. For the incident wall heat flux, the solutions computed with the three numerical schemes are in a good agreement. Nevertheless, we can notice that the « Diamond Mean Flux Scheme » gives significantly better results than the exponential scheme for $\kappa = 10.0 \text{ m}^{-1}$. The DMFS remains accurate enough for a large range of optical thicknesses.

Black walled Spherical enclosure To analyze in more details the trends identified here above, this new section presents a simple test case which provides an analytical solution (of the source term only) in order to further understand, via a parametric study, the influence of the optical thickness on the source term calculations.

In this test case, a sphere with a radius $R = 1 \text{ m}$ has been considered and three different grids have been used (Fig.4.21(a), 4.21(b) and 4.21(c)). In a first case, the medium is isothermal at $T_{max} = 1200 \text{ K}$ and the wall is black at $T_{min} = 300 \text{ K}$. In a second test case, wall conditions are identical but the temperature of the medium is depending on the space variable r as follows :

$$T(r) = (T_{max}^4(1 - r^2) + T_{min}^4r^2)^{\frac{1}{4}} \quad (4.70)$$

TAB. 4.2 – Relative Errors on the Radiative source term S_r

Absorption coeff. client		$\kappa = 0.1 \text{ m}^{-1}$				$\kappa = 1.0 \text{ m}^{-1}$				$\kappa = 10.0 \text{ m}^{-1}$			
Relative Errors		E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}	E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}	E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}	E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}
Coarse Mesh and S_8	Step scheme	0.56%	9.6E-2%	2.4E-3%	3.78%	2.60%	0.51%	328%	219%	328%	219%	219%	7.67%
	Expon. scheme	0.45%	0.16%	2.3E-3%	4.37%	3.07%	6.0E-2%	240%	151%	240%	151%	151%	3.88%
	Diam. scheme	0.35%	0.26%	4.5E-2%	5.12%	3.55%	2.9E-2%	112%	56.4%	112%	56.4%	56.4%	2.83%
Fine Mesh and S_8	Step scheme	0.42%	0.11%	9.5E-3%	2.14%	0.95%	1.6E-2%	111%	88.4%	111%	88.4%	88.4%	6.64%
	Expon. scheme	0.35%	7.7E-2%	4.2E-4%	1.89%	1.18%	7.6E-2%	72.2%	57.3%	72.2%	57.3%	57.3%	5.2%
	Diam. scheme	0.27%	8.1E-2%	1.8E-3%	2.21%	1.44%	0.46%	43.6%	21.2%	43.6%	21.2%	21.2%	3.10%
Fine Mesh and S_{12}	Step scheme	0.17%	3.7E-2%	6.0E-4%	1.83%	1.15%	0.14%	111%	88.3%	111%	88.3%	88.3%	5.52%
	Expon. scheme	0.17%	9.2E-2%	3.3E-2%	2.26%	1.41%	0.65%	71.9%	57.2%	71.9%	57.2%	57.2%	4.07%
	Diam. scheme	0.24%	0.15%	3.0E-2%	2.71%	1.67%	0.33%	43.6%	21.2%	43.6%	21.2%	21.2%	1.99%

TAB. 4.3 – Relative Errors on the radiative heat flux at the wall Q_w

Absorption coefficient		$\kappa = 0.1 \text{ m}^{-1}$			$\kappa = 1.0 \text{ m}^{-1}$			$\kappa = 10.0 \text{ m}^{-1}$		
Relative Errors		E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}	E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}	E_{Max}	E_{Mean}	E_{Min}
Coarse Mesh and S_8	Step scheme	11.0%	7.39%	4.46%	8.91%	3.79%	0.40%	4.55%	0.78%	0.41%
	Expon. scheme	10.9%	7.29%	4.58%	9.78%	3.13%	0.44%	5.20%	0.98%	0.26%
Fine Mesh and S_8	Diam. scheme	10.8%	7.18%	4.72%	10.7%	2.45%	0.12%	7.15%	0.61%	7.7E-2%
	Step scheme	7.78%	5.92%	2.64%	3.72%	1.94%	0.55%	2.33%	0.61%	0.23%
Fine Mesh and S_8	Expon. scheme	7.73%	5.86%	2.58%	3.31%	1.60%	0.68%	2.66%	0.44%	0.15%
	Diam. scheme	7.67%	5.80%	2.51%	2.99%	1.25%	0.26%	3.80%	0.28%	5.8E-2%
Fine Mesh and S_{12}	Step scheme	6.69%	4.57%	2.54%	2.90%	1.17%	0.62%	2.50%	0.50%	5.4E-2%
	Expon. scheme	6.63%	4.51%	2.48%	2.49%	0.83%	0.23%	3.40%	0.56%	3.7E-3%
S_{12}	Diam. scheme	6.57%	4.45%	2.42%	2.88%	0.50%	6.3E-4%	4.58%	0.73%	0.27%

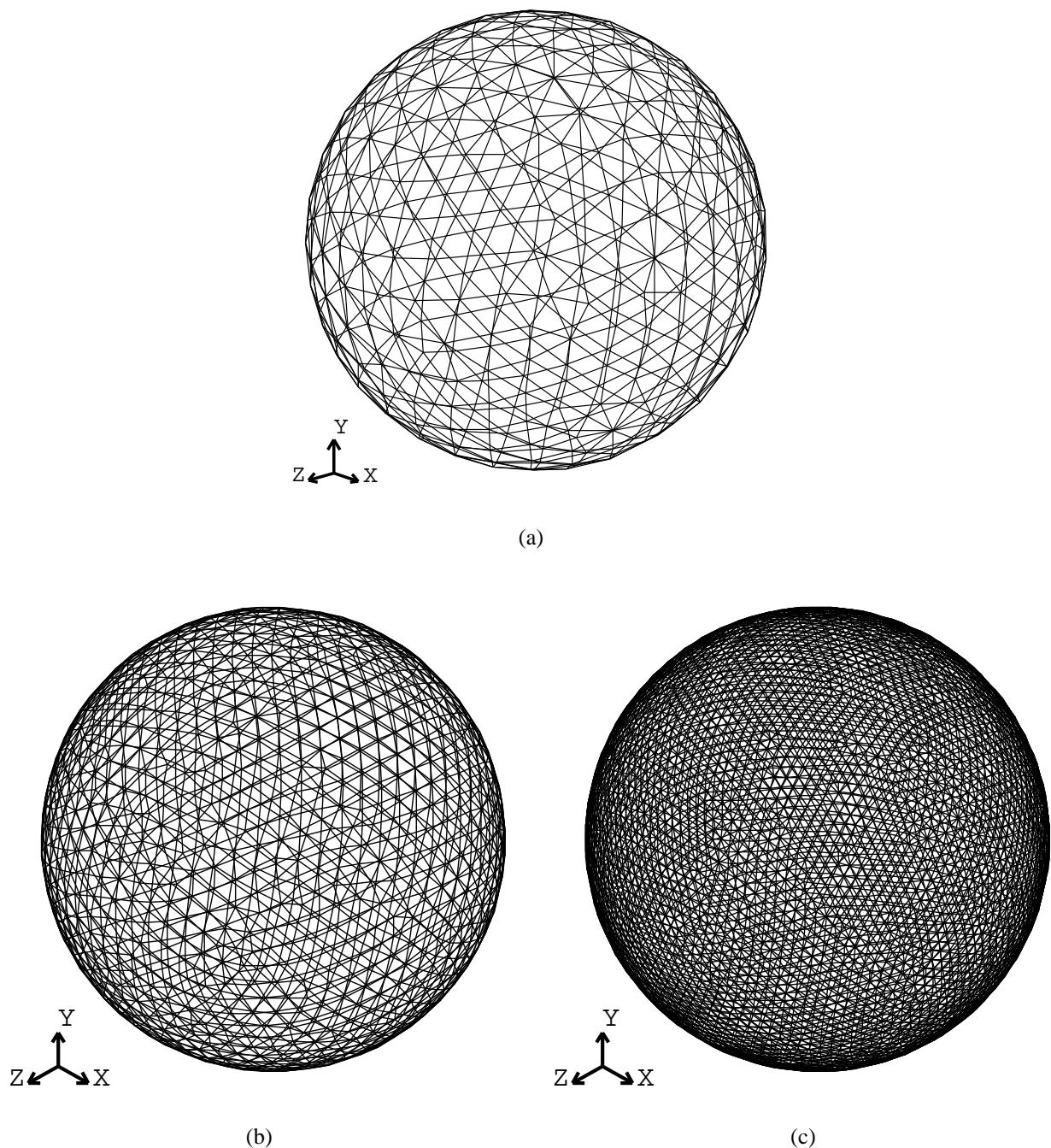


FIG. 4.21 – Spherical enclosure grids : a) - Coarse grid (number of control volumes = 4000 tetrahedra), b) - Medium grid (number of control volumes = 30000 tetrahedra), c) - Fine grid (number of control volumes = 210000 tetrahedra).

The source term $S_{r,C}$ is evaluated at the center of the sphere using a S_{12} quadrature with the three different spatial differencing schemes studied in the previous section. Results are compared to the analytical solution obtained considering the spherical symmetry :

$$S_{r,C,analytical} = 4\pi\kappa \left[L_b - (L_w e^{-\kappa R} + \kappa \int_0^R L_b e^{-\kappa r} dr) \right] \quad (4.71)$$

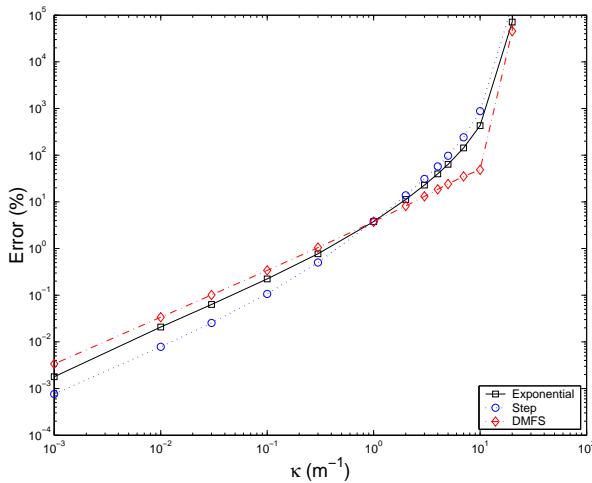
The relative error of the radiative source term is represented versus κ in Fig.4.22 and is computed as follows :

$$E = \left| \frac{S_{r,C,DOM} - S_{r,C,analytical}}{S_{r,C,analytical}} \right| \times 100 \quad (4.72)$$

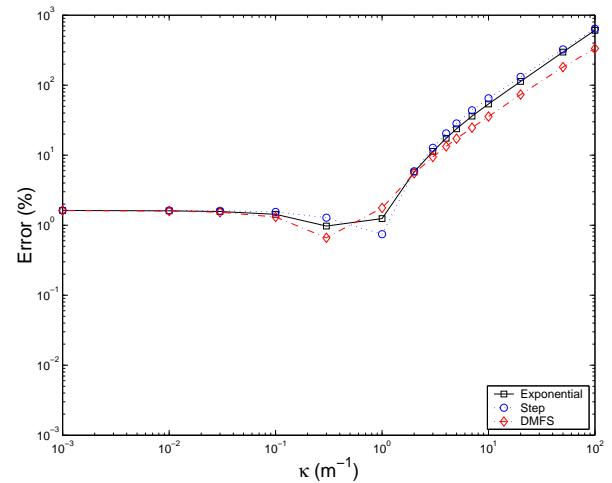
From Fig.4.22, we can notice that the relative error increases when the absorption coefficient increases. The change of direction of the curve, in Fig.4.22(b),4.22(d) and 4.22(f), is only due to the use of the absolute value in the relative error formulation (see Eq. 4.72). In the isothermal test case, extremely poor levels of accuracy are observed when increasing optical thickness (Fig.4.22(a),4.22(c) and 4.22(e)). That phenomenon could be interpreted as the « false scattering » effect (numerical diffusion linked to cell optical thickness) with the use of the finite volume approximation (cf. Appendix B). This observation can be related to the fact that, in numerical experiments, the geometrical mesh structure is kept constant when increasing the absorption coefficient, leading to a regular increase of the optical thickness of each mesh. For the non-isothermal case, the same phenomenon occurs but radiative exchanges at small distances (exchanges between closest gas volumes) contribute more than the exchanges with the walls. This reduces the optical thicknesses effectively linked to the most contributing exchanges. Consequently, false scattering has less influence and the relative error on the radiative source term is smaller than the one obtained in the isothermal test case. These errors remain however very high when optical thickness reaches values of the order of ten or above, which is commonly encountered at the center of gaseous absorption lines such as those of H_2O and CO_2 in combustion.

4.8.2.2 Cases with gaseous line spectra : Sphere containing water vapor

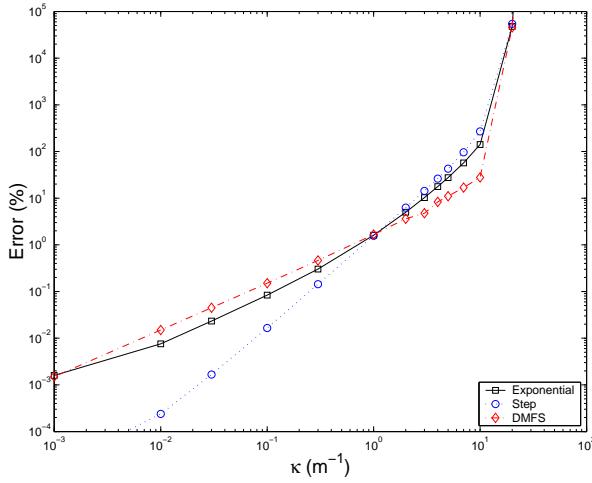
The aim of this last test is to propose a case which is close to combustion applications in order to show how the problems encountered at high optical thicknesses (at the centers of gaseous spectral lines) may affect the accuracy of the radiative source term in a real gas. The spectral dependency in the absorption coefficient is here represented with the use of a SNB-*ck* model [92, 94, 96]. The SNB data have been provided by the EM2C laboratory [146]. The same sphere as above is considered and filled with an isothermal gas constituted by 20% of water vapor and 80% of nitrogen. The second grid (cf. Fig. 4.21(b)) is used. The source term S_r is obtained by computing $N_{bands} \times N_{quad}$ gray calculations where $N_{bands} = 367$ is the number of narrow bands



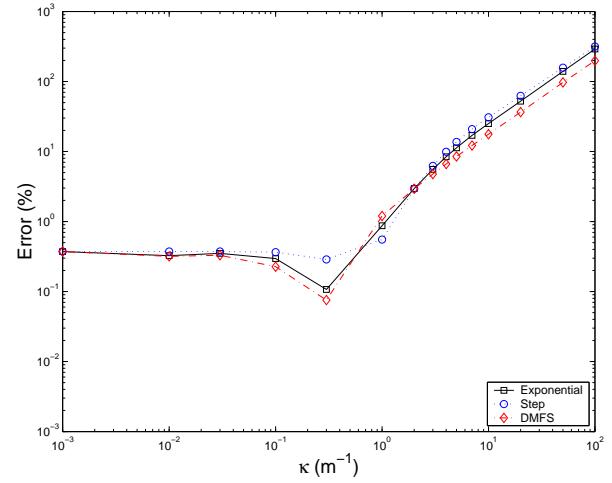
(a) For the isothermal gray medium case using the coarse grid (cf.4.21(a))



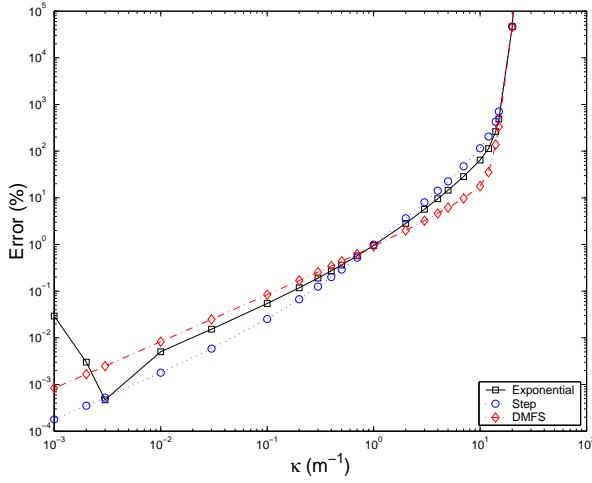
(b) For the non-isothermal gray medium case using the coarse grid



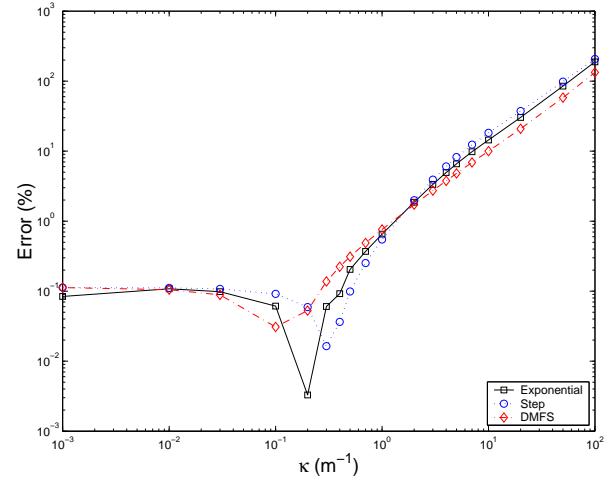
(c) For the isothermal gray medium case using the medium grid (cf.4.21(b))



(d) For the non-isothermal gray medium case using the medium grid



(e) For the isothermal gray medium case using the fine grid (cf.4.21(c))



(f) For the non-isothermal gray medium case using the fine grid

FIG. 4.22 – Relative Error for $S_{r,C}$ at the center of the sphere

TAB. 4.4 – Relative Errors on the Radiative source term $S_{r,C}$ at the center of the sphere

Test case configuration	Angular quadrature	Relative Error
Medium : isothermal and non-gray $X_{H_2O} = 0.2$ Grid : Medium sphere (Fig.4.21(c)) Spatial differencing scheme : DMFS	$S_4 (N_{dir} = 24)$	1.11 %
	$S_8 (N_{dir} = 80)$	1.27%
	$S_{12} (N_{dir} = 168)$	1.22%
	$LC11 (N_{dir} = 96)$	1.21%

which have the same spectral width, and for each narrow band $N_{quad} = 5$ is the number of the Gauss-Legendre quadrature points used in the approximation of the spectral integration. Then, the analytical solution integrated on the whole spectrum is written as :

$$S_{r,C,analytic} = \sum_{i=1}^{N_{band}} \sum_{j=1}^{N_{quad}} 4\pi \Delta\nu_i w_{ij} \kappa_{ij} e^{-\kappa_{ij} R} (L_{b,C,ij} - L_{b,w,ij}) \quad (4.73)$$

Consequently, using the DOM, the source term [28] is obtained as follows :

$$S_{r,DOM} = \sum_{i=1}^{N_{band}} \sum_{j=1}^{N_{quad}} \Delta\nu_i w_{ij} \kappa_{ij} (4\pi \bar{L}_{b,ij} - G_{ij}) \quad (4.74)$$

where G_{ij} is obtained from Eq. 4.8 for $\kappa = \kappa_{ij}$. The source term $S_{r,C,DOM}$ is then determined by interpolation. The same mathematical expression of the relative error of the source term Eq. 4.72 is computed with the DMFS and for four different angular quadratures. Table 4.4 shows that the choice of the quadrature doesn't influence the relative error on the estimation of $S_{r,C}$.

Consequently, in the next test, the quadrature is fixed (S_4) and the relative error of the source term is computed for the three numerical schemes. Fig. 4.23 represents the relative error versus the molar concentration of water vapor. As we noticed previously, the relevant parameter that influences the solution accuracy is the optical thickness which is directly related to the water vapor molar fraction X_{H_2O} . The sensitivity of the solution accuracy to the molar fraction of water vapor is illustrated in Fig. 14.23. A very small discrepancy between the three schemes is observed, with a relatively better accuracy of the DMFS. Altogether, the accuracy level is much better than what could be feared on the basis of preceding analysis. As the medium is isothermal, the radiative exchanges with the walls are the only relevant ones. They occur at a long distance, which means that the line wings of the spectrum contribute more than the centers of the lines where complete extinction rapidly occurs. This means that the frequencies at which most of the radiative exchanges take place correspond to small and moderate optical thicknesses. Strong relative errors are undoubtedly

¹For small molar fractions ($X = 0.01$), the exponential scheme could not provide an acceptable physical solution because of the sign of the intensity which is negative.

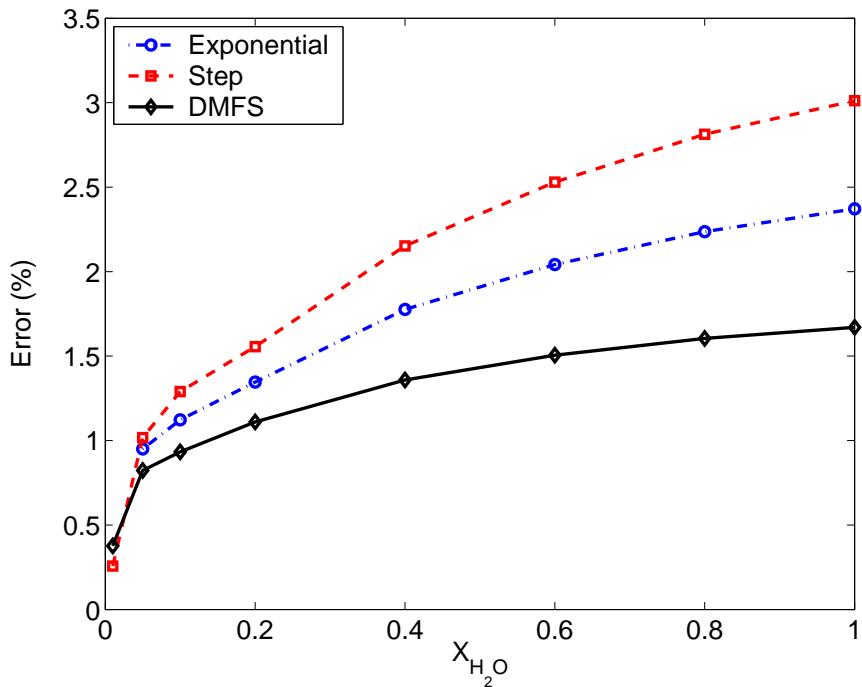


FIG. 4.23 – Relative Error for $S_{r,C}$ at the center of the sphere using the medium grid : case of an isothermal gaseous medium (H_2O/N_2)

made at line center frequencies, but they do not appear in the spectral integrated results because the line center contributions are very weak.

Finally, the last figure Fig.4.24 deals with a very thick medium where soot particles are added to water vapor and nitrogen, taking into account a very high soot volumetric fraction $f_v = 10^{-5}$. The total absorption coefficient is expressed by $\kappa_{ij} = \kappa_{ij,gas} + \kappa_{i,soot}$ with [80] :

$$\kappa_{i,soot} = 5.5 f_v \nu_i \quad (4.75)$$

where f_v stands for the soot volumetric fraction and ν_i is the wave number taken at the center of a narrow number. As soot radiation becomes dominant, the medium tends to become thick and gray. Then, the results obtained in Fig. 4.24 show big discrepancies between the three schemes which confirm the trends of the relative error for S_r observed in the first cylinder test case and a good behavior of the DMFS. In this case, because of soot, the absorption coefficient is increased to similar levels at line centers and at line wings. All the frequencies contribute similarly to the estimation of the exchange with the wall, consequently we can use similar explanations than those made in the gray case.

Altogether, these results only confirm that the code is available with satisfactory accuracy levels for well mixed combustion chambers, where the gas volume can be considered as quasi-isothermal, with moderate soot concentration levels. It has been shown in the previous section

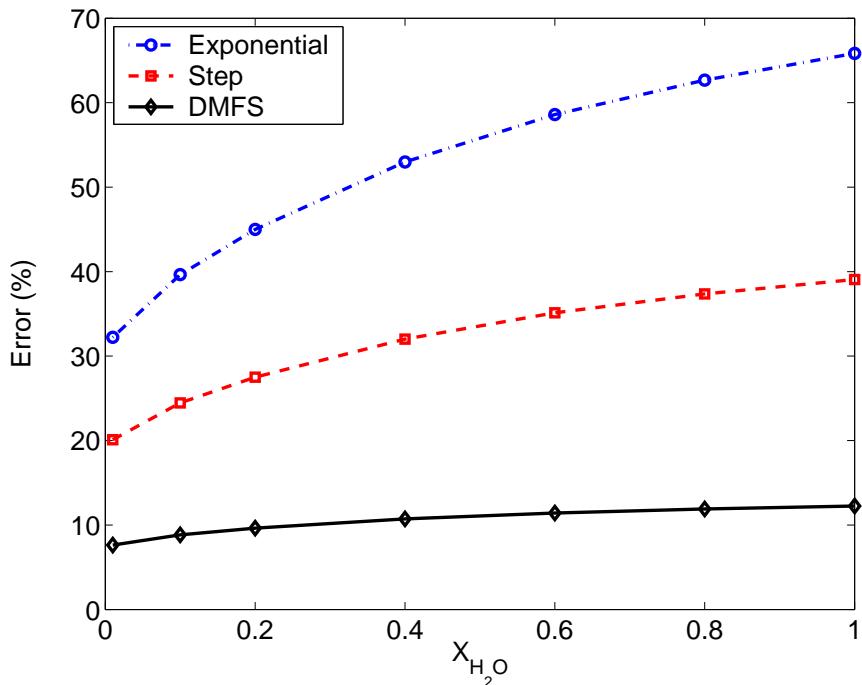


FIG. 4.24 – Relative Error for $S_{r,C}$ at the center of the sphere using the medium grid : case of an isothermal mixture of gas and soot (H_2O/N_2 and $f_v = 10^{-5}$)

that, in non-isothermal media, the main exchanges contributing to the radiative source term evaluation are the exchanges with the gas at short or intermediate distance. Therefore, a final interesting test case considering the spherical enclosure containing non-isothermal and non-gray medium is necessary but is not presented here because no analytical solution is available. A Monte-Carlo calculation is presently being performed, that will serve as a reference solution for an extension present analysis.

4.8.3 Conclusion

Nous avons développé un code permettant d'utiliser la méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés, puis nous l'avons validé en effectuant divers cas tests. Cette étude a montré que l'épaisseur optique du milieux était le principal facteur influençant la précision des trois schémas de dérivation et ceci étant dû à l'approximation en volumes-finis (cf. Annexe B) faite par les DOM.

Le schéma exponentiel, le schéma DMFS et le schéma Step donnent des solutions très proches l'une de l'autre et en accord avec les solutions de référence, quand l'épaisseur optique est moyenne ou faible. Par ailleurs, la précision obtenue devient médiocre quand on augmente l'épaisseur optique du milieu jusqu'à des ordres de grandeurs qui sont ceux des amplitudes des centres de raies

des gaz de la combustion. Dans ces conditions extrêmes le modèle DMFS fournit la meilleure précision.

Dans le cas de spectres de gaz réels, nous avons rencontré beaucoup moins de difficultés pour obtenir une précision acceptable que l'avait laissé présager l'étude menée en milieu gris. Cela est dû au fait que, dans le cas test effectué, des effets de saturation apparaissent aux fortes amplitudes de κ correspondant aux centres de raies. Dans le cas de l'étude menée sur la géométrie académique qu'est la sphère en prenant en compte un modèle de rayonnement des gaz, la plupart des échanges avec les parois ont lieu à des fréquences correspondant aux faibles valeurs de κ , où les trois schémas sont tous performants. Cette conclusion n'a été validée que pour des configurations de milieux fortement homogènes, telles que celles rencontrées dans des chambres de combustion en écoulement parfaitement mélangé. Nous avons aussi mis en évidence que le « ray effect » peut avoir une forte influence sur l'estimation des flux nets aux parois.

Chapitre 5

Application à des configurations réelles en combustion turbulente

L'impact du rayonnement sur la combustion a déjà été reconnu et suscite un vif intérêt au niveau industriel. Actuellement, de nombreux projets d'études sont orientés vers la prise en compte des transferts radiatifs dans les systèmes complexes. Nous avons pu développer un module de calcul des transferts radiatifs pour des codes de combustion turbulente en maillage non structuré. Une première étude, présentée dans ce chapitre nous a permis de tester les performances du module radiatif et d'estimer les différents paramètres pouvant influencer le degré de précision d'une solution. L'objectif est de trouver un équilibre acceptable entre temps de calcul et précision tout en acquérant une totale maîtrise de l'outil développé. Une seconde étude, nous a permis de mener une première investigation sur la faisabilité d'un couplage rayonnement/combustion turbulente dans le cas d'une géométrie réelle complexe. Nous présentons dans ce chapitre ces deux études et les premières conclusions faites à la lumière des résultats obtenus.

5.1 Étude des performances du code en configuration réelle

Cette étude est basée sur les résultats de simulations numériques menées dans le cadre du programme de recherche lié au projet européen *ICLEAC* (Instability Control for Low Emission Aero Combustors) mené conjointement par (partenaires : SNECMA, Turbomeca, CERFACS, EM2C, Rolls Royce, ..). Les résultats nous ont été fournis par le CERFACS.

Dans les systèmes de combustion tels que les propulseurs de l'aéronautique, les réactifs sont amenés séparément par des injecteurs situés en amont de la zone réactive. Les injecteurs doivent produire rapidement un mélange homogène et propice à la combustion. Une flamme turbulente

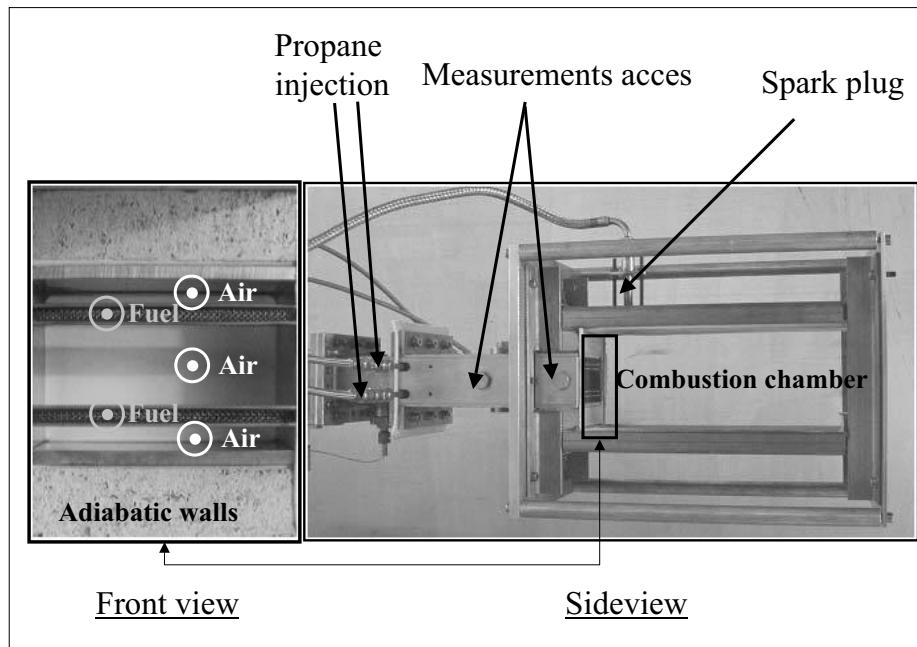


FIG. 5.1 – Maquette de la chambre de combustion non prémélangée ICLEAC (Laboratoire EM2C, B.Varoquié)

partiellement prémélangée se stabilise en aval. La LES offre la possibilité d'évaluer le comportement instationnaire de la flamme, déterminant pour la prédiction des instabilités en combustion. Les calculs radiatifs que nous proposons dans cette première étude sont effectués à partir d'une solution instantanée issue d'une simulation LES obtenue par le code AVBP¹ du CERFACS. Cette configuration nous permet de mener une étude des performances du code radiatif DOMASIUM dans le cas d'un milieu fortement inhomogène et non isotherme. Bien qu'elle ne soit pas complexe d'un point de vue géométrique, cette configuration présente des gradients de température et de concentrations d'espèces rayonnantes moins simples que ceux modélisés lors de la phase de développement du code (cf. §4.8.2.2) et plus représentatifs du type de problème ciblé.

5.1.1 Application à une chambre de combustion expérimentale

La configuration est celle d'une chambre de combustion dont la géométrie a été spécifiée pour une comparaison directe expérience/simulations. L'installation expérimentale localisée à l'Ecole Centrale de Paris (cf. Fig.5.1.1) a servi de base d'étude de la combustion partiellement prémélangée pour la thèse de B.Varoquié [161]. Le fuel est injecté par l'intermédiaire de deux fentes

¹<http://www.cerfacs.fr/cfd/>

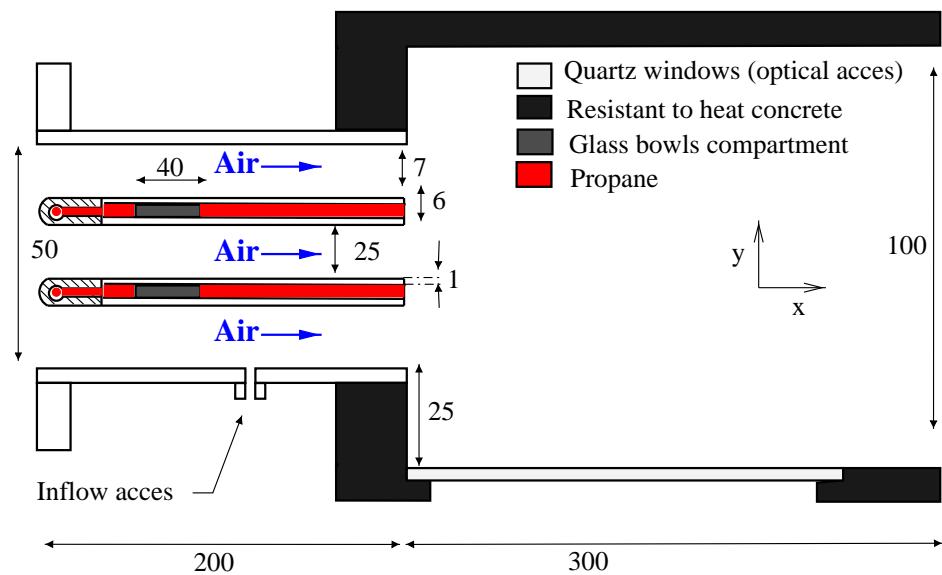


FIG. 5.2 – Représentation 2D de la chambre de combustion (Dimensions exprimées en millimètre)

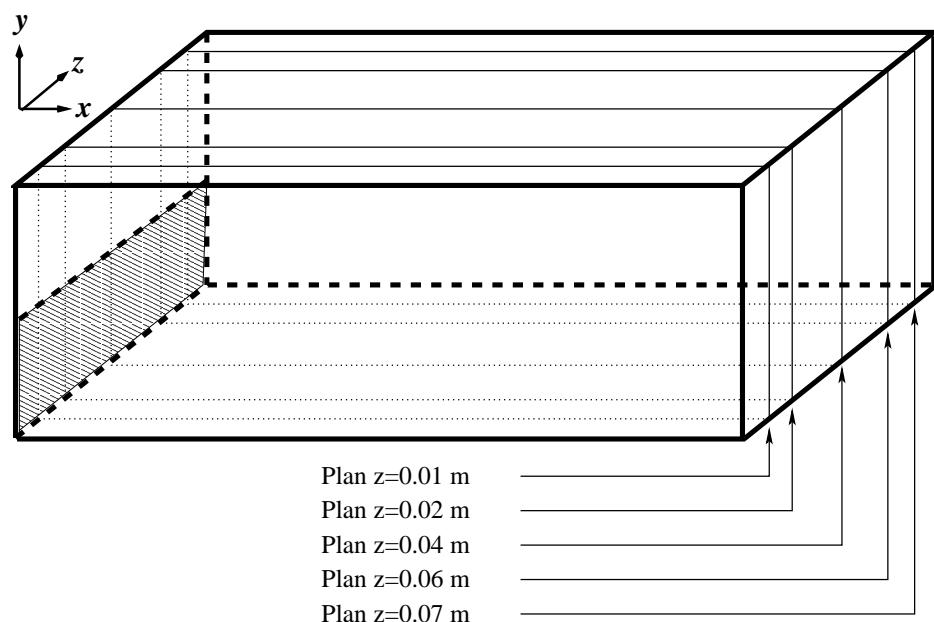


FIG. 5.3 – Zones de modélisation des transferts radiatifs : Plans de coupe selon z

(visibles de face sur la figure Fig.5.1.1) dans un écoulement principal d'air. Les instabilités de l'écoulement permettent de réaliser un pré-mélange partiel dans la chambre. Un élargissement brusque au niveau du plan d'injection permet de stabiliser la flamme. La chambre de combustion est parallélépipédique afin de faciliter les diagnostics expérimentaux et de simplifier les simulations numériques. Elle mesure $0.30\text{ m} \times 0.10\text{ m} \times 0.08\text{ m}$. Le dispositif est muni de hublots latéraux résistants aux hautes températures et de parois en béton réfractaire assurant une certaine adiabaticité du système. La solution numérique instantanée qui nous a été fournie par K.Truffin du CERFACS correspond à un écoulement de Propane/Air adiabatique et compressible à pression atmosphérique. La richesse globale de la flamme est proche de la stoechiométrie ($\dot{m}_{\text{Air}} = 65\text{ g.s}^{-1}$ et $\dot{m}_{\text{Propane}} = 4.5\text{ g.s}^{-1}$). Les gaz frais sont injectés à la température ambiante c'est à dire 298 K. Les résultats expérimentaux ayant montré une symétrie de la flamme par rapport à un plan horizontal situé entre les deux injecteurs de propane, les simulations numériques n'ont été effectuées que sur la partie supérieure de la configuration. Nous montrons à la figure Fig.5.4 les profils de température et de concentration d'espèces chimiques rayonnantes (H_2O , CO_2 et CO) obtenus sur le plan vertical situé en $z = 0.04\text{ m}$. D'un point de vue radiatif, nous ne modélisons que cette demi-chambre supérieure et sans injecteurs, ce qui réduit la géométrie à un simple pavé droit de $0.30\text{ m} \times 0.05\text{ m} \times 0.08\text{ m}$. La symétrie qui justifie une telle réduction du problème pour la CFD ne marche pas pour le rayonnement - à moins de considérer une réflexion spéculaire à l'interface or le code DOMASIUM ne considère que la réflexion diffuse à l'heure actuel - mais l'objectif de ce calcul est de pouvoir tester les potentialités du code. Pour des raisons de compatibilité avec DOMASIUM, la solution instantanée a également été interpolée sur deux maillages différents : l'un composé de 68000 tétraèdres, que nous appellerons « maillage F1 » et l'autre de 138000 tétraèdres, qui sera le « maillage F2 » .

5.1.2 Analyse du problème radiatif

Nous montrons à la figure Fig.5.5 le terme de production chimique (ou dégagement de chaleur obtenu par réaction chimique) obtenu sur le maillage F2 en cinq plans verticaux parallèles ($z = 0.01\text{ m}$, $z = 0.02\text{ m}$, $z = 0.04\text{ m}$, $z = 0.06\text{ m}$ et $z = 0.07\text{ m}$). L'aspect tridimensionnel de l'écoulement est visible par les fluctuations observées sur les cinq coupes effectuées. En effet, B.Varoquié a pu estimer lors des tests de prototypes de la maquette que les variations de vitesse longitudinale suivant la profondeur z de la chambre sont de l'ordre de 10%, entraînant un plissement de la flamme dans cette direction. Nous avons aussi effectué un calcul du terme d'émission radiative pour chaque cellule de ce maillage (cf. Fig.5.6), correspondant à un calcul par modèle OTL pour cette configuration. Seule la prise en compte d'un terme de luminance de paroi fait défaut pour avoir un modèle OTL complet, mais ce terme peut être considéré comme négligeable

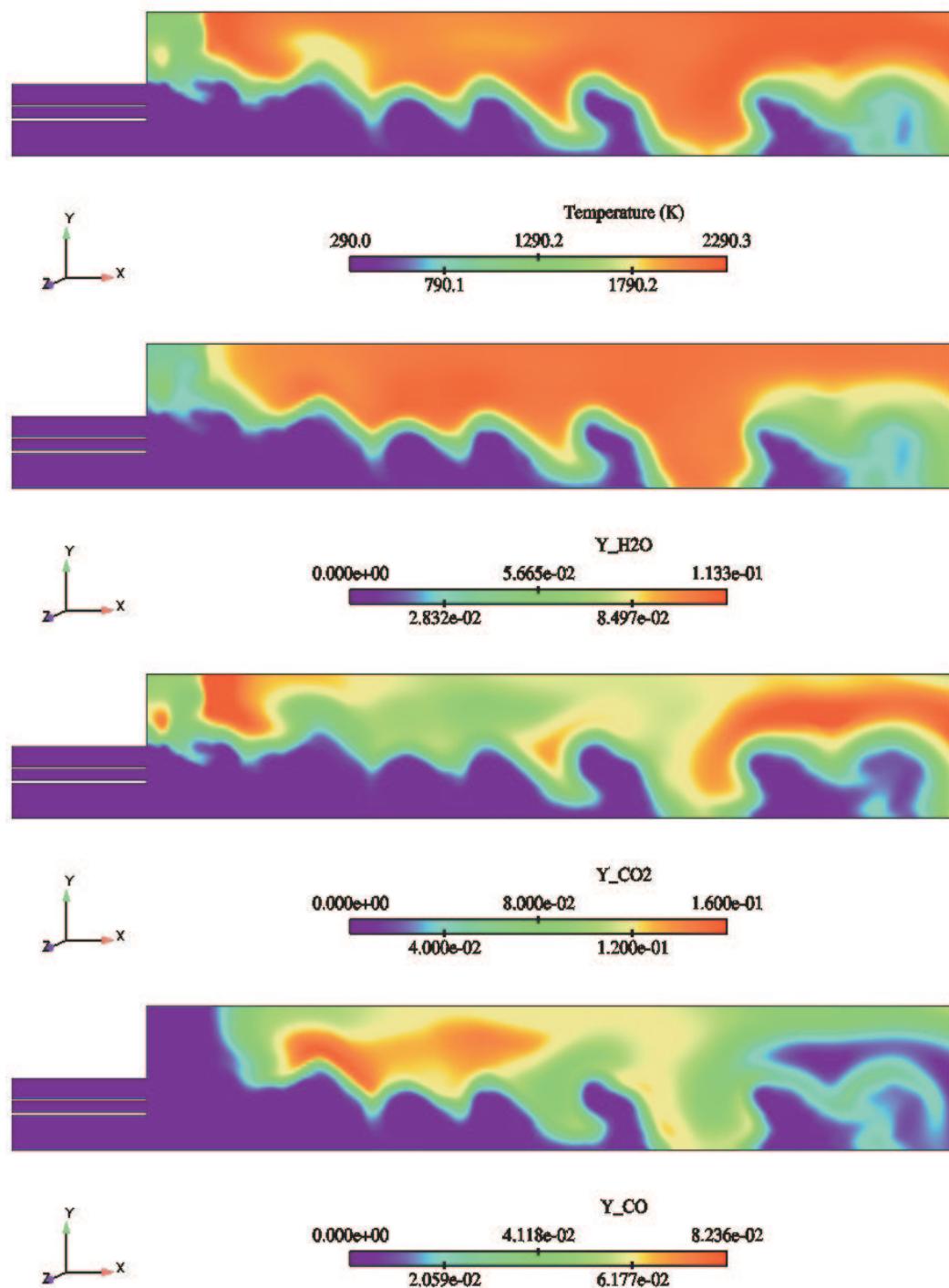


FIG. 5.4 – Profils de température et d'espèces rayonnantes dans la chambre de combustion sur le plan $z = 0.04$ m

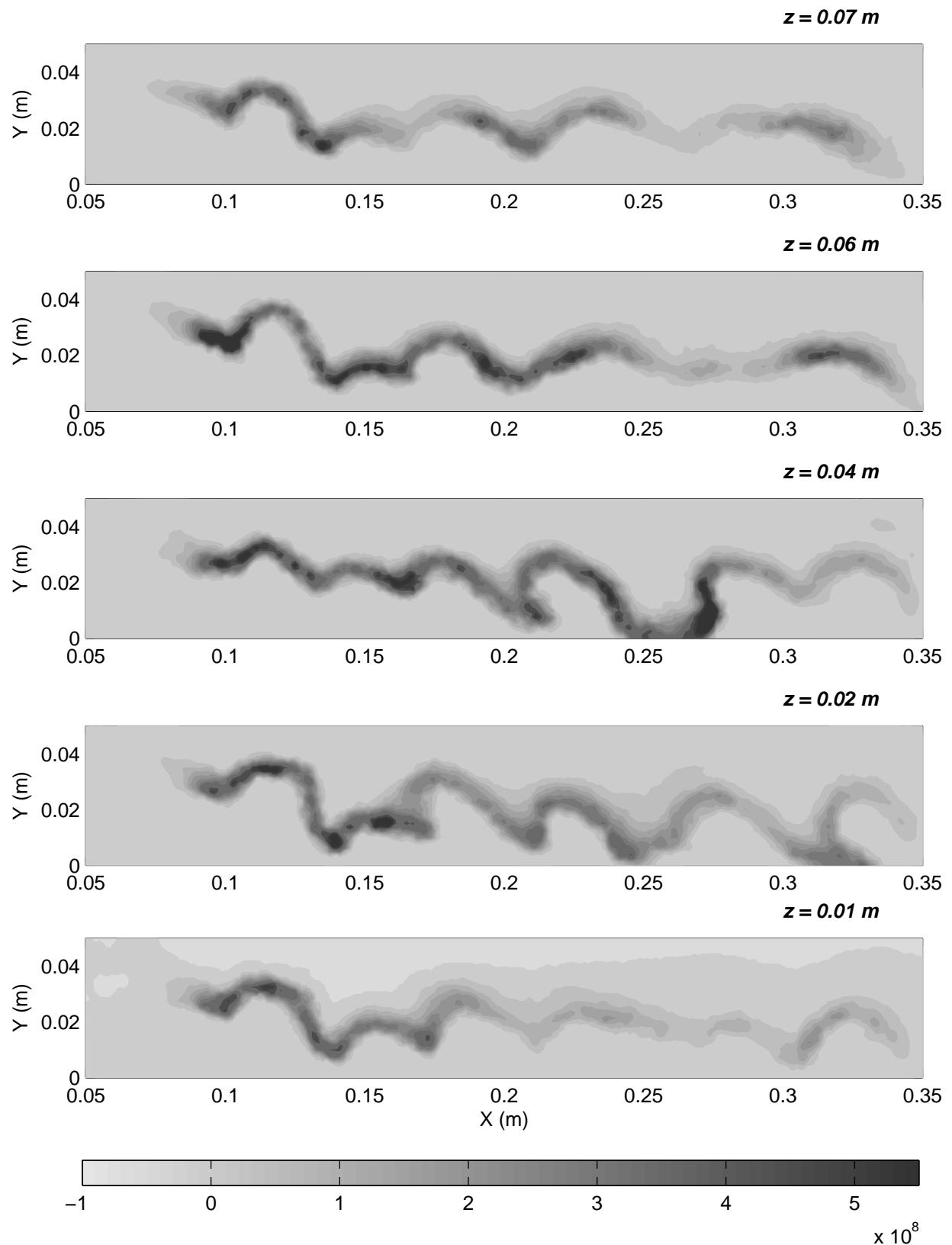


FIG. 5.5 – Solutions sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) obtenues en utilisant le maillage à $N_{\text{cellules}} = 138000$, une quadrature LC_{11} et $N_{\text{quad}} = 5$: Production chimique de la flamme P_{chim} (W.m^{-3})

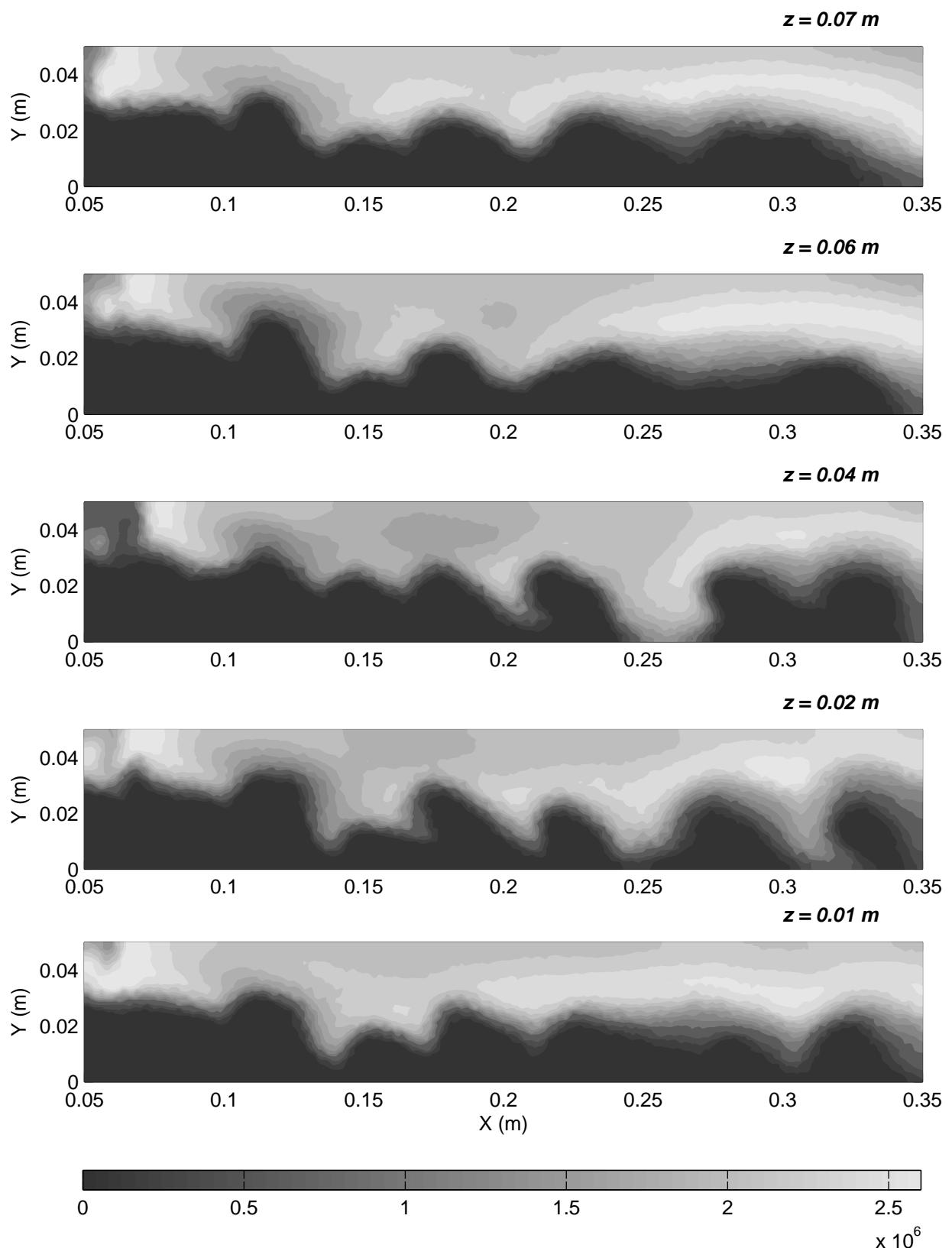


FIG. 5.6 – Solutions sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) obtenues en utilisant le maillage à $N_{cellules} = 138000$, une quadrature LC_{11} et $N_{quad} = 5$: Emission radiative E ($\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$)

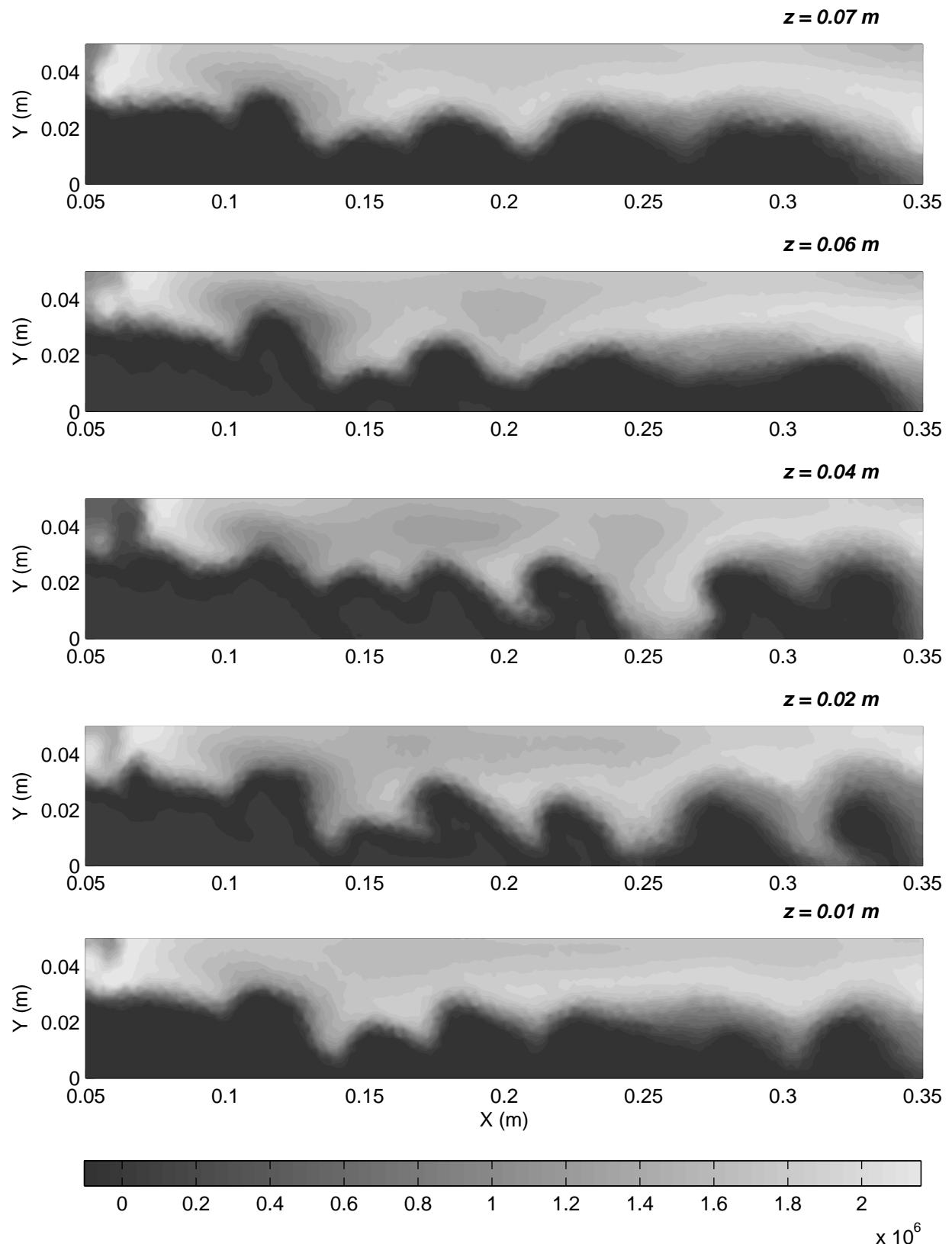


FIG. 5.7 – Solutions sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) obtenues en utilisant le maillage à $N_{cellules} = 138000$, une quadrature LC_{11} et $N_{quad} = 5$: Terme source radiatif S_r en prenant des parois refroidies à 700 K (W.m^{-3}).

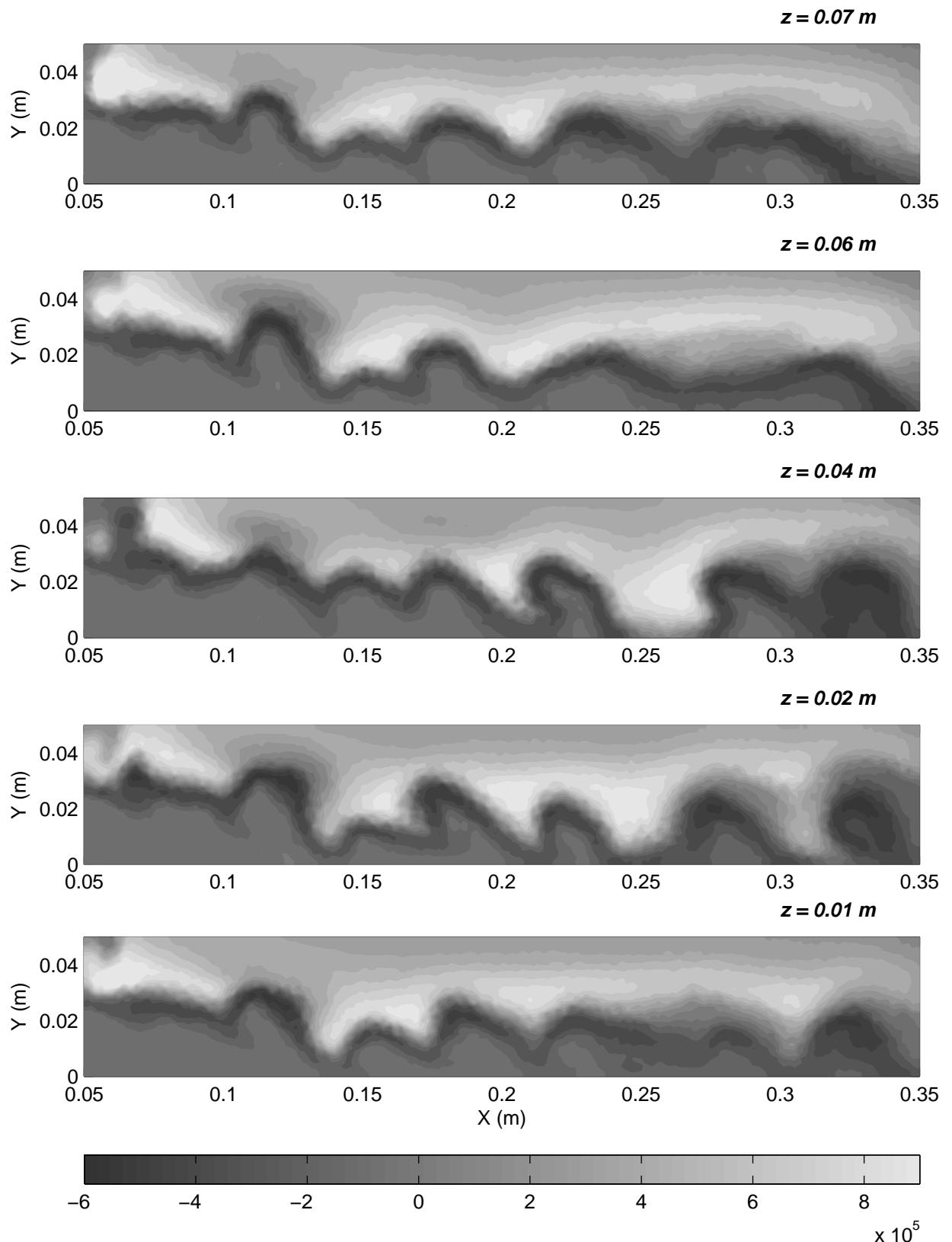


FIG. 5.8 – Profils de S_r ($\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$) sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) en prenant des parois adiabatiques et en utilisant une quadrature LC_{11} et $N_{quad} = 5$ sur le maillage F2.

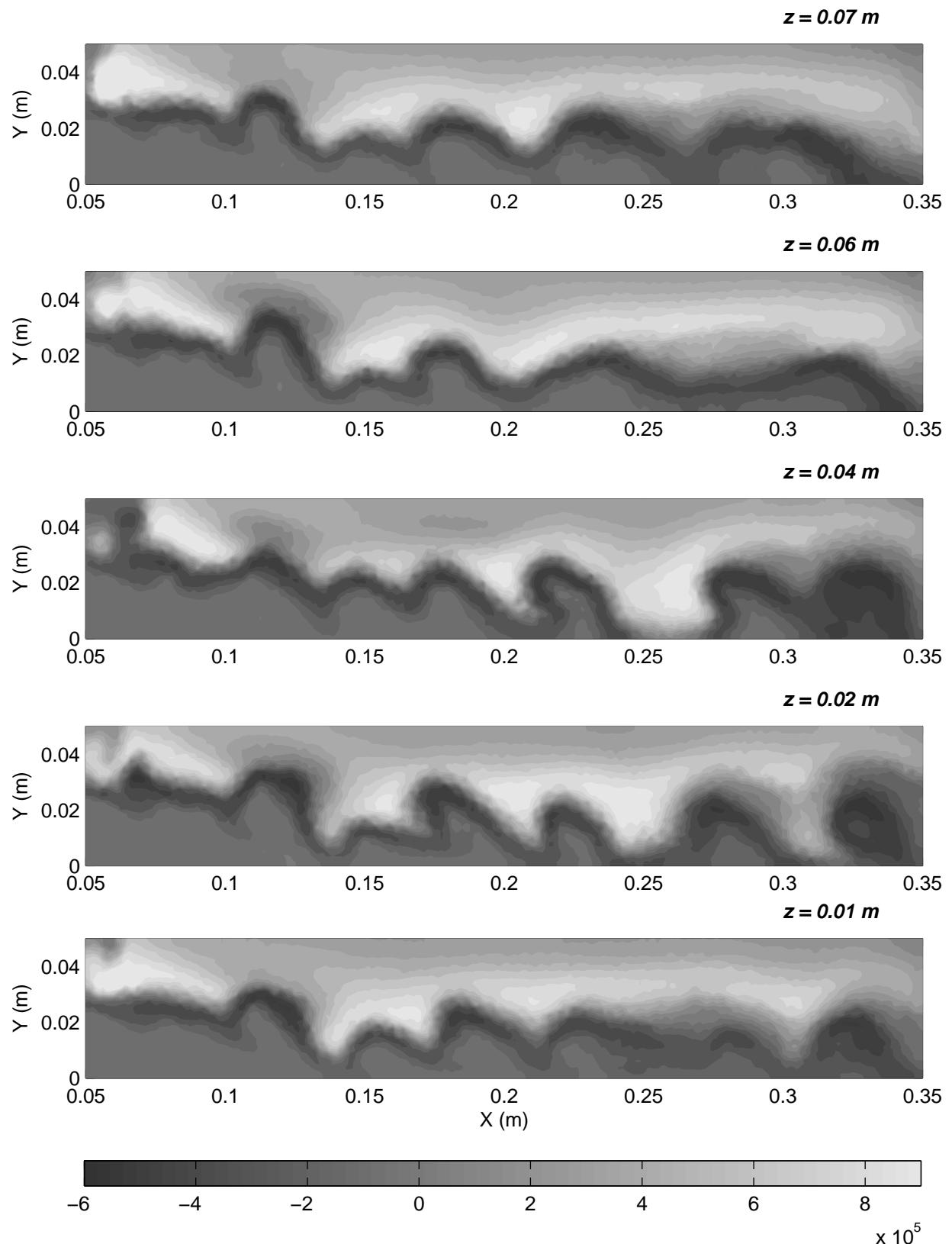


FIG. 5.9 – Profils de S_r ($W.m^{-3}$) sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) en prenant des parois adiabatiques et en utilisant une quadrature S_4 et $N_{quad} = 5$ sur le maillage F2.

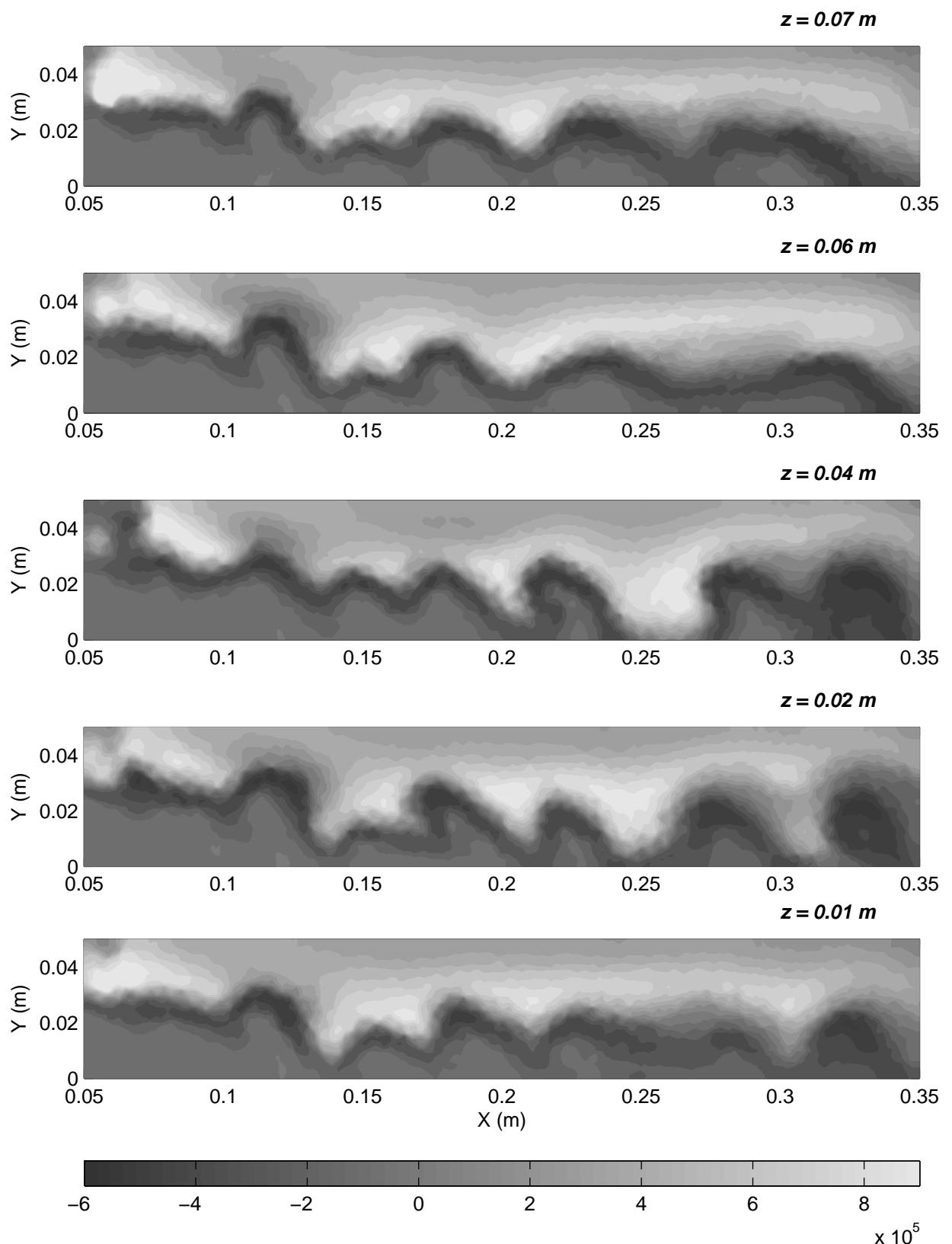


FIG. 5.10 – Profils de S_r ($\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$) sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) en prenant des parois adiabatiques et en utilisant une quadrature S_4 et $N_{quad} = 5$ sur le maillage F1.

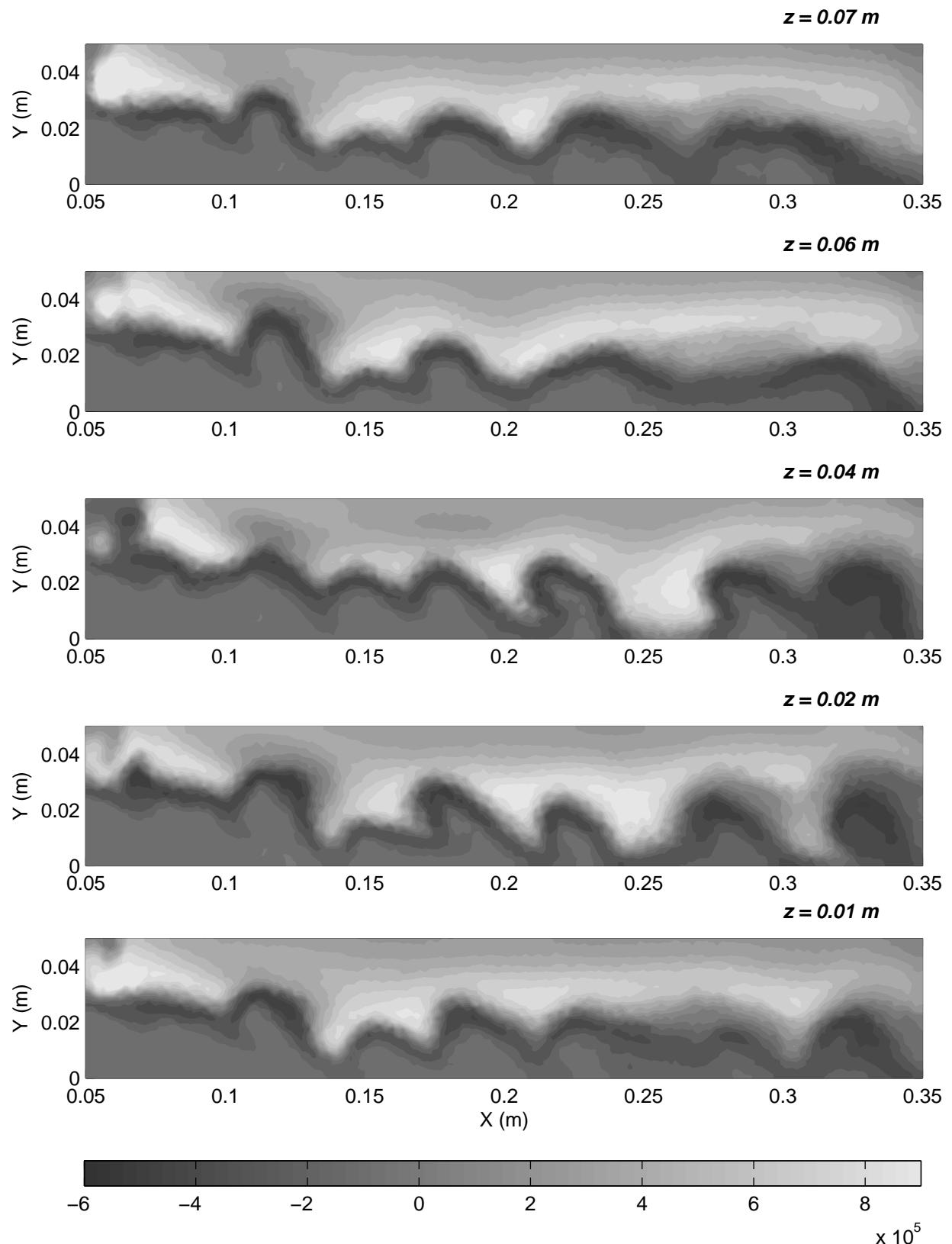


FIG. 5.11 – Profils de S_r ($\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$) sur les cinq plans parallèles (cf. Fig.5.1.1) en prenant des parois adiabatiques et en utilisant une quadrature S_4 et $N_{quad} = 3$ sur le maillage F2.

par rapport aux amplitudes du terme source S_r observés pour une température de paroi inférieure à 500 K. Le terme d'émission pure est toujours positif ou nul.

Nous avons modélisé deux types de conditions limites radiatives différentes. Dans un premier cas, nous avons modélisé un système ayant les parois refroidies à 700 K telles qu'elles devraient l'être dans un système réel (Fig.5.7). Le terme source radiatif obtenu dans cette configuration est du même ordre que le terme d'émission correspondant. Dans un second cas, nous avons utilisé les températures de parois fournies par le code de combustion, celui-ci ayant considéré que le système étudié est adiabatique (Fig.5.8). En comparant ce résultat à l'émission pure (Fig.5.6), nous voyons que le phénomène de réabsorption du rayonnement thermique diminue fortement le terme source radiatif correspondant. Il apparaît donc que la flamme reçoit une grande quantité d'énergie radiative provenant des parois et que le phénomène de réabsorption directe du rayonnement émis par la flamme n'est pas prépondérant. En retour, les flux rayonnés par la zone réactive modifient les températures de parois. A cela s'ajoute le fait que, dans les configurations réelles, les parois ne sont pas noires mais grises (émissivité différente de 1). Le flux radiatif provenant des parois est alors changé en conséquence, mettant en place un réel couplage via les parois. Une modélisation des bonnes conditions limites s'avère nécessaire et déterminante.

Comme le milieu est optiquement mince (forte influence des parois), un modèle OTL pourrait être suffisant pour rendre compte des pertes radiatives dans cette configuration. Cependant, les températures de parois observées ne sont pas homogènes et induisent une dépendance spatiale des luminances de paroi. Ceci ne rend pas l'utilisation du modèle OTL aussi aisée que dans le cas de la flamme à jets opposés, posant le problème de la variation angulaire du rayonnement provenant des parois.

Le terme source radiatif pour le cas à parois adiabatiques est représenté en fonction des différents paramètres qui gèrent le modèle de rayonnement des gaz : température et concentration d'espèces rayonnantes sur les Fig.5.12 et Fig.5.13. Cette représentation montre la non-linéarité de la dépendance du terme source à ces paramètres. Cela rappelle qu'en chaque point les conditions environnantes sont très importantes pour estimer le terme source radiatif qui ne doit pas être basé uniquement sur les propriétés locales en chaque cellule. Un calcul radiatif complet est donc nécessaire pour chaque solution instantanée. Comme pour la flamme monodimensionnelle, une stratégie basée sur une formulation en puissances nettes échangées avec calcul des sensibilités serait possible. Cependant, bien que les moyens informatiques aient progressé de manière phénoménale au cours des dix dernières années, un couplage complet n'est pas encore envisageable en trois dimensions, surtout pour des maillages aussi denses que ceux de la CFD.

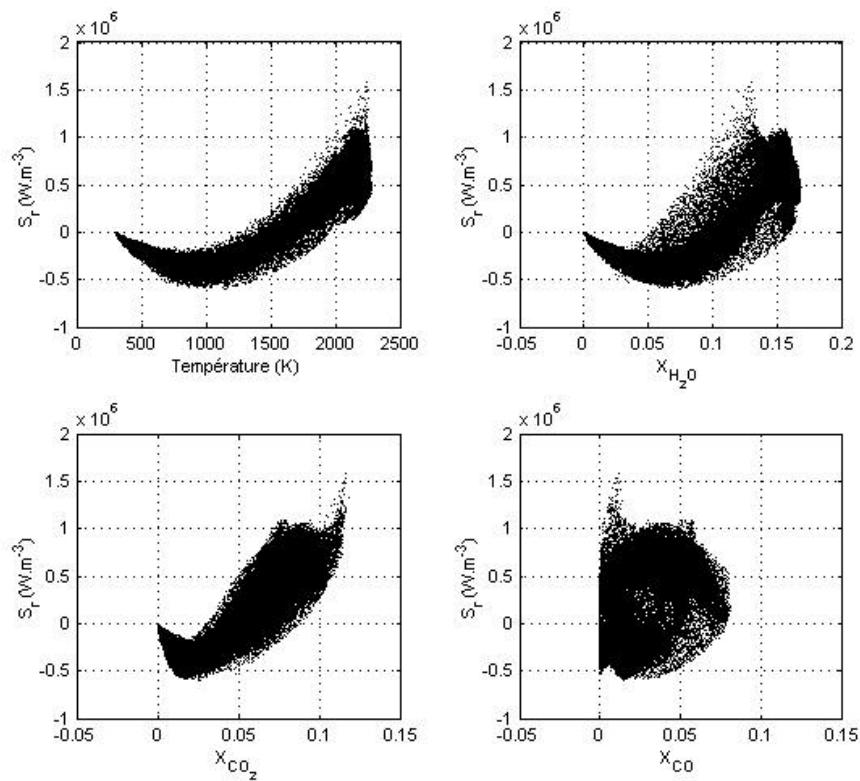


FIG. 5.12 – Dépendance de S_r en fonction de la température et des concentrations d'espèces rayonnantes

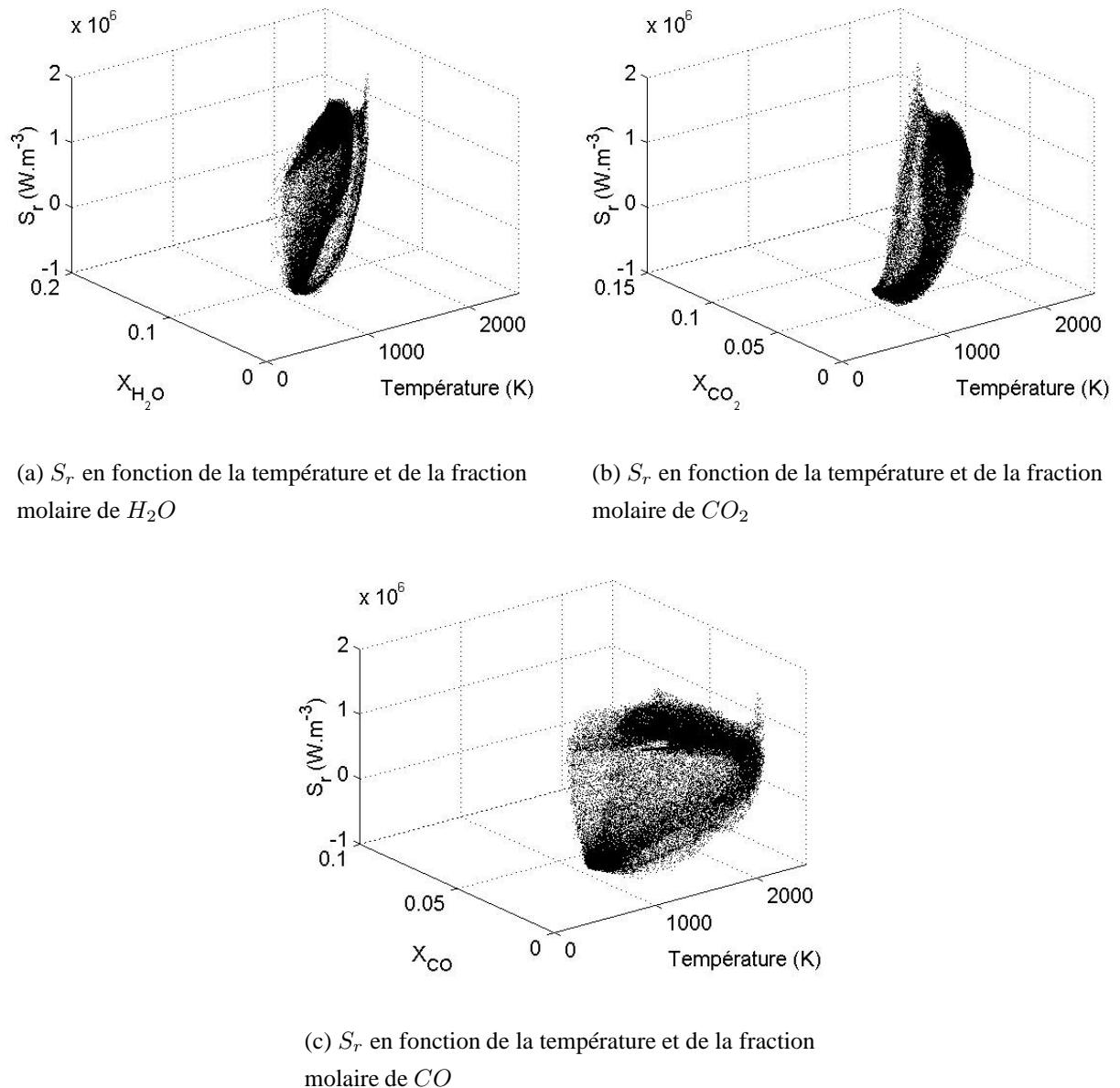


FIG. 5.13 – Dépendance de S_r en fonction des couples de paramètres température/concentration pour chacune des espèces rayonnantes

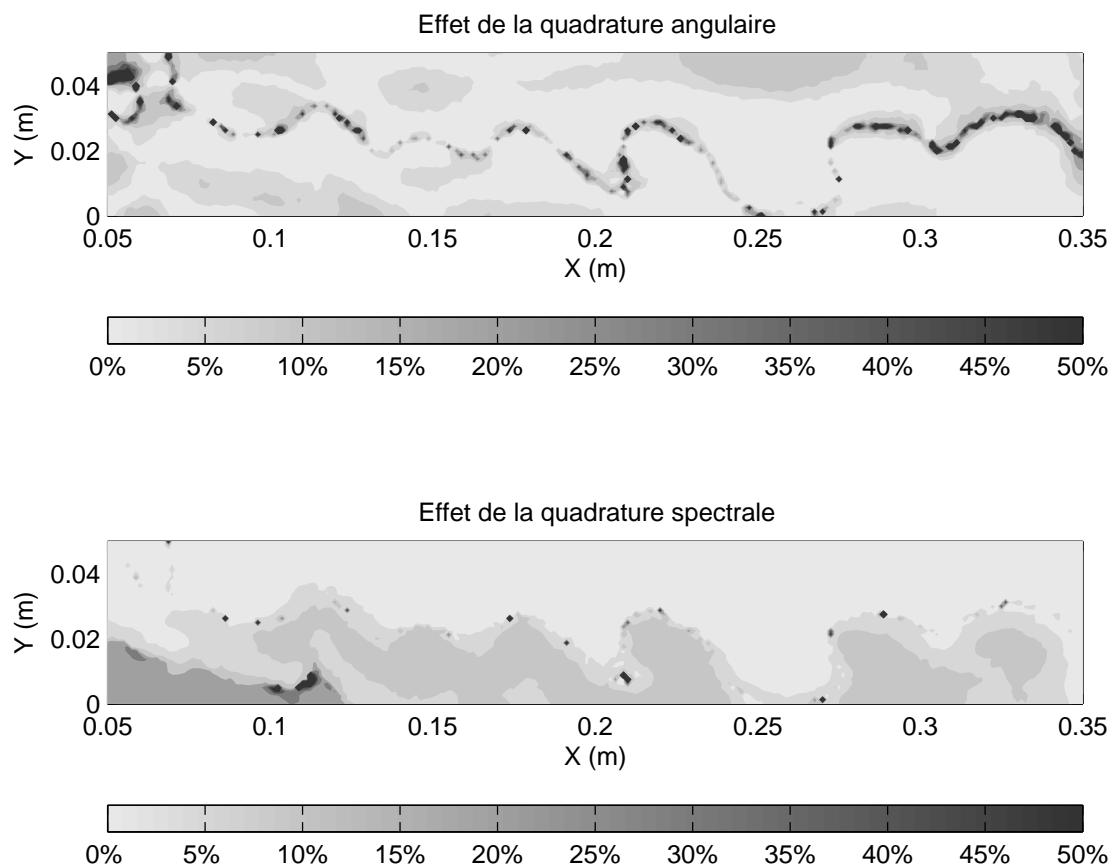


FIG. 5.14 – Effet de la réduction du nombre de points de quadrature spectral par bandes comparé à l’effet de l’augmentation du nombre de directions de la quadrature angulaire : Écart relatif en %

Maillage	Quadrature Angulaire	Quadrature spectrale	Figure
F1 (138000 cellules)	LC_{11} (96 directions)	$N_{quad} = 5$	Fig.5.8
F1 (138000 cellules)	S_4 (24 directions)	$N_{quad} = 5$	Fig.5.9
F2 (68000 cellules)	S_4 (24 directions)	$N_{quad} = 5$	Fig.5.10
F1 (138000 cellules)	S_4 (24 directions)	$N_{quad} = 3$	Fig.5.11

TAB. 5.1 – Différents algorithmes testés avec DOMASIUM

5.1.3 Influence des paramètres de calculs de DOMASIUM

Nous avons testé quatre algorithmes de transfert radiatif disponible dans DOMASIUM, représentés dans le tableau 5.1. L'influence du nombre de cellules a également été testée en sachant qu'un maillage grossier, ayant donc des cellules de volume supérieur, conduit à de plus grandes épaisseurs optiques pour chaque cellule. Nous testons aussi l'effet de la quadrature angulaire (ray effect) en effectuant les calculs avec une quadrature S_4 (bon compromis entre temps de calcul et estimation acceptable des flux) et la quadrature angulaire LC_{11} proposée par Koch [74]. Nous avons aussi changé le nombre de points de quadrature permettant de représenter une bande étroite du spectre (cf. §4.6). Nous utilisons habituellement cinq points de quadrature. Nous avons donc effectué un calcul en ne prenant que trois points de quadrature, accélérant ainsi le calcul d'un facteur 5/3. Nous représentons ainsi les fortes, moyennes et faibles amplitudes de coefficient d'absorption. Les résultats obtenus sont affichés pour les cinq plans verticaux parallèles ($z = 0.01$ m, $z = 0.02$ m, $z = 0.04$ m, $z = 0.06$ m et $z = 0.07$ m) et présentés aux figures répertoriées dans le tableau 5.1.

Globalement, l'influence des différents paramètres est négligeable. Les zones où le terme source est négatif correspondent à des zones où l'on apporte de l'énergie par rayonnement. Dans cette situation, nous remarquons que ces zones correspondent à des zones très réactives au voisinage du front de flamme (Fig.5.5). Plus particulièrement, dans le plan $z = 0.04$ m (à comparer avec ceux de la figure Fig.5.4), la zone chaude (à la sortie de la chambre) contient des espèces rayonnantes à des températures inférieures à 1300 K. Le terme de luminance émise correspondant est faible dans cette zone. Un couplage serait donc nécessaire pour déterminer l'impact du phénomène de réabsorption sur la cinétique chimique dans cette région (ex : transformation du CO en CO_2). L'utilisation d'un maillage grossier n'a pas de grande influence sur le calcul. Les écarts relatifs entre les solutions obtenues en changeant les quadratures angulaire et spectrale sont illustrées sur la Fig.5.14.

Le ray effect étant d'autant plus prononcé quand l'épaisseur optique est faible, nous pouvons estimer que la quadrature S_4 a donné des résultats intéressants. Les zones où la quadrature angulaire

joue un rôle important ($> 15\%$ d'écart) sont principalement des zones où le terme source est faible en valeur absolue ou des zones proches des parois. Sur le plan de l'intégration spectrale, le nombre de points de quadrature utilisé par bande étroite ne semble pas vraiment influent. Cependant certaines zones où l'écart observé est supérieure à 15% correspondent à des zones où le terme source radiatif est négatif et élevé en valeur absolue. Cela signifie que le modèle est moins précis dans ces zones proches du front de flamme.

Les flux radiatifs incidents obtenus aux parois latérales (paroi Sud à la figure Fig.5.15 et paroi Nord à la figure Fig.5.17) et à la paroi supérieure (Fig.5.16) montrent une faible influence de la réduction du nombre de points de quadrature spectrale et confirme le besoin d'utiliser des quadratures angulaires adéquates, c'est à dire avec suffisamment de directions discrètes, quand on observe les phénomènes aux parois. En effet, les profils obtenus en utilisant la quadrature LC_{11} sont plus réalistes et plus homogènes. Le « ray effect » est particulièrement remarquable aux parois Nord et Sud. Ceci confirme les observations faites au chapitre précédent concernant les flux aux parois. Il est nécessaire d'utiliser une quadrature suffisamment efficace pour bien estimer ces flux. Nous recommandons la quadrature LC_{11} pour obtenir des solutions acceptables moyennant des temps de calcul quatre fois supérieure. Toutefois, nous faisons remarquer que, si le temps de calcul n'est pas une contrainte pour un utilisateur voulant calculer les flux au parois avec plus de précision, les quadratures T_N et polaires azimutales présentent l'avantage de pouvoir utiliser de façon simple un nombre de directions discrètes supérieur à la centaine.

5.2 Combustion turbulente et rayonnement

Quelques travaux cherchant à modéliser les transferts radiatifs en combustion turbulente ont été menés par le passé [65]. Dans la plupart de ces études, le calcul radiatif était effectué à partir de données moyennées, à des pas de temps supérieurs à ceux de la CFD. La modélisation du couplage rayonnement/combustion dans des écoulements turbulents requiert une modélisation de l'interaction turbulence/rayonnement (TRI). Cette interaction entre le rayonnement et la turbulence a été abordé par Modest et al. [81, 108, 112] dans l'optique de mieux comprendre le problème et d'estimer ses effets d'un point de vue théorique. Récemment, Ripoll [134] a proposé une discussion portant sur la proposition de modèles de fermeture adaptés pour la variance des grandeurs radiatives. Le problème de la prise en compte de la TRI est soulevé mais reste encore irrésolu à l'heure actuelle. Nous proposons ici un calcul radiatif sur une géométrie de chambre aéronautique pour laquelle un calcul LES instationnaire a été réalisé. La comparaison avec une solution moyennée donne quelques indications sur les effets de l'interaction combustion turbulente/rayonnement.

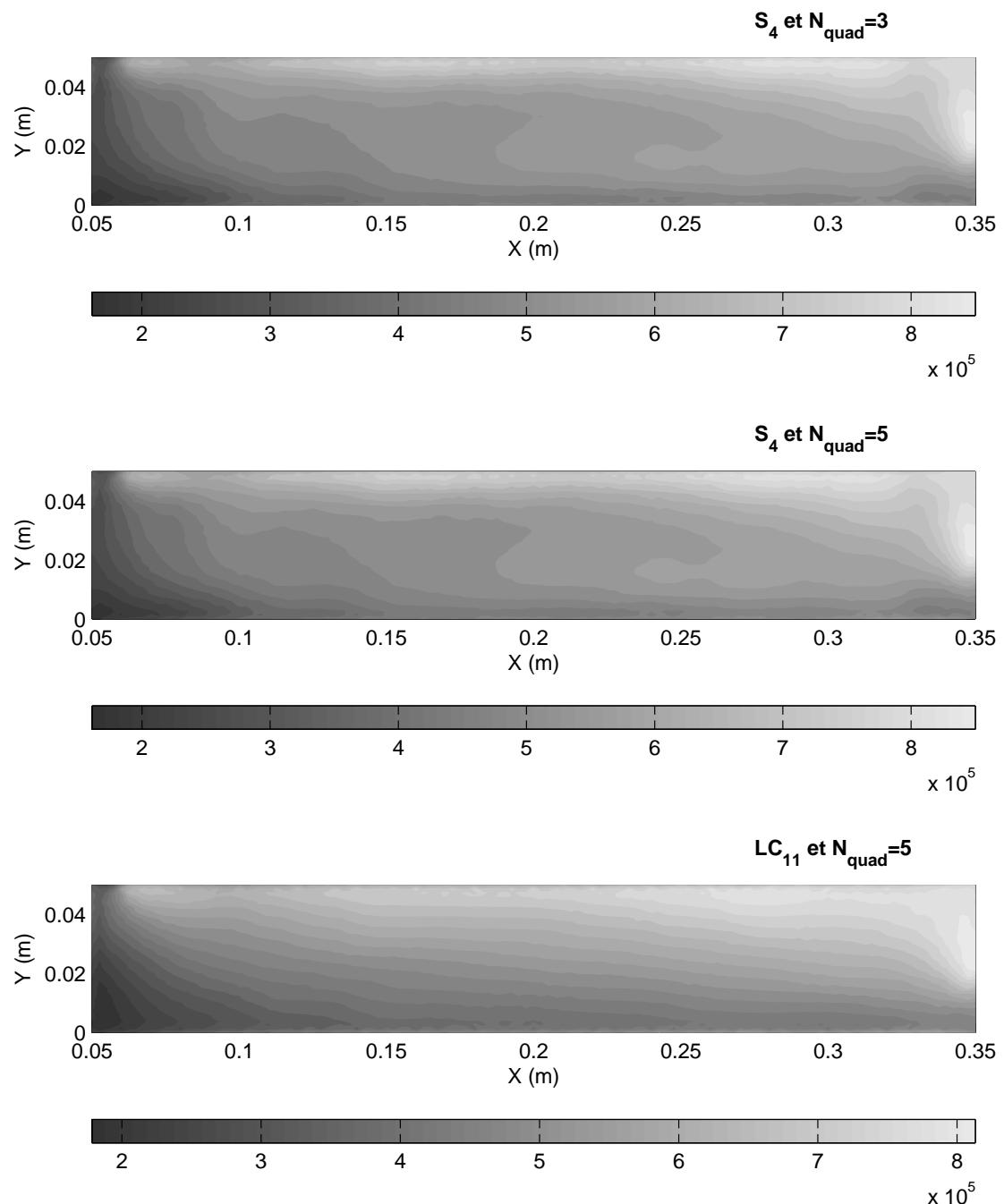


FIG. 5.15 – Profils de flux radiatif incident H_w ($W.m^{-2}$) reçu aux parois : Paroi latérale Nord

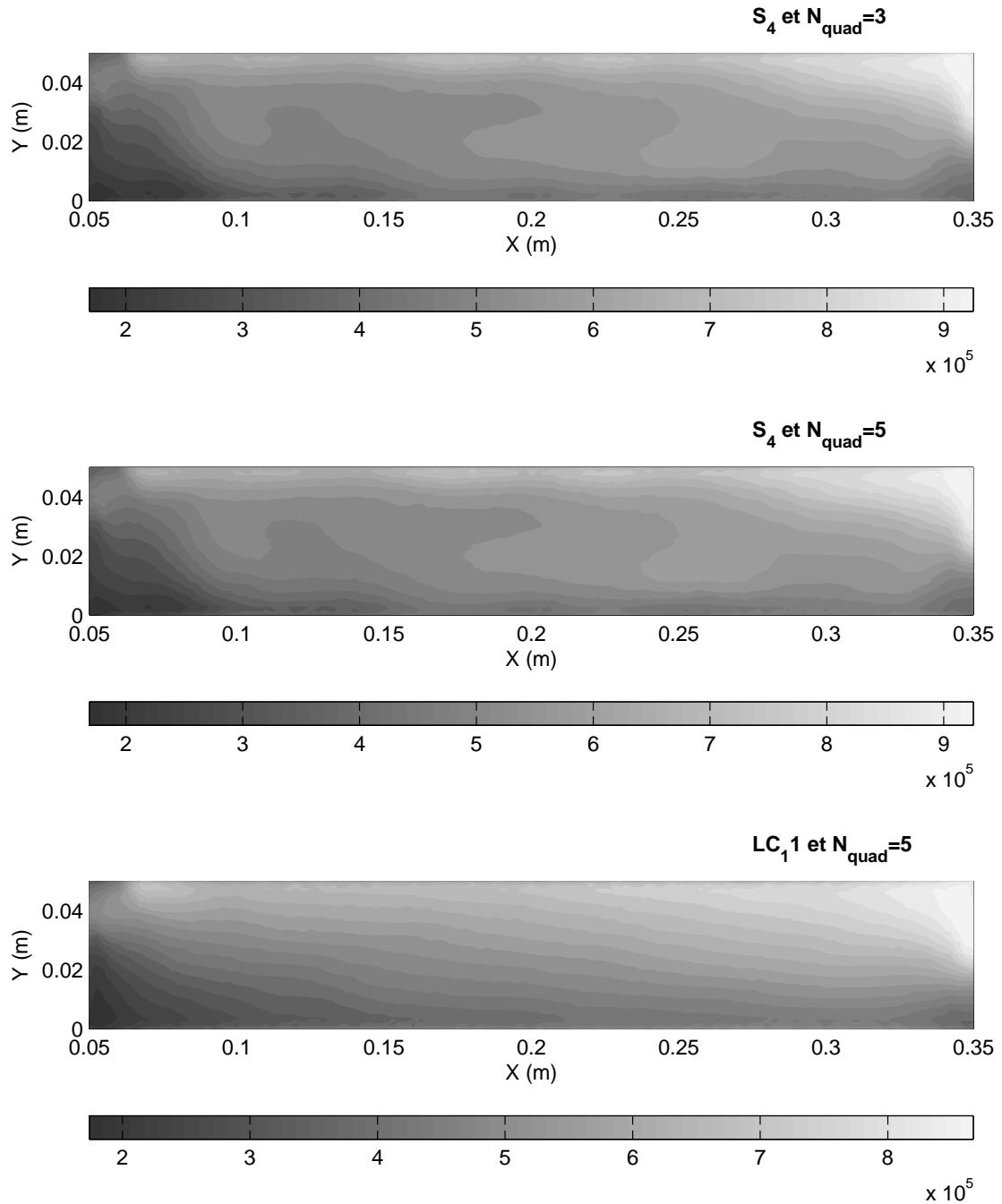


FIG. 5.16 – Profils de flux radiatif incident H_w ($W.m^{-2}$) reçu aux parois : Paroi latérale sud

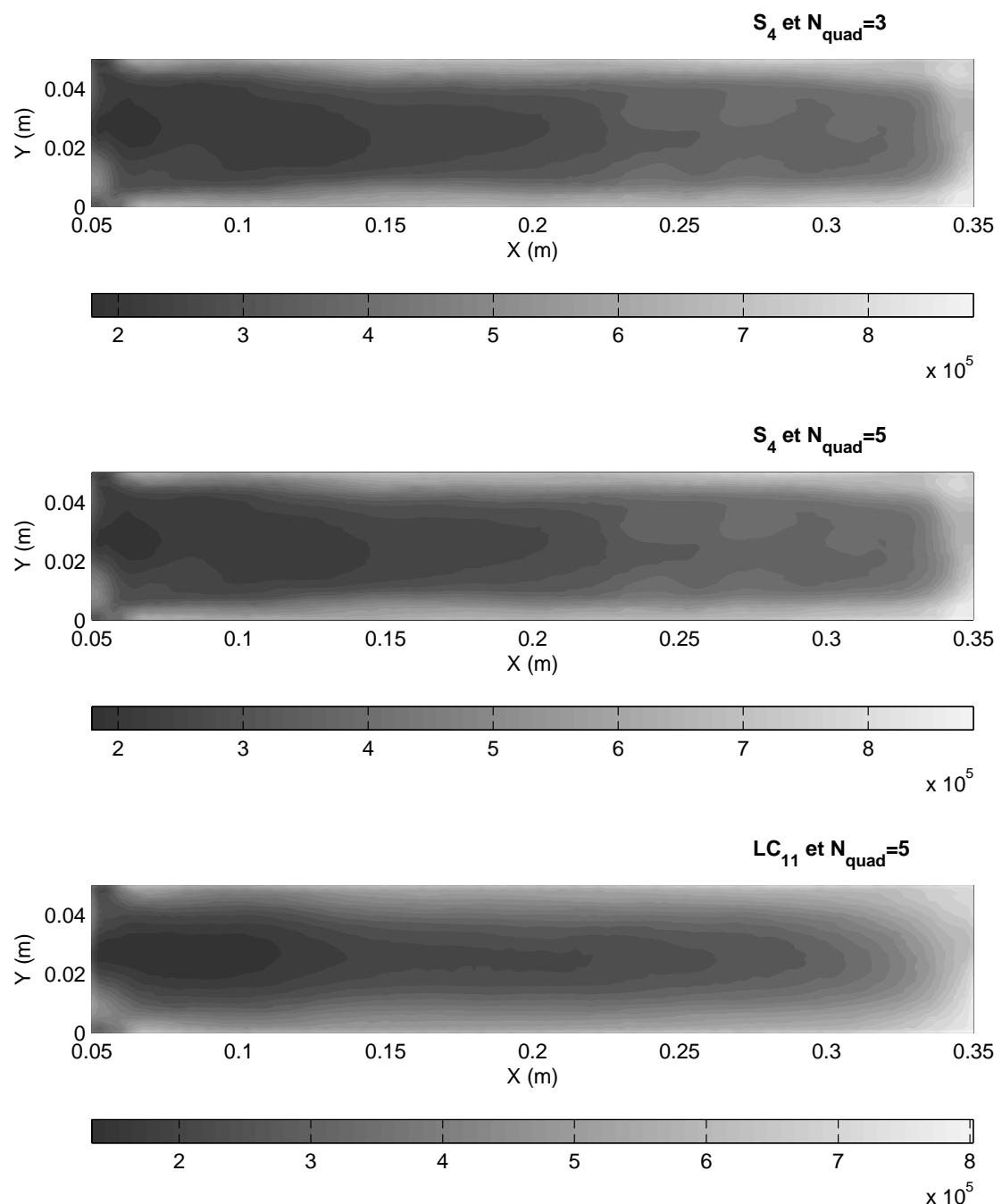


FIG. 5.17 – Profils de flux radiatif incident H_w ($W.m^{-2}$) reçu aux parois : Paroi supérieure

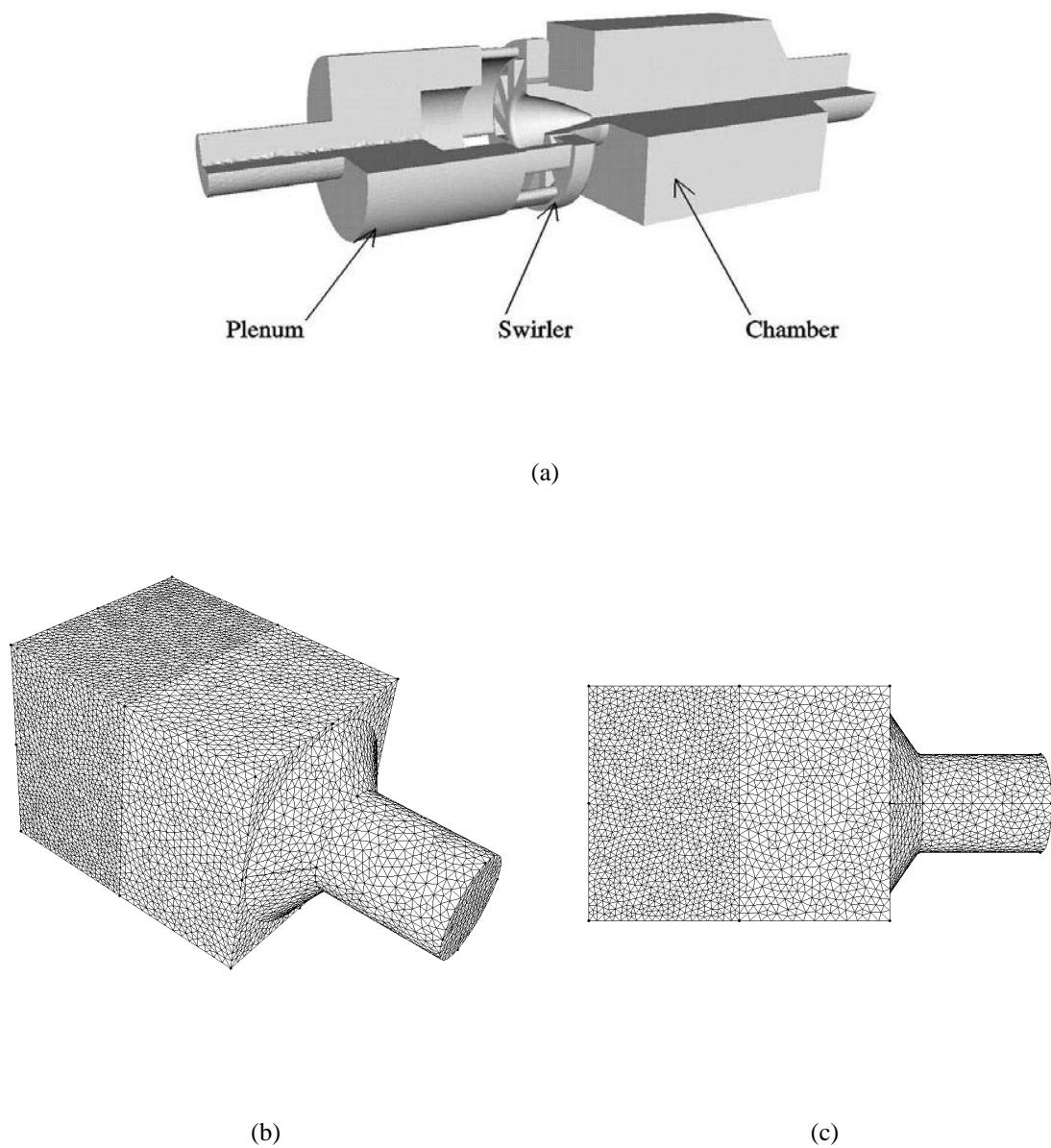


FIG. 5.18 – Configuration et maillage de PRECCINSTA

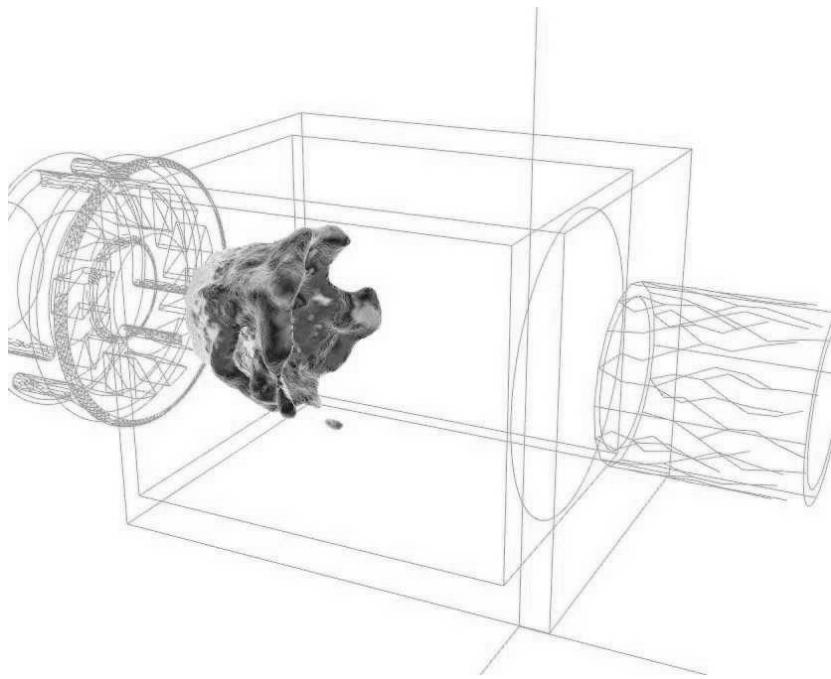


FIG. 5.19 – Isosurface à $T = 1400$ K de la chambre PRECCINSTA

5.2.1 Application à une chambre de combustion industrielle

La configuration utilisée pour cette étude est celle d'une chambre de combustion développée dans le cadre du projet européen PRECCINSTA (partenaires : ALSTOM Power, Turbomeca, CERFACS, CNRS, EDF, ENEL, Rolls Royce, ..) et représentée à la figure Fig.5.18(a). Cette configuration a été choisie à cause des fortes instabilités qu'elle présente dans la zone de la flamme. Dans le dispositif expérimental, le fuel est injecté par un swirler dans un écoulement d'air provenant du plenum. Le mélange se faisant très rapidement, l'écoulement arrivant dans la chambre est considéré comme étant parfaitement prémixé. Le fuel utilisé est du méthane. Son débit en entrée est de 0.5 g.s^{-1} et le débit d'air provenant du plenum est de 12.33 g.s^{-1} , ce qui donne une flamme de richesse globale $\Phi_g = 0.7$. La température du mélange arrivant dans la chambre de combustion est de 300 K. Les calculs ont été réalisés au CERFACS avec le code AVBP.

Nous montrons à la figure Fig.5.19 une représentation 3D de l'isosurface de température à 1400 K.

5.2.2 Influence de la turbulence sur le rayonnement thermique

Nous avons modélisé les transferts radiatifs uniquement à l'intérieur de la chambre de combustion. Le maillage utilisé (cf. Fig5.18(c)) est constitué d'environ 270000 tétraèdres. Nous avons considéré les parois comme étant noires et conservé les températures de parois fournies par le code

de combustion afin de mieux observer l'influence de la turbulence sur le phénomène d'absorption. Pour des raisons de temps de calcul, nous avons préféré utiliser une quadrature angulaire S_4 , en supposant que les différentes solutions de champs radiatifs sont affectées de la même façon par le « ray effect ». Notre précédente étude sur la configuration *ICLEAC* a montré que l'influence de la quadrature angulaire sur le profil de terme source était relativement faible mais qu'elle était plus marquée aux parois. Le nombre de points de quadrature pour chaque bande étroite du modèle spectral est $N_{quad} = 5$.

Nous avons utilisé le code DOMASIUM pour calculer les champs radiatifs à six instants différents à partir de six solutions instantanées obtenues par LES et réparties sur une période de 4 ms. Nous noterons donc $S_r(T(t_j), X_i(t_j))$ le terme source radiatif calculé à chaque instant t_j à partir de la température et des concentrations d'espèces rayonnantes (notées X_i) à cet instant. Nous avons pu calculer à partir de ces solutions instantanées de champ radiatif un profil de « terme source radiatif moyen » tel que :

$$\overline{S_r} = \langle S_r(T(t_j), X_i(t_j)) \rangle \quad (5.1)$$

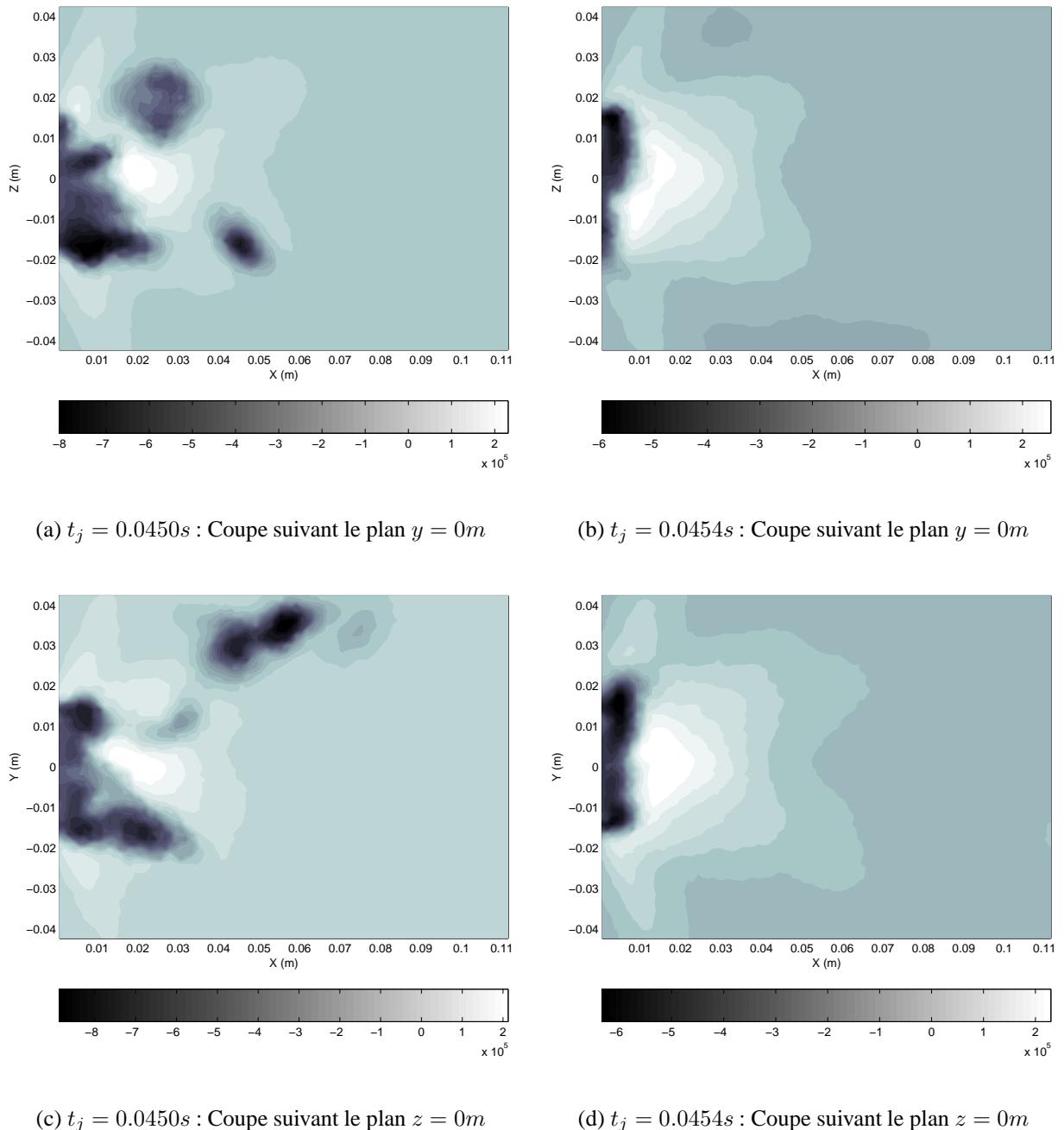
Ce terme source moyen est comparé au terme source calculé à partir d'une solution moyennée de cet écoulement sur la période considérée. Nous appellerons « terme source moyen » le terme source radiatif correspondant à ce calcul :

$$S_{r,moyen} = S_r(\langle T(t_j) \rangle, \langle X_i(t_j) \rangle) \quad (5.2)$$

De la même façon, nous déterminons $\overline{H_w}$ le flux incident aux parois moyen sur les six instants et $H_{w,moyen}$ le flux incident aux parois obtenu par le calcul effectué en utilisant les champs de données moyennées.

Nous ne représentons ici que les profils radiatifs obtenus pour les deux premières solutions instantanées ($t = 0.0450s$ et $t = 0.0454s$). La figure Fig.5.20 montre les profils de S pour le plan vertical $y = 0m$ et le plan horizontal $z = 0m$. Le profil de terme source est très influencé par la turbulence. Les profils pris à deux instants successifs peuvent être totalement différents puisque l'écoulement qui les génère est très turbulent. Nous remarquons que la zone proche de la sortie de la chambre est très homogène et présente des termes sources radiatifs proches de zéro. Cela signifie que le domaine est relativement homogène et isotherme. Les échanges volumes-volumes sont alors prépondérants dans cette zone et le bilan radiatif local en chaque point de cette zone est très faible (la puissance nette échangée entre deux zones identiques est nulle).

Les figures Fig.5.21 et Fig.5.22 montrent les profils de flux radiatif incident aux parois de la chambre de combustion (Sud, Nord, Bas et Haut), correspondant aux deux mêmes instants. Les profils de flux aux parois diffèrent moins que ceux du terme source. Cela est dû au fait que les

FIG. 5.20 – Termes source radiatif instantanés S_r

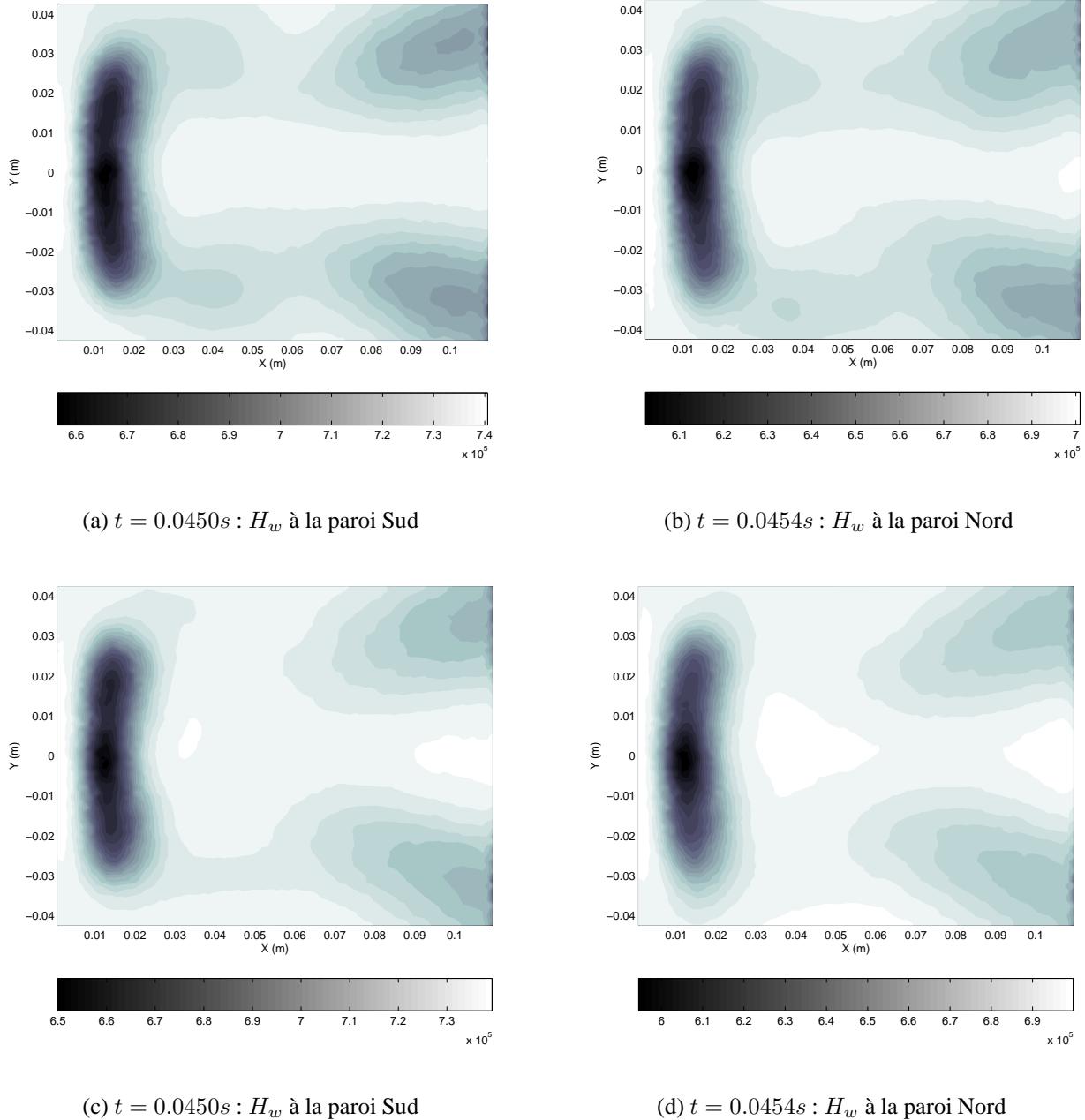
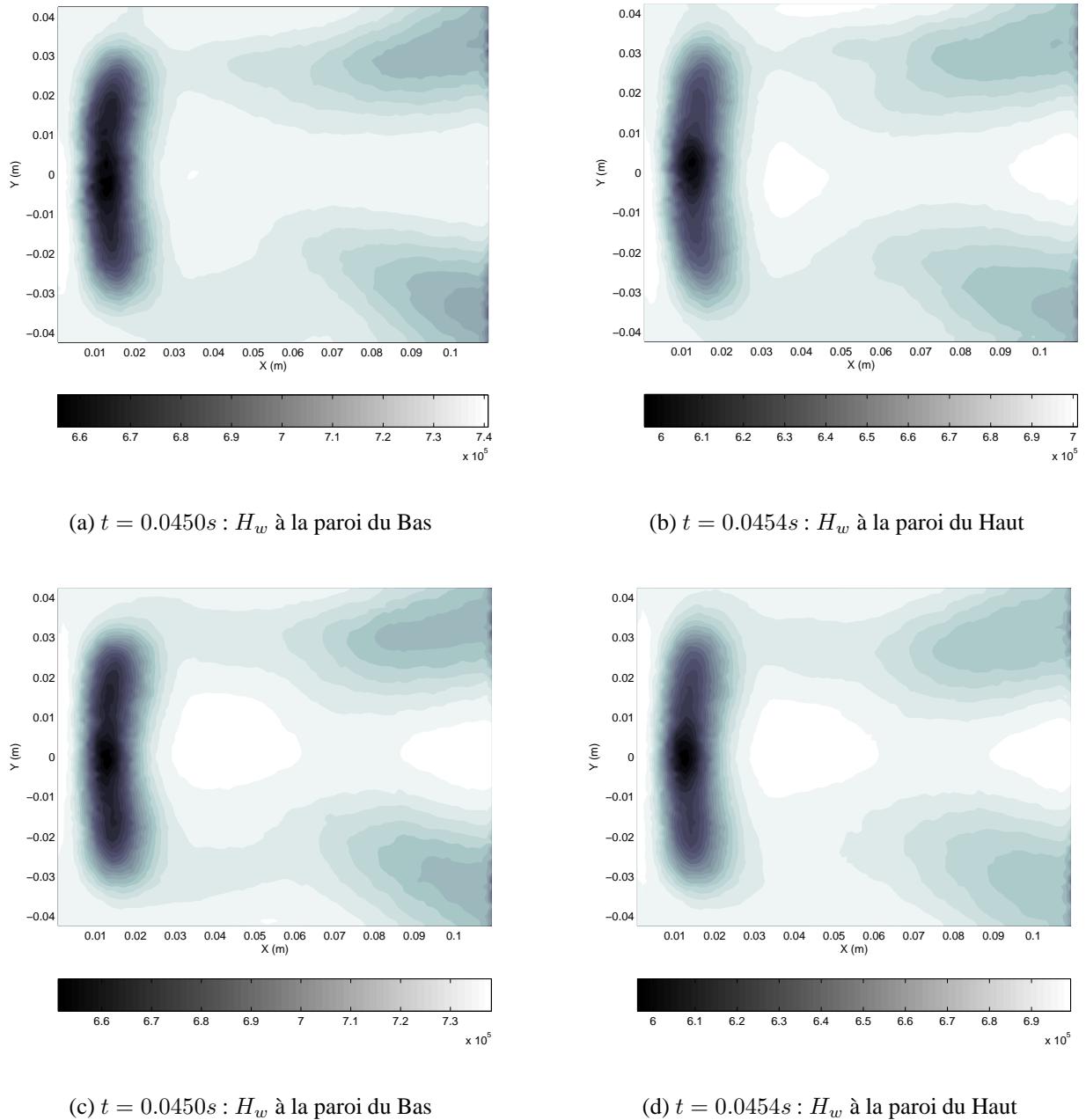


FIG. 5.21 – Flux radiatif incident instantané H_w reçu aux parois Sud et Nord

FIG. 5.22 – Flux radiatif incident instantané H_w reçu aux parois Bas et Haut

échanges entre parois chaudes sont prépondérants et ont tendance à masquer l'impact des fluctuations du rayonnement provenant de la flamme. Les dimensions de cette configuration étant du même ordre que celle de la configuration *ICLEAC* le rayonnement des parois joue un rôle du même ordre.

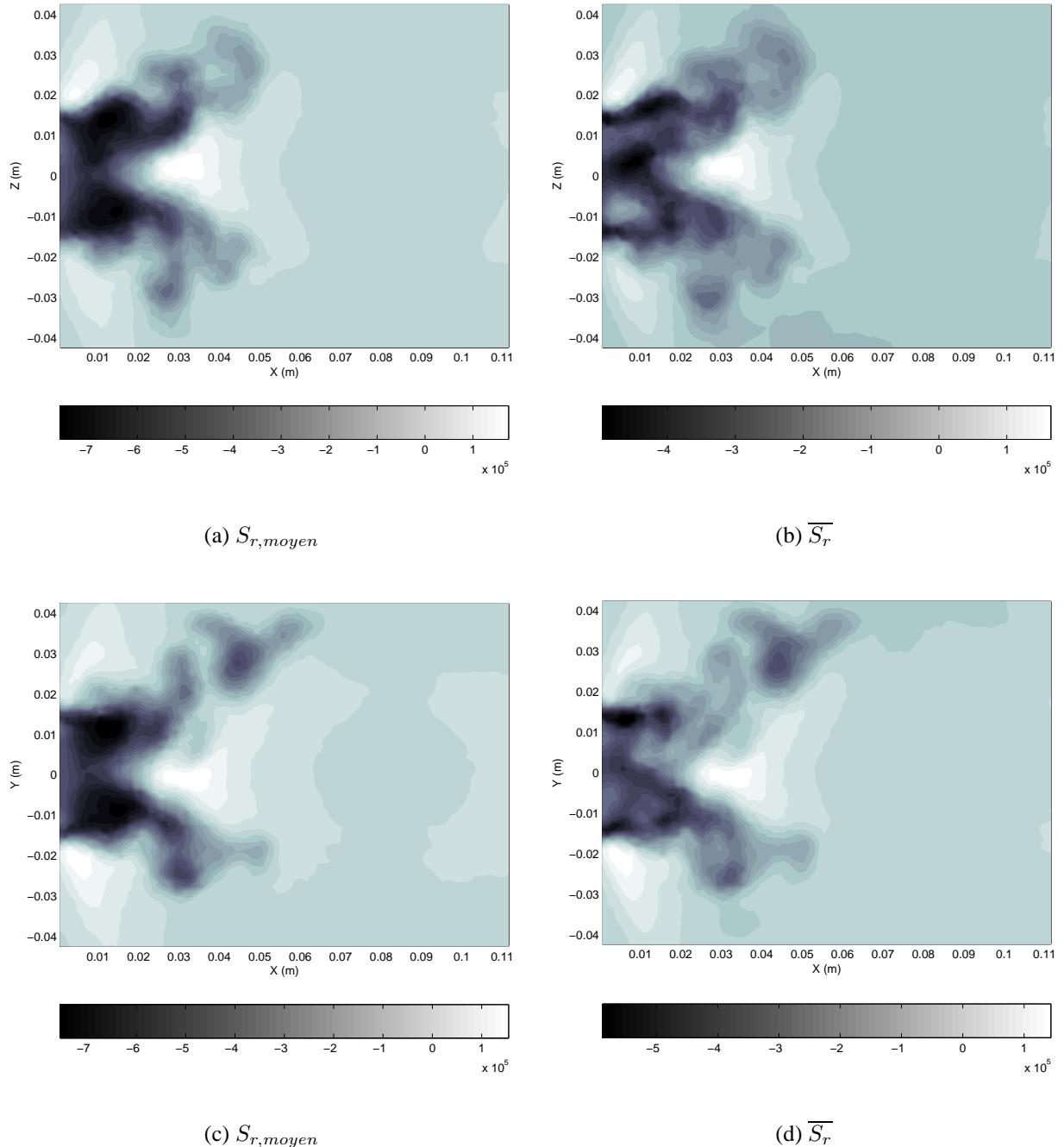
A la Fig.5.23, une comparaison du terme source radiatif moyen $\overline{S_r}$, obtenu sur les six instants, avec le terme source moyen $S_{r,moyen}$, obtenu à partir de champs données moyennées, montre des solutions du même ordre de grandeur surtout dans les zones de forte émission où le bilan radiatif est positif (maximum de l'ordre de +100kW). Toutefois la solution moyennée présente des zones très absorbantes où le terme source peut être de l'ordre de -700 kW alors que celles correspondant au terme source moyen n'excède pas les -500kW. Globalement, nous faisons une surestimation du terme source radiatif en utilisant les champs de données moyennées pour modéliser les transferts radiatifs. L'écart relatif entre les deux termes sources radiatifs a été calculé et représenté en fonction de l'amplitude du terme source moyen (cf. Fig.5.26(a)). Les écarts observés sont très grands.

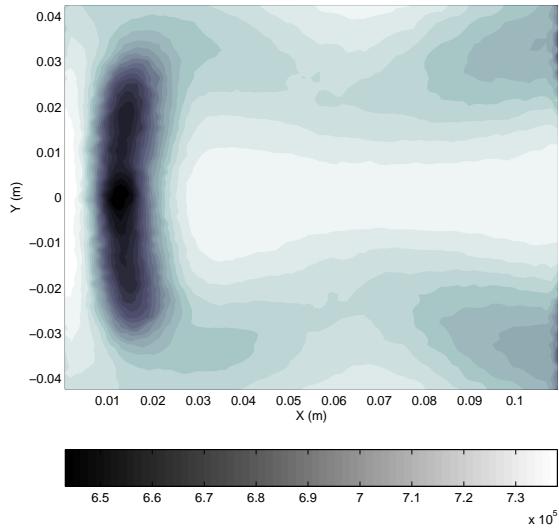
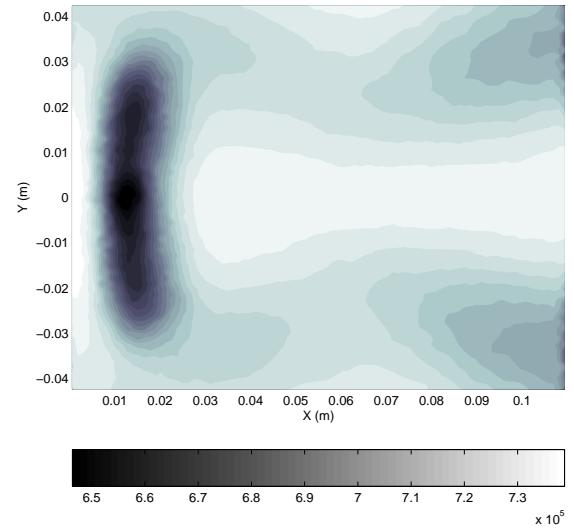
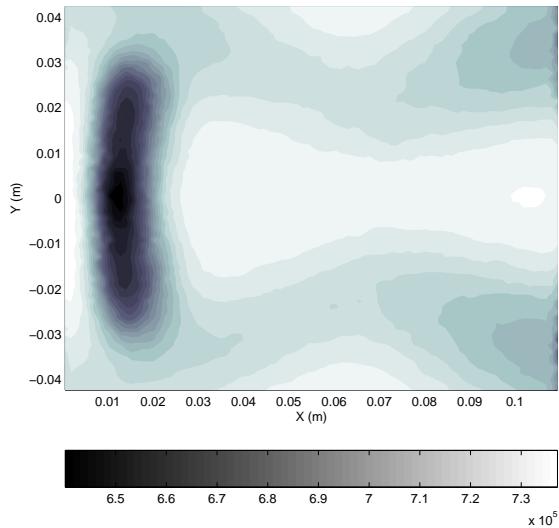
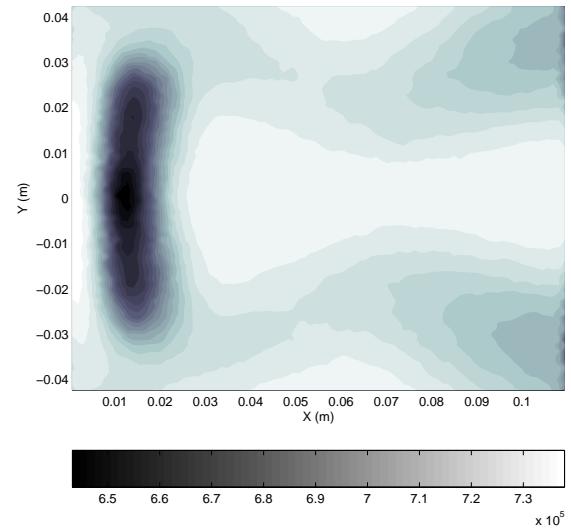
Une comparaison identique a été faite sur les flux aux parois Sud, Nord et aux parois inférieure et supérieure (cf. Fig.5.24 et Fig.5.25). Elle montre que le flux radiatif incident moyen $H_{w,moyen}$ aux parois diffère peu de du flux radiatif incident moyen $\overline{H_w}$. Pour chaque face la plage sur laquelle varient ces flux est identique : entre $6.45 \cdot 10^6$ et $7.35 \cdot 10^6$. Une représentation de l'écart relatif entre ces deux grandeurs est faite en fonction de l'amplitude de $\overline{H_w}$ (cf. Fig.5.26(b)). Elle confirme que l'on ne commet pas vraiment d'erreur sur le flux reçus aux parois en le calculant à partir des champs de données moyennées. Ceci est consistant avec le fait que le flux incident aux parois n'est pas principalement dû à la flamme mais aux autres parois et aux zones de gaz brûlés près de la sortie de la chambre. Ces zones étant peu fluctuantes le flux reçu aux parois varie peu et les données moyennées suffisent à le calculer.

Cette étude montre que le rayonnement est couplé de façon non-linéaire avec la combustion et que l'utilisation de champs moyens conduit à des erreurs sur l'estimation du rayonnement. Le rayonnement étant un phénomène beaucoup plus rapide que la combustion, ses effets sur la cinétique chimique et la dynamique du système sont immédiats. Une attention particulière doit être apportée à la façon de prendre en compte ces effets. Il est nécessaire de calculer les champs radiatifs instantanés pour effectuer un couplage de qualité avec la combustion.

5.3 Conclusions

Nous avons montré l'efficacité du code DOMASIUM pour le calcul radiatif dans des chambres de combustion en géométrie complexe et sur des maillages non structurés. Le code est capable

FIG. 5.23 – Comparaison de $\overline{S_r}$ et $S_{r,moyen}$

(a) $H_{w,moyen}$ à la paroi Sud(b) \overline{H}_w à la paroi Sud(c) $H_{w,moyen}$ à la paroi Nord(d) \overline{H}_w à la paroi NordFIG. 5.24 – Comparaison de \overline{H}_w et $H_{w,moyen}$ aux parois Sud et Nord

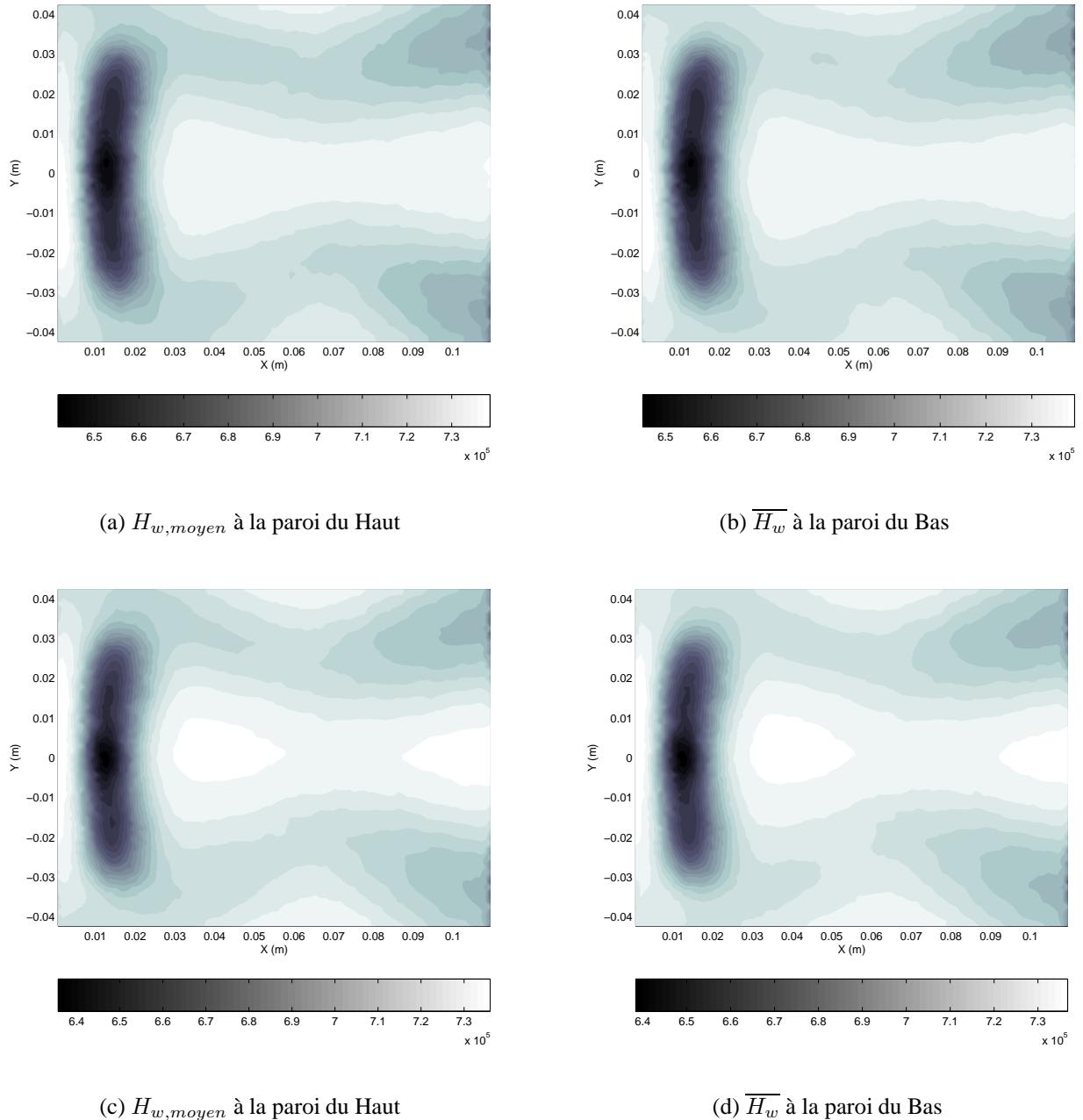
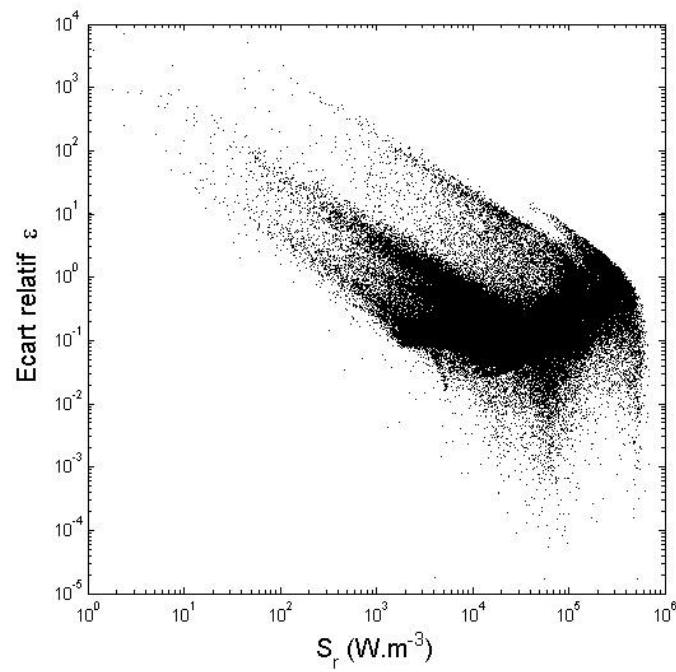
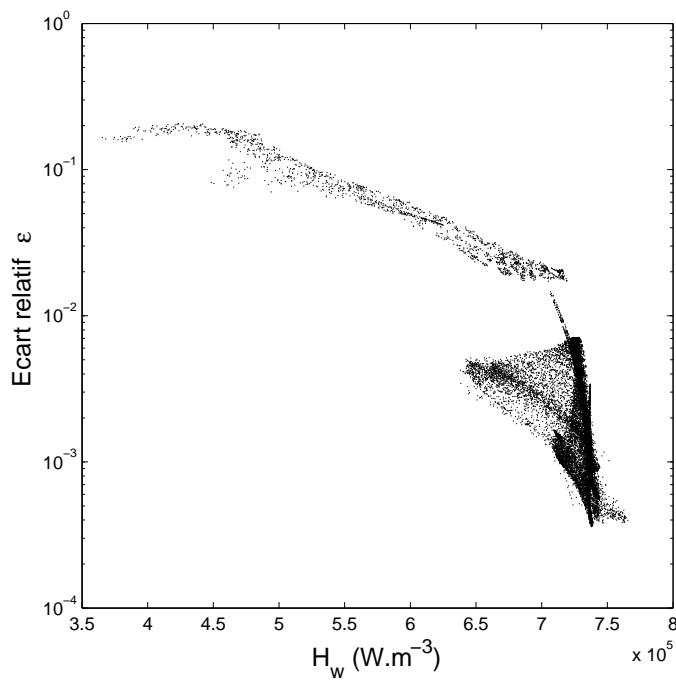


FIG. 5.25 – Comparaison de \overline{H}_w et $H_{w,moyen}$ aux parois Bas et Haut



(a) Ecart relatif entre $\overline{S_r}$ et $S_{r,moyen}$ pour tous les éléments de volume du maillage



(b) Ecart relatif entre $\overline{H_w}$ et $H_{w,moyen}$ reçu pour tous les éléments de paroi

FIG. 5.26 – Ecarts relatifs entre les termes moyens et la moyenne des termes instantanés

de calculer les flux aux parois et le champ de terme source radiatif pour une solution donnée de combustion turbulente. Un résultat intéressant concernant les flux aux parois est qu'il est possible d'obtenir une meilleure précision en augmentant simplement le nombre de direction discrètes dans l'algorithme. D'autre part nous avons confirmé que le couplage combustion rayonnement requiert une prise en compte des fluctuations turbulentes, ce qui nécessite en théorie un calcul radiatif complet à chaque instant et à partir des valeurs locales des variables température et concentrations. Les calculs présentés dans ce chapitre utilisent des valeurs filtrées (au sens LES) de ces variables, ne prenant en compte que les fluctuations (spatiales et temporelles) de grande échelle : la question du couplage à petite échelle et de son impact sur le résultat global reste posée. Il est nécessaire a priori d'utiliser un modèle de « sous-maille » pour ce couplage mais de tels modèles sont encore à développer et à valider. En ce sens, l'utilisation d'un modèle OTL couplé avec la DNS peut être d'une grande aide. Cependant, cette approche ne permettra pas d'étudier le phénomène d'absorption qui, comme on l'a déjà vu, n'apparaît que dans les systèmes de grande dimension. Enfin, même à grande échelle, les temps de calcul obtenus ne permettent pas encore d'envisager le couplage direct. Au court de notre étude nous avons pu observé que les temps de calculs est fonction du nombre de processeurs sur lesquels le calcul est parallélisé et du type d'architecture de ces processeurs. Chaque calcul effectué sur la configuration PRECCINSTA (270000 tétraèdres / S_4 / $N_{quad} = 5$) a duré en moyenne 2h30min sur 8 processeurs soit un volume horaire équivalent à 20h de calcul. Par comparaison, pour cette même configuration, une itération du calcul de combustion par LES correspondant à un calcul instantané prend une dizaine de seconde. Il est nécessaire de réduire fortement le temps de calcul radiatif. Une grande partie du temps de calcul est consacrée à l'intégration spectrale qui représente plus de 1600 calculs monochromatiques. Il est donc nécessaire de proposer des modèles de rayonnement des gaz plus simples que le modèle SNB-ck. Celui-ci pourra servir de référence dans une telle démarche.

Pour mieux estimer si les échanges gaz/parois sont prépondérants ou pas (nous avons notamment observé deux configurations qui semblent différentes de ce point de vue), il serait intéressant de calculer les puissances nettes échangées (PNE) entre un élément de volume et le reste du système, gaz et parois. Ce calcul pourra être effectué par une méthode Monte Carlo en utilisant le code CASIMIR développé par Patrice Perez au sein de notre laboratoire [122]. Il peut déjà fournir l'information sur la puissance nette échangée entre un point et l'ensemble des parois et sur la puissance nette échangée entre ce même point et le reste du volume de gaz. Ce code est en cours d'adaptation aux géométries utilisées par DOMASIUM. Il pourra aussi effectuer des calculs de contrôle en un point du système pouvant donné lieu à des tests de validation des solutions obtenues par DOM.

Chapitre 6

Conclusions et Perspectives

Dans cette thèse, nous avons cherché à obtenir les premiers éléments nécessaires à la mise en place du couplage entre la combustion et le rayonnement. Nous nous sommes placés à deux niveaux d'analyse différents : une géométrie simplifiée et une description détaillée des phénomènes physiques nous a permis

de mieux appréhender le phénomène du couplage entre le rayonnement et la cinétique chimique ; parallèlement, un code (DOMASIUM) permettant de calculer le rayonnement dans des géométries complexes tridimensionnelles a été développé en vue d'un couplage avec les codes de combustion. Le code DOMASIUM est basé sur une extension aux maillages non structurés de la méthode aux ordonnées discrètes. Il prend en compte le rayonnement des gaz de combustion par un modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés. A l'heure actuelle, ce code permet de calculer les flux aux parois et les champs de termes sources radiatifs, par post-traitement des solutions instantanées du code de combustion AVBP du CERFACS.

La fiabilité de l'outil a été confirmée par une campagne de validation sur des configurations académiques. Une étude menée sur l'efficacité de différents schémas de dérivation spatiale a montré que la diffusion numérique qui apparaît aux fortes épaisseurs optiques est intrinsèquement liée à l'approche en volumes finis de la méthode aux ordonnées discrètes. Les résultats montrent que le schéma DMFS permet le meilleur compromis entre flexibilité (utilisation en maillage hybride) et simplicité (faible coût en temps de calcul).

Les premières applications du code DOMASIUM à des configurations de combustion turbulente proposées par le CERFACS ont montré la forte influence des températures de parois sur les transferts radiatifs. Il est donc nécessaire de porter une attention particulière au problème des conditions limites, qui doivent être compatibles entre le modèle de combustion turbulente et le modèle radiatif.

Une étude de l'influence de la turbulence sur le rayonnement a confirmé que les transferts radiatifs étaient très dépendants des fluctuations de température et de concentrations. Si on envisage un couplage direct avec la combustion turbulente, le rayonnement devra être calculé en théorie à chaque incrément en temps de la simulation de la combustion. En pratique il sera nécessaire de développer des stratégies plus économiques, où le calcul radiatif complet sera fait à une fréquence moindre. Toutefois on a pu voir que dans certaines configurations, les flux aux parois sont moins sensibles à la turbulence et sont correctement estimés à partir des champs de données moyennés.

Une étude paramétrique de la flamme monodimensionnelle à jets opposés a pu être menée grâce à un outil numérique permettant de modéliser de manière grossière (OTL) ou fine (TLM) le couplage entre les transferts radiatifs et la cinétique chimique en combustion laminaire. Cette étude nous a montré que pour des flammes riches et/ou faiblement étirées le transfert radiatif devenait un phénomène énergétique prépondérant et que l'hypothèse de flamme adiabatique n'était plus valable. Cependant le phénomène de réabsorption reste faible pour des flammes de cette dimension.

Ce dernier point est important pour la modélisation des phénomènes radiatifs aux petites échelles, telles que celles rencontrées en Simulation Numérique Directe (DNS). Ainsi pour le calcul radiatif en DNS, il est quasiment inutile de prendre en compte le phénomène de réabsorption et un modèle tel que le modèle OTL est suffisant pour étudier le problème rayonnement/turbulence. En effet ce modèle permet d'estimer $L_{b,\nu}$ et κ_ν en prenant en compte les fortes variations de température et de concentration qui existent à toutes les échelles de la turbulence, ces deux grandeurs radiatives étant uniquement fonction des propriétés thermodynamiques et chimiques à l'intérieur d'un élément de volume.

Cependant nous avons vu que, même si elle reste faible, l'erreur commise sur les températures calculées avec l'approximation du milieu mince conduit à des erreurs significatives sur les concentrations de NO_x . Lorsqu'il s'agit de calculer ces concentrations il devient nécessaire, même pour les flammes laminaires isolées de petites dimensions obtenues aux faibles taux d'étirement, de prendre en compte le phénomène de réabsorption.

Ces premiers résultats nous ont donné une première information sur la façon dont pourra être abordée la modélisation de la combustion instationnaire dans des géométries réelles en prenant en compte les phénomènes radiatifs. Nous avons montré en particulier l'importance du couplage direct instationnaire. Cependant, ce couplage entre le code radiatif DOMASIUM et le code de combustion AVBP n'est pas envisageable en l'état actuel. Au niveau du calcul radiatif, le pro-

blème du coût en temps de calcul se pose encore. Un gain certain devrait être obtenu en travaillant sur l'aspect spectral du problème. Pour traiter le rayonnement des gaz de combustion, nous avons utilisé un modale approché réalisant un bon compromis entre temps de calcul et précision (modèle SNB-ck). Ce modèle peut être encore accéléré sans sacrifier à la précision du résultat, comme le montrent de nombreux travaux dans la littérature. L'impact de l'utilisation de modèles spectraux plus grossiers doit également être précisé. A titre d'exemple, nous estimons que l'utilisation d'un modèle WSGG (Weighted-Sum-of-Gray-Gas) permettrait de réduire le temps de calcul d'un facteur 500, ce qui le rapproche du temps de calcul d'une solution instantanée de la combustion.

Suite à la thèse de Patrice Perez (EMAC, 2003), des travaux portant sur la modélisation des transferts radiatifs par la méthode Monte Carlo dans des géométries complexes sont actuellement en cours dans le laboratoire. Ces travaux sont complémentaires à l'approche DOM et permettront de valider les diverses approximations faites par cette méthode (quadratures angulaires et schémas de discrétisation spatiale) en fournissant des solutions de référence. L'automatisation d'une procédure de validation par Monte Carlo en calcul stationnaire sous la forme d'un contrôle final est intéressante et envisageable aujourd'hui.

Annexes

Annexe A

The condition of negative Intensity obtained with the Mean Flux Scheme

From Equation (27), we obtain L_P in the center of the grid at point P :

$$L_P = \frac{\alpha \kappa V L_{b,P} - \sum_j \underset{D_{ij} < 0}{D_{ij} A_j L_j}}{\alpha \kappa V + \sum_j \underset{D_{ij} > 0}{D_{ij} A_j}} \quad (\text{A.1})$$

While $L_j > 0$ and $D_{ij} < 0$, L_P will be always positive. As the sum at the numerator is performed with $D_{ij} < 0$, we consider that, while $L_j > 0$ at the incoming faces, $L_P > 0$ at the center of the grid. The intensity is always positive at the boundary conditions of the wall.

$$L_P = \alpha \overline{L_{out}} + (1 - \alpha) \overline{L_{in}} \quad (\text{A.2})$$

where :

$$\overline{L_{in}} = \frac{\sum_j \underset{D_{ij} < 0}{D_{ij} A_j L_j}}{\sum_j \underset{D_{ij} < 0}{D_{ij} A_j}} \quad (\text{A.3})$$

and

$$\overline{L_{out}} = \frac{\sum_j \underset{D_{ij} > 0}{D_{ij} A_j L_j}}{\sum_j \underset{D_{ij} > 0}{D_{ij} A_j}} \quad (\text{A.4})$$

if we substitute Equations (A.3) and (A.1) in Equation (A.2), we obtain :

$$\overline{L_{out}} = \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\alpha \kappa V L_{b,P} - \sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j}{\alpha \kappa V + \sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j} - (1 - \alpha) \frac{\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j}{\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j} \right] \quad (A.5)$$

If one admits that :

$$\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j = - \sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \quad (A.6)$$

Then, the use of Equation (A.6) in Equation (A.5) :

$$\begin{aligned} \overline{L_{out}} = D_1 & \left(\alpha \kappa V L_{b,P} \left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) - \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) \left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) \right. \\ & \left. + \alpha \kappa V (1 - \alpha) \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) + (1 - \alpha) \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) \left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) \right) \end{aligned} \quad (A.7)$$

where :

$$D_1 = \frac{1}{\alpha (\alpha \kappa V + \sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j) \sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j} \quad (A.8)$$

The common denominator D_1 is always positive. That implies that the sign of $\overline{L_{out}}$ depends on the numerator. Grouping terms in Equation (A.7) leads to $\overline{L_{out}}$:

$$\begin{aligned} \overline{L_{out}} = D_1 & \left(\alpha \kappa V L_{b,P} \left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) + \alpha \kappa V (1 - \alpha) \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) - \right. \\ & \left. \alpha \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) \left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) \right) \end{aligned} \quad (A.9)$$

That yields :

$$\begin{aligned} \overline{L_{out}} = D_1 & \left[\underbrace{\left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) \left(\alpha \kappa V L_{b,P} - \alpha \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) \right)}_{1^{st} term} + \right. \\ & \left. \underbrace{\alpha \kappa V (1 - \alpha) \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right)}_{2^{nd} term} \right] \end{aligned} \quad (A.10)$$

The first term will be always positive and the second term negative while the intensities keep positive at the incoming faces. If $\alpha = 1$ (Step scheme), the second term is zero and the averaged intensity at the outcoming faces will be always positive.

Otherwise, when $\alpha < 1$, the term $\overline{L_{out}}$ could become negative : As D_1 (Equation (A.8)) is always positive, the condition $\overline{L_{out}} < 0$ could be written as :

$$\left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) \left(\alpha \kappa V L_{b,P} - \alpha \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) \right) + \alpha \kappa V (1 - \alpha) \left(\sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \right) < 0 \quad (\text{A.11})$$

That is equivalent to :

$$L_{b,P} \left(\alpha \kappa V \sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) < \left(\alpha \left(\sum_{D_{ij} > 0} D_{ij} A_j \right) - \alpha \kappa V (1 - \alpha) \right) \sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j L_j \quad (\text{A.12})$$

If we substitute the Equation (A.6) and the Equation (A.3) in Equation (A.12), we get finally :

$$L_{b,P} < C_n \cdot \overline{L_{in}} \quad (\text{A.13})$$

with

$$C_n = (1 - \alpha) + \frac{1}{\kappa V} \sum_{D_{ij} < 0} D_{ij} A_j = (1 - \alpha) - \frac{A_\Delta}{\kappa V} \quad (\text{A.14})$$

where A_Δ represents the surface obtained by an orthogonal projection of the volume on the plan (Δ) in Figure 4.8 .

Annexe B

Finite Volume Approximation in optically thick limits

The aim of this appendix is to show the limit of the finite volume approximation in terms of false scattering. Even if we use an exact spatial differencing scheme (such as the exponential scheme), the numerical error induced is correlated to high optical thicknesses encountered in the medium. Then we consider the following simplified problem (Figure B.1) :

- as a downstream condition : a black wall with a surface set to $S = 1 \text{ m}^2$ emitting $L_{b,w}$;
- a medium of height $h = 1 \text{ m}$, volume V , emitting L_b , and that we can divide in two identical triangular cells of volume $V_{cell} = \frac{hS}{2}$, with centres quoted P_1 et P_2 ;
- as downstream condition : a black wall with a surface set to $S = 1 \text{ m}^2$ receiving the intensity L_f at the upper boundary.
- as discrete direction for radiation propagation : \vec{s} orthogonal to the two black walls.

Incident intensity $L_f(\vec{s})$ at the upper wall can be obtained analytically as follows :

$$L_{f,tot} = \int_S \left[L_{b,w} e^{-\kappa h} + \kappa \int_0^h L_b e^{-\kappa r} dr \right] dS \quad (\text{B.1})$$

Using the informations given on the configuration, in each point of the upper face, one can write :

$$L_f = L_{b,w} e^{-\kappa} + L_b (1 - e^{-\kappa}) \quad (\text{B.2})$$

and

$$L_{f,tot} = L_f S = L_f \quad (\text{B.3})$$

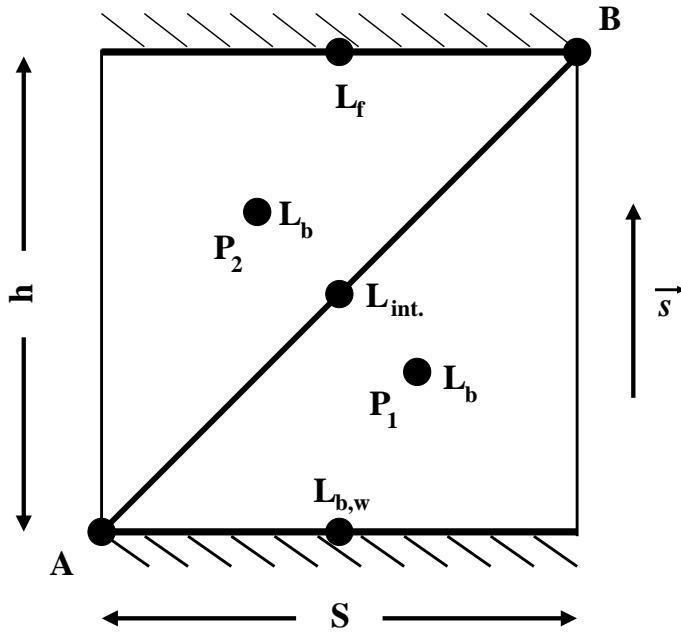


FIG. B.1 – Simplified configuration

On another way, L_f can be computed using the “exponential” scheme as spatial differencing scheme. Firstly, the intensity L_{int} , at the intermediate face between the two triangular cells is calculated, using the Equation (4.48) :

$$L_{int} = L_{b,w}\chi + L_b(1 - \chi) \quad (B.4)$$

where :

$$\chi = \frac{2}{\kappa} \left(1 - \frac{1 - e^{-\kappa}}{\kappa} \right) \quad (B.5)$$

From Equation (4.47), we can deduce the exact value for $L_{int,tot}$, the total intensity integrated on the face A_{int} and determined by :

$$L_{int,tot} = L_{int} A_{int} \quad (B.6)$$

Finally, as the two cells are geometrically similar, L_f is obtained by replacing L_w by L_{int} in Equation (B.4) :

$$L_f = L_{b,w}\chi^2 + L_b(1 - \chi^2) \quad (B.7)$$

As it was mentioned previously, $L_{f,tot}$ is an exact calculation. We consider that, by setting the intensity equal to L_{int} at each point on the intermediate face, we introduce an error for the next cell calculation at the incoming face because the intensity is not a constant along $[AB]$. That

Numerical method	Case 1	Case 2
Analytical	$f(\kappa) = e^{-\kappa}$	$f(\kappa) = 1 - e^{-\kappa}$
Exponential scheme	$f(\kappa) = \left[\frac{2}{\kappa} \left(1 - \frac{1-e^{-\kappa}}{\kappa} \right) \right]^2$	$f(\kappa) = 1 - \left[\frac{2}{\kappa} \left(1 - \frac{1-e^{-\kappa}}{\kappa} \right) \right]^2$
Diamond Mean flux scheme	$f(\kappa) = \frac{4(4-\kappa)}{(\kappa+4)^2}$	$f(\kappa) = \frac{\kappa(\kappa+12)}{(\kappa+4)^2}$
Step scheme	$f(\kappa) = \frac{4}{(\kappa+2)^2}$	$f(\kappa) = \frac{\kappa(\kappa+4)}{(\kappa+2)^2}$

TAB. B.1 – Expression for $L_f(\kappa)$ at the upper face

could be illustrated by the two points : on the point B the intensity is $L_f \neq L_{int}$, coming from Equation (B.2), and the intensity at the point A is $L_b, w \neq L_{int}$. Aiming at a third formulation, we can propose the use of Diamond Mean Flux Scheme (DMFS). By proceeding in the same way than in the previous case but taking as a basis the Equation (4.58), one obtains the two following expressions :

$$L_{int} = L_{b,w} \frac{4 - \kappa}{4 + \kappa} + L_b \frac{2\kappa}{4 + \kappa} \quad (\text{B.8})$$

and

$$L_f = L_{int} \frac{4}{4 + \kappa} + L_b \frac{\kappa}{4 + \kappa} \quad (\text{B.9})$$

Finally, we can apply the step scheme (Equation (4.51)), which leads to :

$$L_{int} = L_w \frac{2}{2 + \kappa} + L_b \frac{\kappa}{2 + \kappa} \quad (\text{B.10})$$

and

$$L_f = L_{int} \frac{2}{2 + \kappa} + L_b \frac{\kappa}{2 + \kappa} \quad (\text{B.11})$$

By considering the two following cases (as limit cases), we can model respectively the transmission phenomenon and the emission/self-absorption phenomenon :

- case 1 : $L_b = 0$ et $L_{b,w} = 1$;
- case 2 : $L_b = 1$ et $L_{b,w} = 0$.

For these both cases, the expressions of $L_f(\kappa)$, obtained using the analytical method and the three numerical methods mentioned above, are given in the Table B.1. The relative error for the intensity (at the boundary) L_f compared to the analytical solution is represented in (Figures B.3 and B.5). In the first case, the more the optical thickness increases, the more the numerical solutions

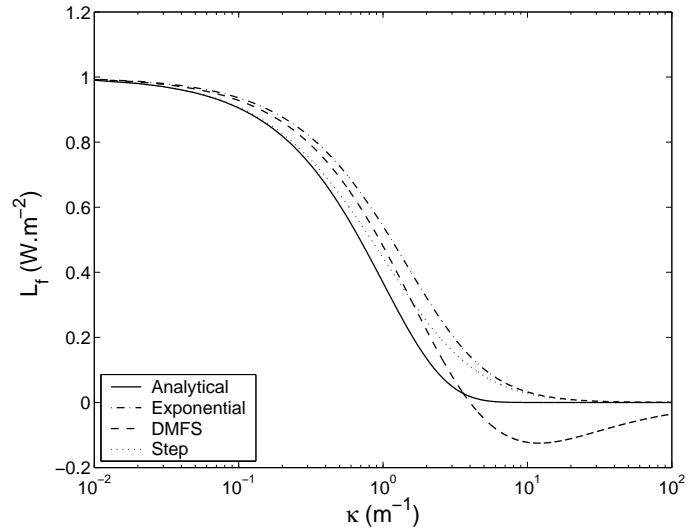


FIG. B.2 – 1st case : Comparison between the four expressions of $L_f(k)$

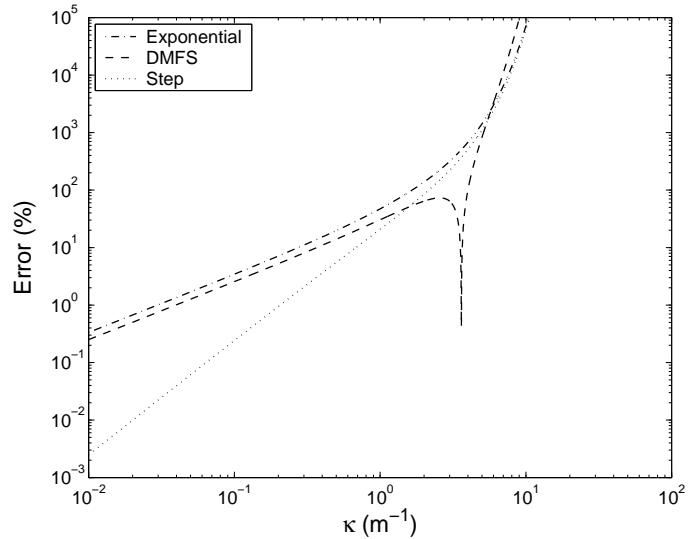


FIG. B.3 – 1st case : Relative error for the three differencing schemes

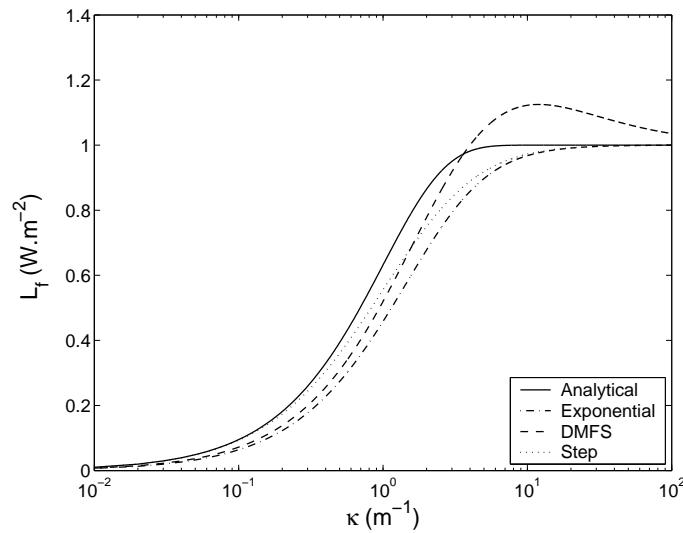


FIG. B.4 – 2nd case : Comparison between the four expressions of $L_f(k)$

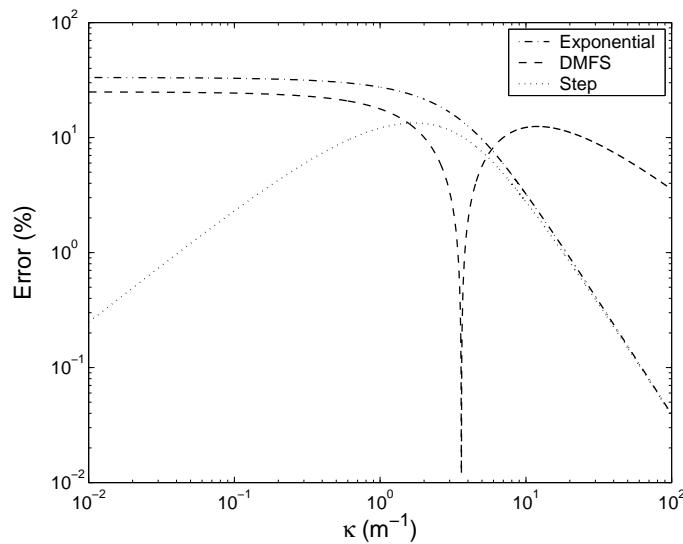


FIG. B.5 – 2nd case : Relative error for the three differencing schemes

calculated with the three schemes are far from the analytical solution. The error obtained using the exponential scheme is only due to the approximation made when we consider the intensity L_{int} constant over all the intermediate face. According to the shape of the solutions represented for the three different spatial differencing schemes used, it appears this approximation introduces some false scattering in the same proportion when the optical thickness increases. This approximation has a real impact on the modelling of transmission phenomenon. At the contrary, considering the emission/self-absorption phenomenon (case 2), the finite volume approximation is justified when the medium becomes thicker and the error on L_f decreases (Figure B.4 and B.5). A third test case which is more realistic for combustion problem is studied. The temperature of the medium is 1200 K and of the wall is 300 K. The obtained solutions for $L_f(k)$ are illustrated in Fig.B.6. We notice the same trends than in the second test case (cold wall and hot medium). The relative error has the same behavior than in the first test case for small optical thicknesses (the transmission phenomenon leads) and than for the second test case for high optical thicknesses (the emission/self-absorption phenomenon becomes dominant).

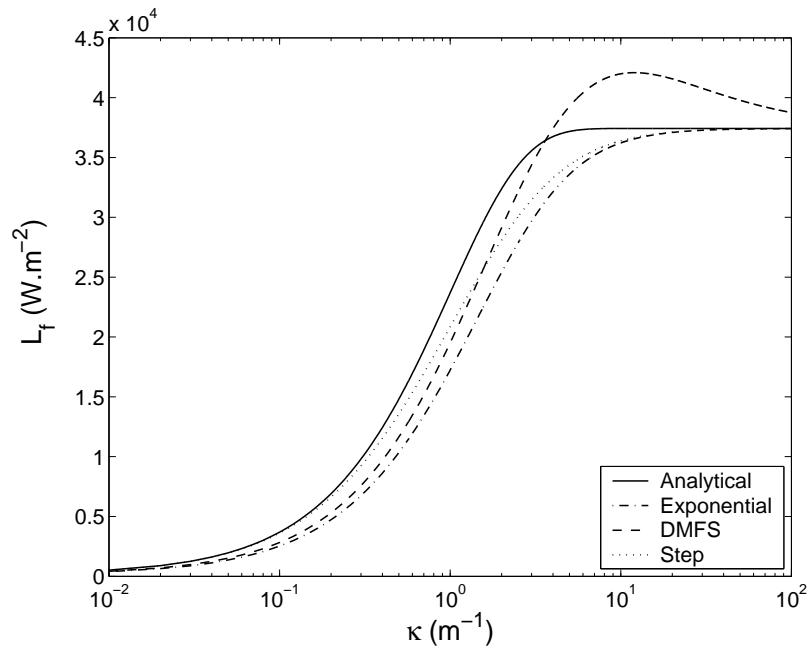


FIG. B.6 – 3rd case : Comparison between the four expressions of $L_f(k)$

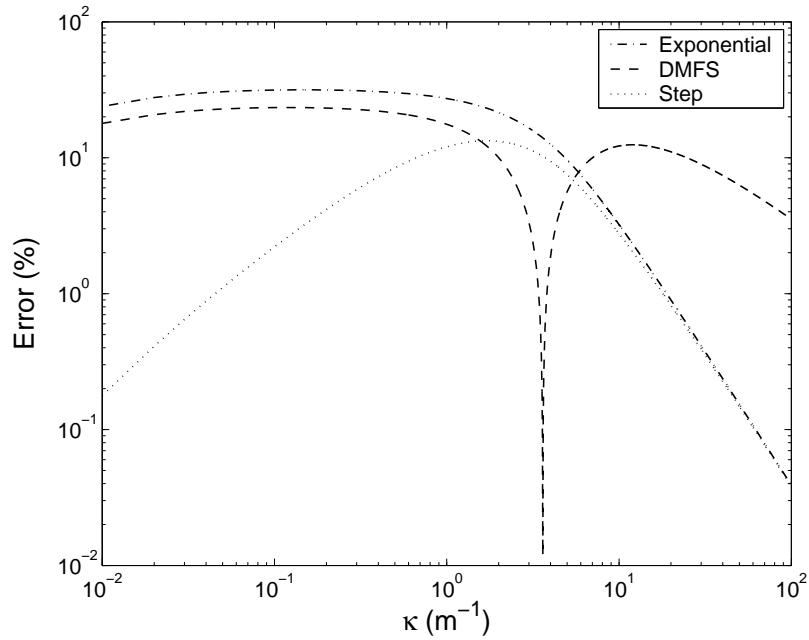


FIG. B.7 – 3rd case : Relative error for the three differencing schemes

Annexe C

Influence de la diffusion numérique sur le « ray effect »

L'objet de cette annexe est de mettre en évidence l'impact de la diffusion numérique (due aux hypothèses induites par l'approche en volumes finis, cf. ANNEXE B) sur le « ray effect ». Nous avons cherché, à travers une configuration simple, à éliminer l'influence de l'utilisation d'un maillage pour résoudre l'ETR. Pour bien observer le phénomène de « ray effect », nous avons donc considéré un milieu transparent ($\kappa = 0$) contenu dans une enceinte cylindrique de hauteur $h = 2.0$ m et de rayon $R = 1.0$ m. Les parois du cylindre sont noires. La paroi latérale et la paroi supérieure sont froides (à $T = 0$ K) tandis que la paroi inférieure est chaude ($T = T_w$). Il en résulte que le flux radiatif Q_w obtenu en un point $P(\vec{r}_w)$ de la paroi latérale provient uniquement de la paroi inférieure et que le flux adimensionné Q_w^* , par rapport à la luminance noire émise à la paroi chaude, vaut simplement :

$$Q_w^* = H_w / L_b(T_w) = \Omega \quad (C.1)$$

où Ω est l'angle solide à travers lequel on voit la paroi chaude depuis un point $P(\vec{r}_w)$. Pour calculer la luminance incidente H_w à la paroi, nous avons utilisée la méthode aux ordonnées discrètes avec le schéma Step pour résoudre la dérivation spatiale, ceci pour différents types et degrés de quadrature. Nous avons aussi effectué un calcul direct de cette luminance par une méthode que nous avons apparenté à une méthode de « Ray Tracing » utilisant un très faible nombre de rayons. Cette méthode consiste à utiliser les rayons orientés selon les vecteurs \vec{s}_i définis par une quadrature angulaire utilisée en DOM et à tester pour chacun de ces rayons si on touche la paroi chaude. Le cas échéant, nous considérons que la luminance incidente associée à \vec{s}_i est $H_{w,i} = \omega_i L_b(T_w)$. La luminance totale H_w est obtenue directement en faisant une somme sur toutes les directions. Nous avons ainsi pu observer les discontinuités dues à la quadrature de l'espace des angles solides,

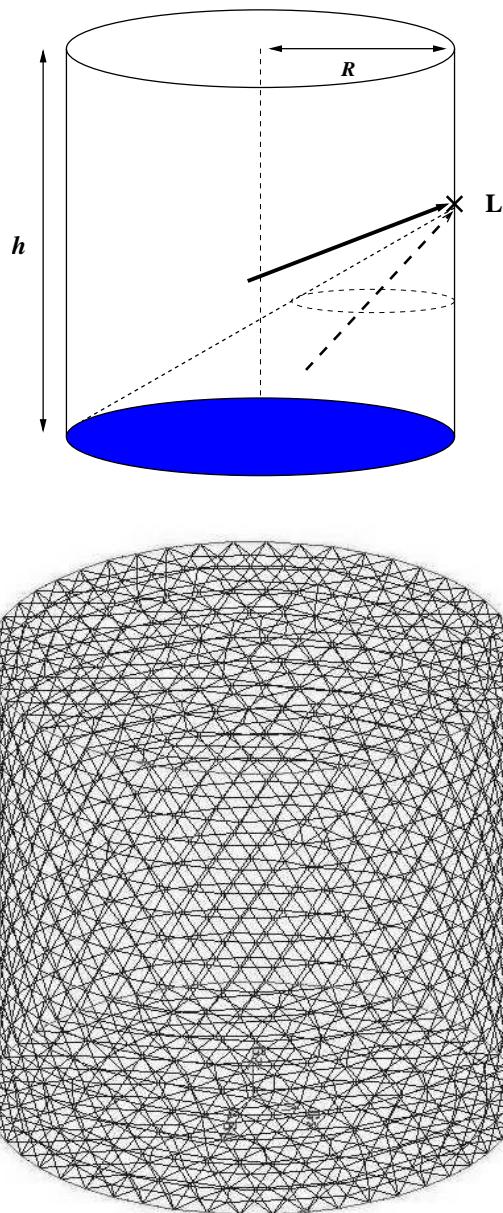


FIG. C.1 – Configuration étudiée et maillage

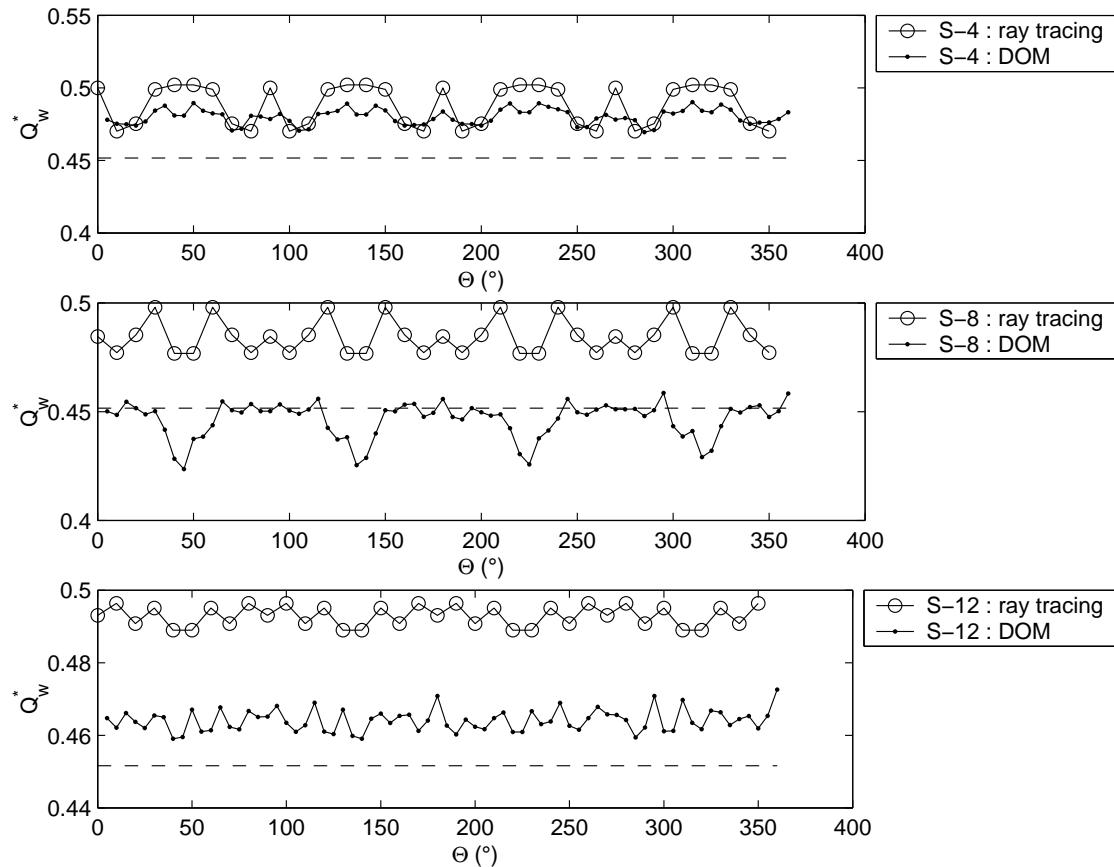


FIG. C.2 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.05h$ pour les quadratures de type S_N

sur 4π , en un nombre restreint d’angle solide où la luminance est considérée comme constante. Nous avons observé le flux adimensionné Q_w^* sur la circonférence de la paroi latérale (cf. figures Fig.C.2-Fig.C.10, à trois hauteurs différentes ($z = 0.05h$, $z = 0.5h$ et $z = 0.95h$) et pour chacune de ses hauteurs nous avons fait varier le nombre de directions discrètes pour les quadratures angulaires de S_N , T_N et « polaire/azimutale » (notée FVM $N_\theta X N_\phi$). L’observation du flux incident sur la périphérie permet de mettre en évidence l’effet de rayon. Nous avons représenté, en tiret sur chacune des courbes de résultats, la solution exacte qui a été obtenue analytiquement et qui est constante sur la circonférence pour une hauteur z fixée.

Les résultats obtenus par notre méthode de type « tracé de rayon » (notée « ray tracing ») montrent bien l’inefficacité intrinsèque des quadratures à faibles nombres de directions, à décrire des dépendances angulaires d’un problème tel que celui-ci (variation de l’orientation de la normale à la paroi induise une variation du produit scalaire $\vec{n} \cdot \vec{s}_i$). De manière générale, l’augmentation du nombre de direction a pour conséquence de réduire l’écart par rapport à la solution exacte. De la

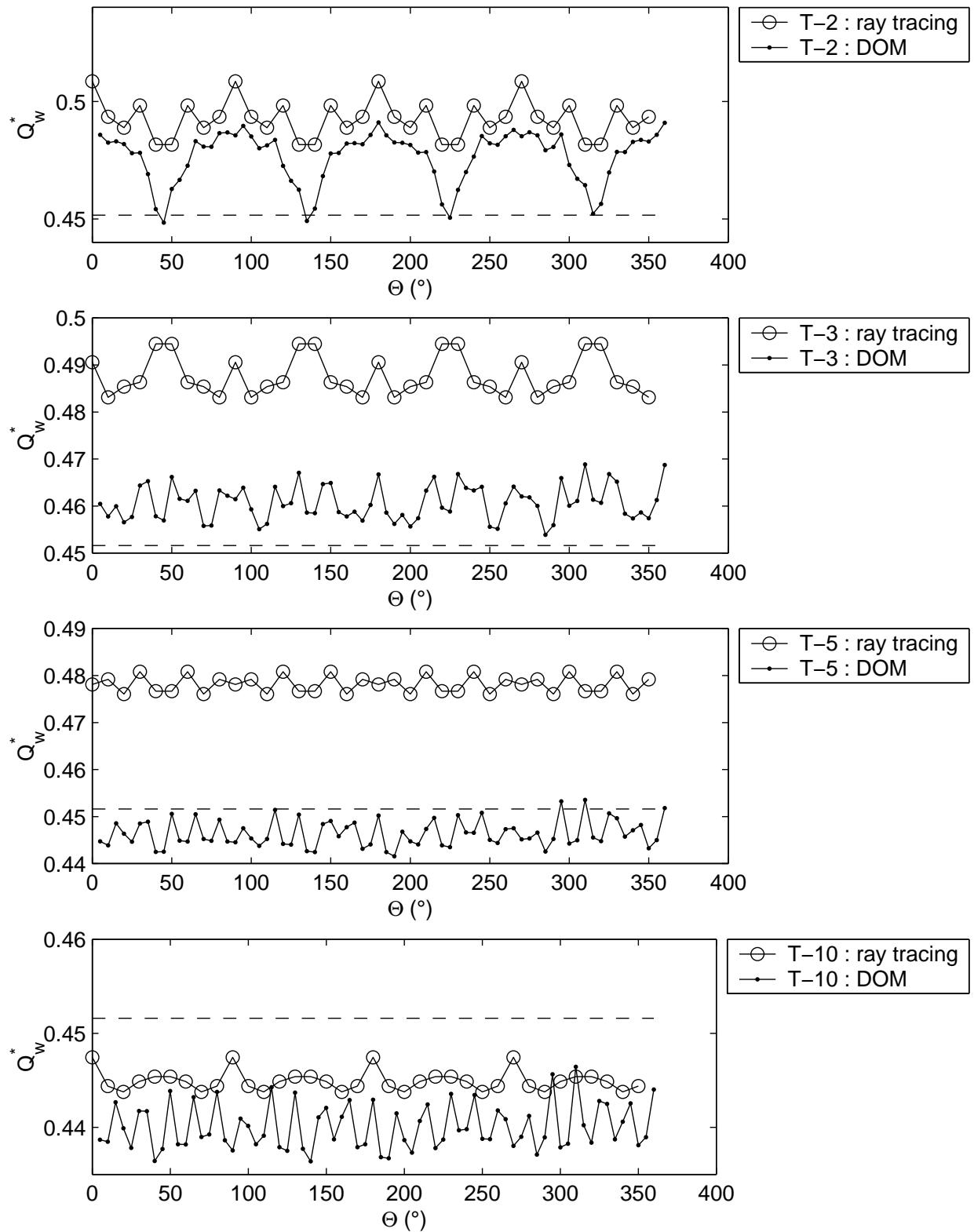


FIG. C.3 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.05h$ pour les quadratures de type T_N

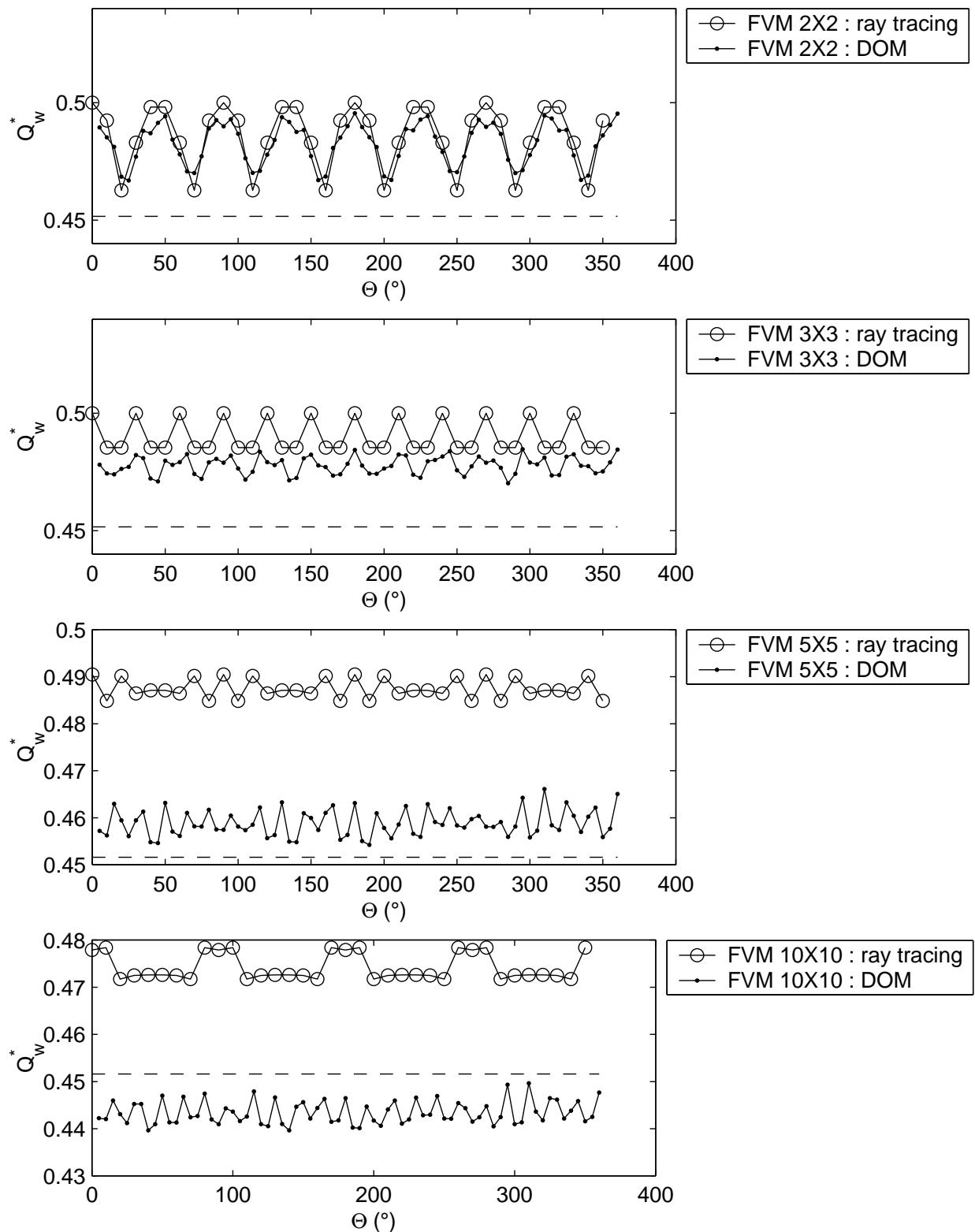


FIG. C.4 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.05h$ pour les quadratures de type « polaire/azimutale »

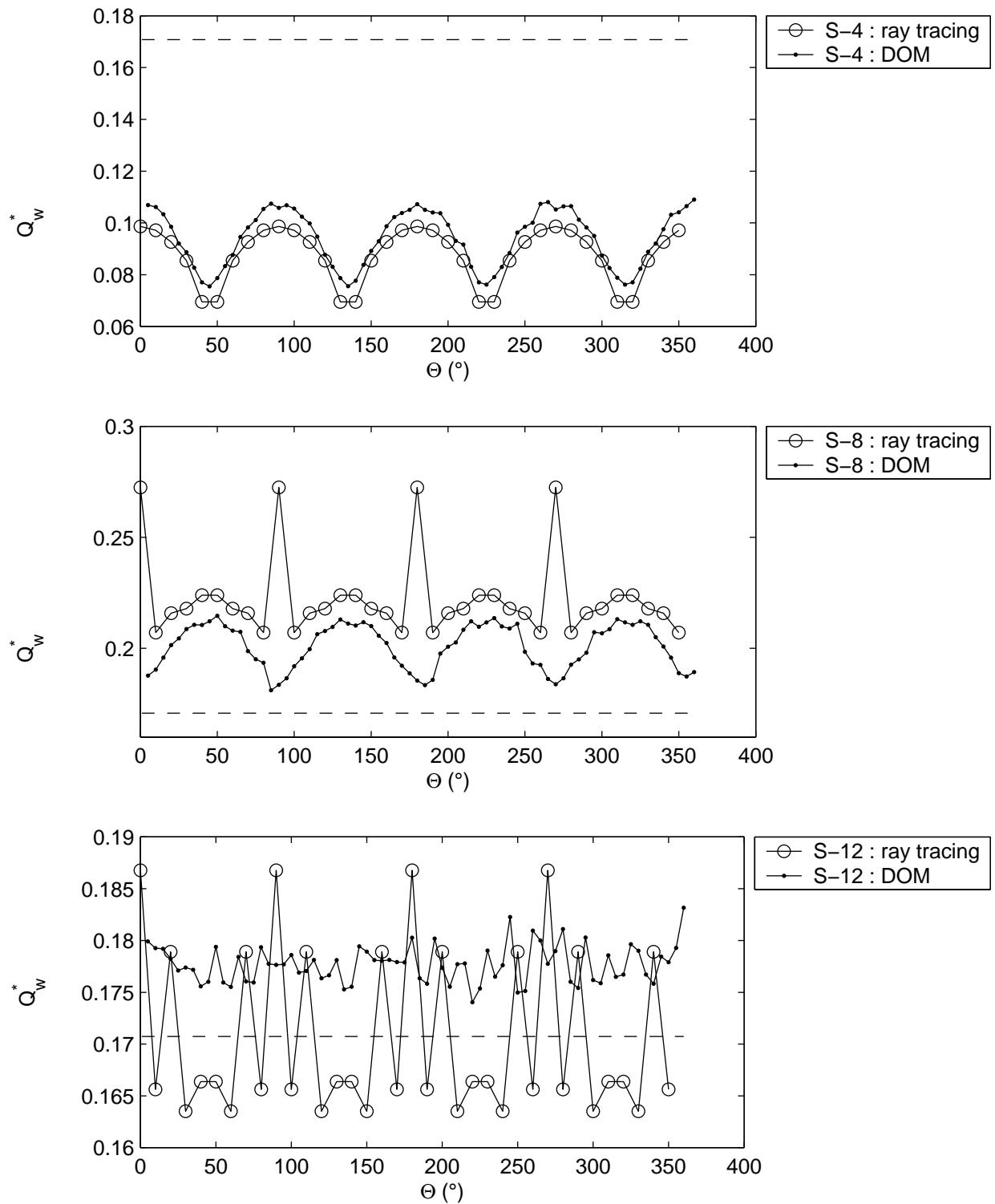


FIG. C.5 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.5h$ pour les quadratures de type S_N

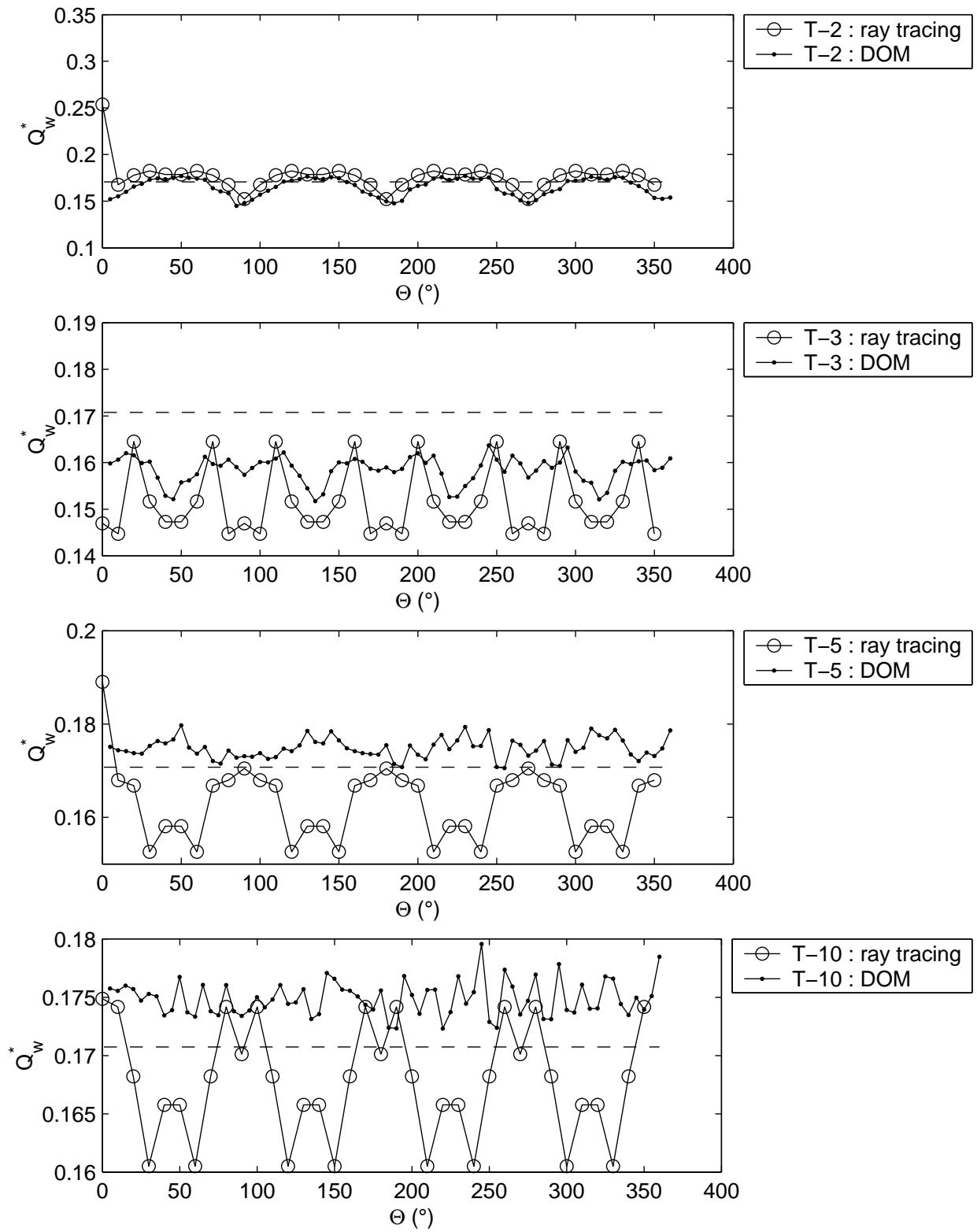


FIG. C.6 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.5h$ pour les quadratures de type T_N

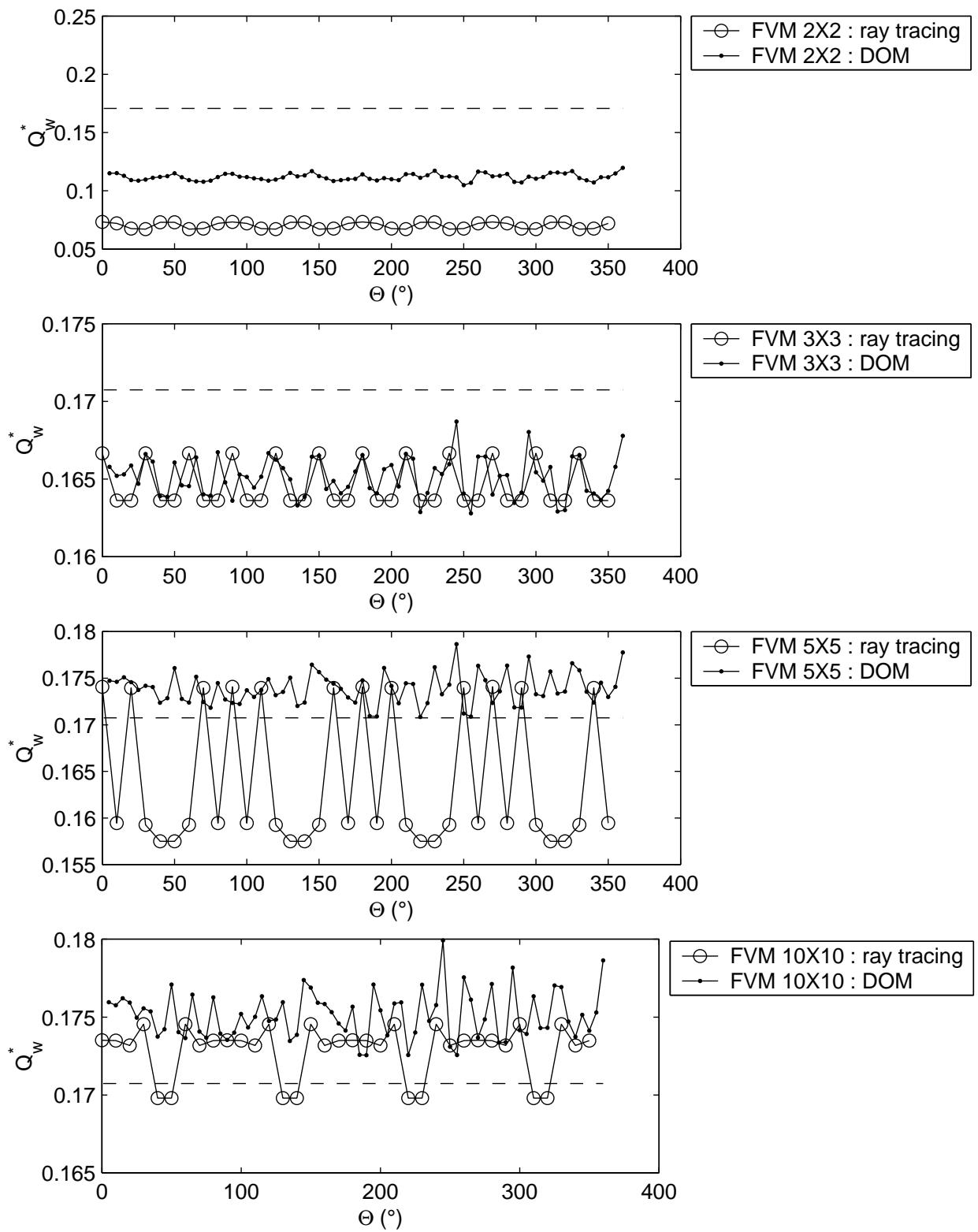


FIG. C.7 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.5h$ pour les quadratures de type « polaire/azimutale »

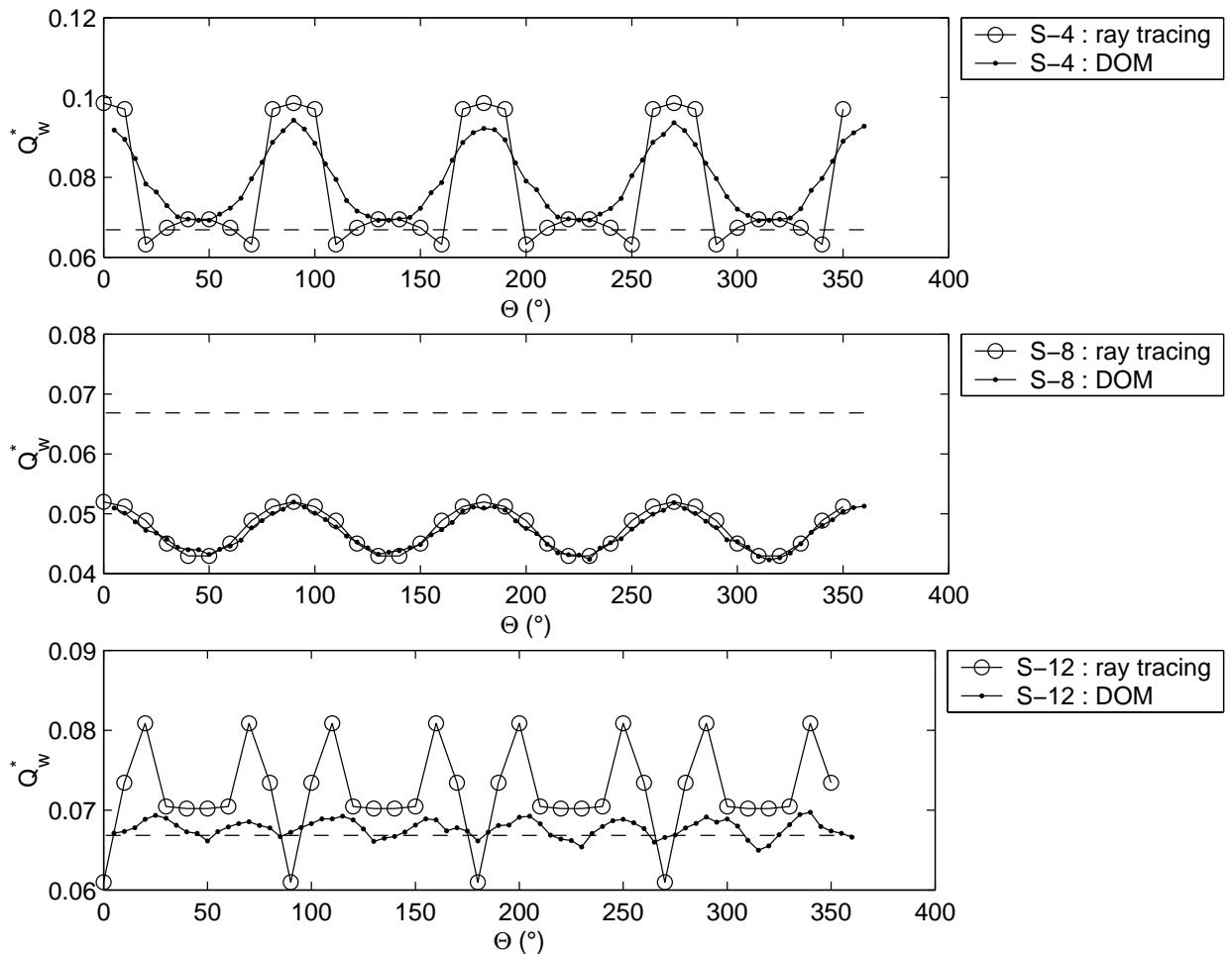


FIG. C.8 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.95h$ pour les quadratures de type S_N

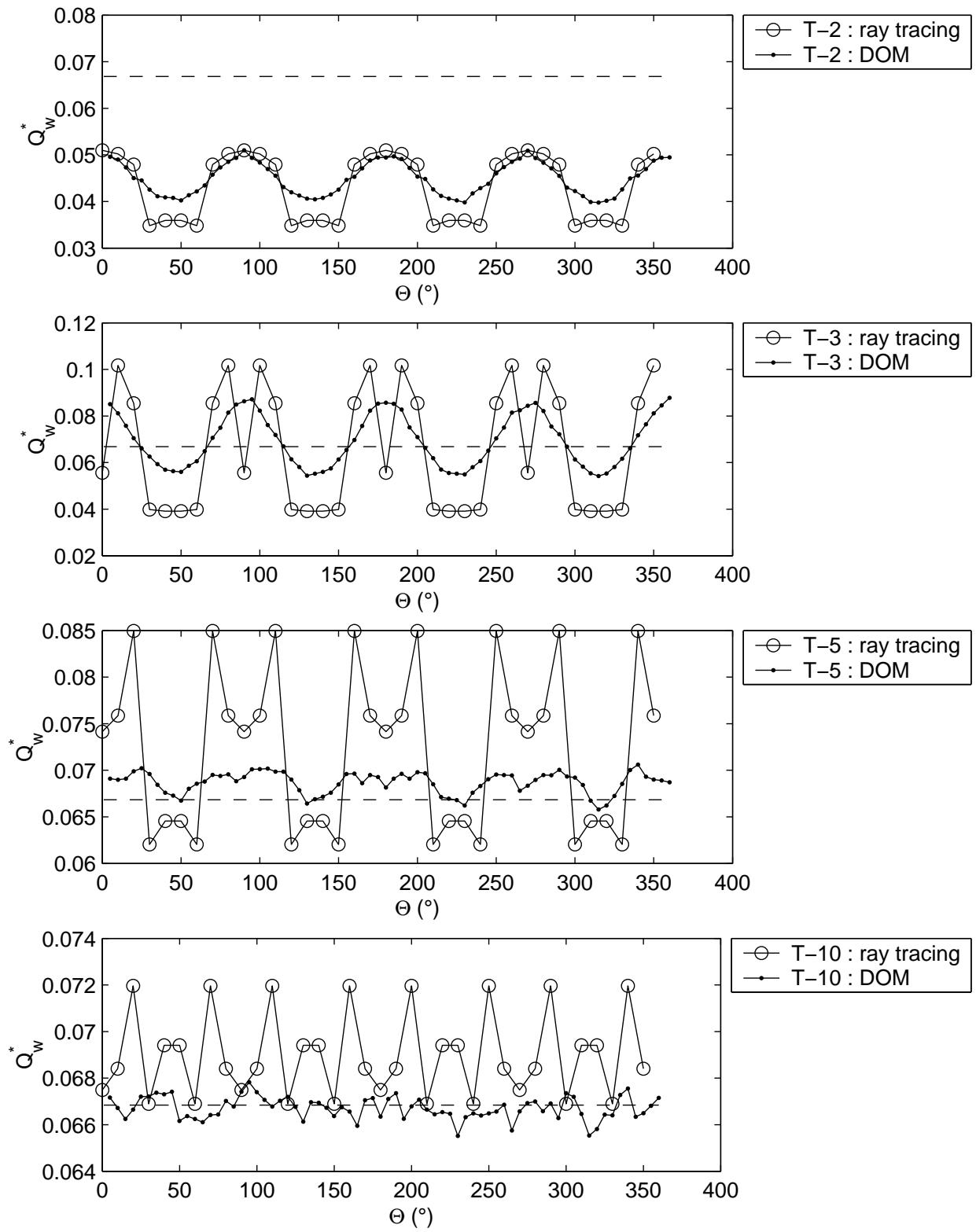


FIG. C.9 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.95h$ pour les quadratures de type T_N

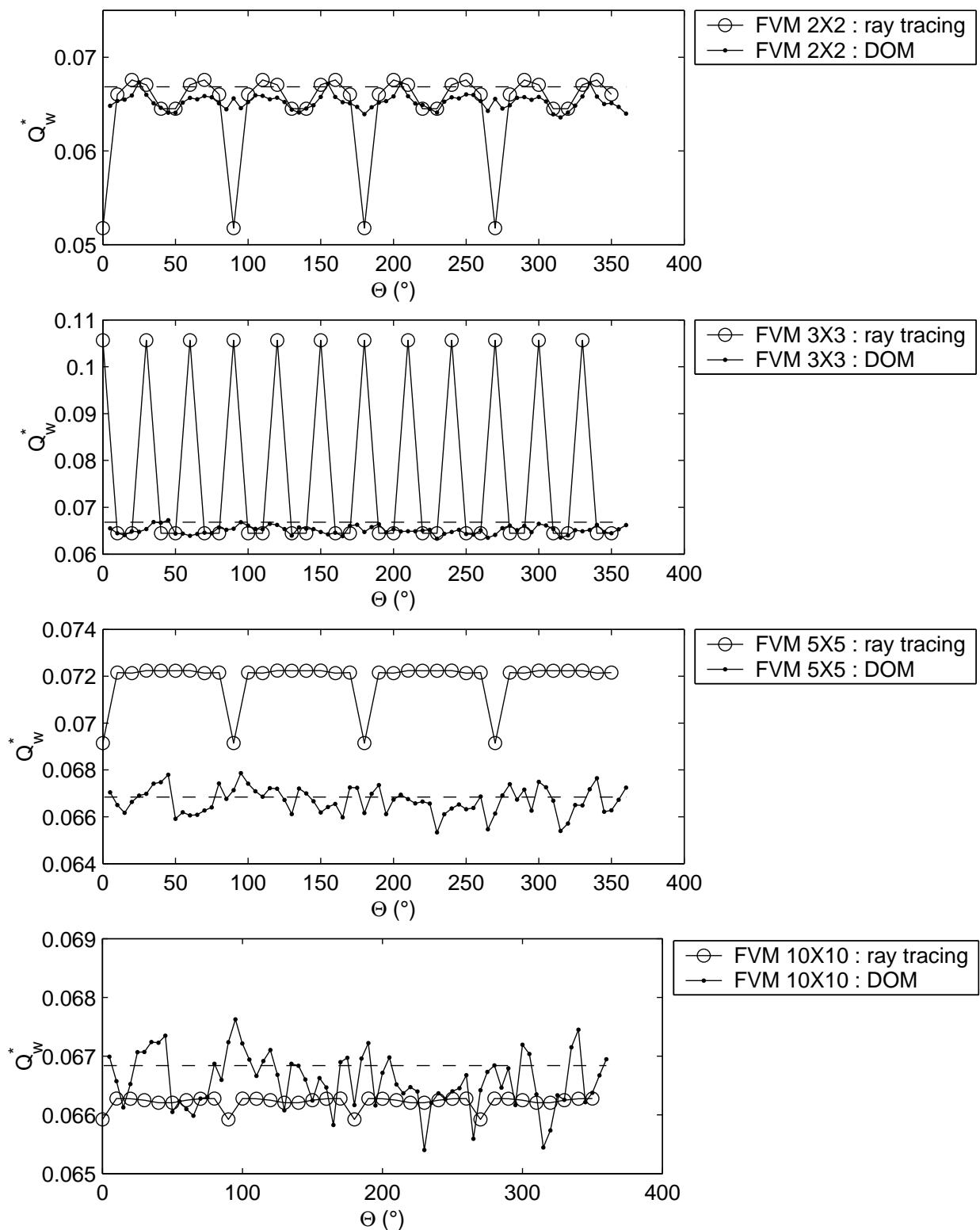


FIG. C.10 – Flux adimensionné à la paroi sur le périmètre en $z = 0.95h$ pour les quadratures de type « polaire/azimutale »

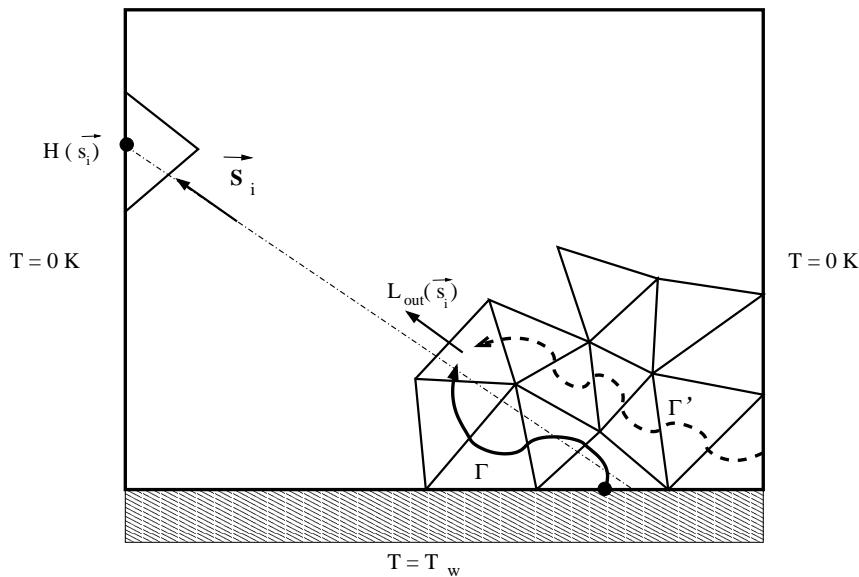


FIG. C.11 – Propagation de l’information via le maillage

même façon, plus le point d'estimation du flux adimensionné est proche de la paroi, plus l'angle solide à représenter est grand et donc plus les résultats sont en accords avec la solution référence. Nous pouvons observer un effet de lissage des discontinuités angulaires et une variation de la valeur moyenne du flux incident, sur la circonference de la paroi, dûs à l'utilisation d'un maillage (résultats obtenus par DOM). Ceci peut-être expliqué à travers la figure Fig.C.11. Nous y représentons la résolution de la luminance incidente pour une direction \vec{s}_i par nos deux différentes méthodologies. Dans une telle situation la luminance sortante L_{out} pour une des cellules véhiculant l'information de la paroi chaude à la paroi froide, au point considéré, est obtenue à partir des luminances aux faces d'entrées. Le chemin Γ véhicule la bonne information liée à l'angle solide défini autour de \vec{s}_i . Cependant le chemin Γ' introduit une influence de la paroi froide qui aura pour conséquence de réduire l'amplitude de L_{out} calculée. La diffusion numérique aurait donc tendance à réduire les fortes discontinuités dues à l'effet de rayon. Il est à noté qu'elle ne conduit pas pour autant à une solution plus exacte de façon systématique.

Bibliographie

- [1] J. Abraham and V. Magi. Application of the Discrete Ordinates Method to compute radiant heat loss in a diesel engine. *Numerical heat transfer, Part A*, 31(6) :597–610, 1997.
- [2] F. Behrendt and J. Warnatz. Simulation of partially premixed Methane-Air counterfbw-diffusion flames and comparison with experimental results. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 131, 1991. ISBN 0-930403-95-9.
- [3] A. Beltrame, P. Porshnev, W. Merchan-Merchan, A. Saveliev, A. Fridman, L.A. Kennedy, O. Petrova, S. Zhdanok, F. Amouri, and O. Charon. Soot and NO formation in Methane-Oxygen enriched diffusion flames. *Combustion and flame*, 124 :295–310, 2001.
- [4] E.S. Bish and W.J.A. Dahm. Strained dissipation and reaction layer analysis of non-equilibrium chemistry in turbulent reacting fbws. *Combustion and Flame*, 100(3) :457–464, 1995.
- [5] L.G. Blevins and J.P. Gore. Computed structure of low strain rate partially premixed CH_4/Air counterfbw flames : Implications for NO Formation. *Combustion and Flame*, 116 :546–566, 1998.
- [6] U. Bonne. Radiative extinguishment of diffusion flames at zero gravity. *Combustion and Flame*, 16 :147–159, 1971.
- [7] S.P. Burke and T.E.W Schumann. Diffusion flames. *Industrial Engineering Chemistry*, 10 :998, 1928.
- [8] D.Y. Byun, S.W. Baek, and M.Y. Kim. Thermal radiation in a discretely heated irregular geometry using the Monte Carlo, Finite Volume, and Modifi ed Discrete Ordinates Interpolation Method. *Numerical Heat Transfer Part A*, 37 :1–18, 2000.
- [9] B.G. Carlson. Tables of equal weight quadrature eqn over the unit sphere. *Los Alamos Scientific Laboratory Report*, LA-4734, 1971.

- [10] B.G. Carlson and K.D. Lathrop. *Transport theory - The Method of Discrete Ordinates*. in : Computing in reactor physics, Ed. Gordon and Breach, 1968.
- [11] M.G. Carvalho and T.L. Farias. Modelling of heat transfer in radiating and combusting systems. *Trans IChemE*, 76, Part A :175–184, 1998.
- [12] C. Celik, A. Arisoy, and O.F Genceli. Modelling of turbulent reacting flows with gaseous fuels in a combustion chamber. *Fuel*, 75(4) :431–436, 1996.
- [13] H. Cha and T.H. Song. Discrete Ordinates Interpolation Method applied to irregular Three-Dimensional geometries. *ASME Journal of Heat Transfer*, 122 :823–827, 2000.
- [14] J.C. Chai, H.S. Lee, and S.V. Patankar. Ray effect and false scattering in the Discrete Ordinates Method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 24 :373–389, 1993.
- [15] J.C. Chai, G. Parthasarathy, H.S. Lee, and S.V. Patankar. Finite volume radiative heat transfer procedure for irregular geometries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(3) :410–415, 1995.
- [16] J.C. Chai, S.V. Patankar, and H.S. Lee. Evaluation of spatial differencing practices for the Discrete-Ordinates Method. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 8(1) :140–144, 1994.
- [17] S.H. Chan, X.C. Pan, and M.M.M. Abou-Ellail. Flamelet structure of radiating CH_4/Air Flames. *Combustion and Flame*, 102 :438–446, 1995.
- [18] S.H. Chan, J.Q. Yin, and B.J. Shi. Structure and extinction of Methane/Air flamelet with radiation and detailed kinetic mechanism. *Combustion and Flame*, 112 :445–456, 1998.
- [19] S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Clarendon Press, 1950.
- [20] B.H. Chao and C.K. Law. Asymptotic theory of flame extinction with surface radiation. *Combustion and Flame*, 92 :1–24, 1993.
- [21] M. Cherkaoui, J-L. Dufresne, R. Fournier, J-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Monte Carlo Simulation of Radiation in gases with a Narrow-Band Model and a Net-Exchange Formulation. *Journal of Heat Transfer*, 118 :401–407, 1996.
- [22] M. Cherkaoui, J-L. Dufresne, R. Fournier, J-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Radiative net exchange formulation within one dimensional gas enclosures with reflective surfaces. *Journal of Heat Transfer*, 120 :275–278, 1998.

- [23] P. J. Coelho, J. M. Goncalves, M. G. Carvalho, and D. N. Trivic. Modelling of radiative heat transfer in enclosures width obstacles. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 41(4-5) :745–756, 1998.
- [24] P.J. Coelho. The role of ray effects and false scattering on the accuracy of the standard and modified discrete ordinates methods. *ICHT Process (Anthalia)*, 2001.
- [25] P.J. Coelho. The role of ray effects and false scattering on the accuracy of the standard and modified discrete ordinates methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73 :231–238, 2001.
- [26] P.J. Coelho and M.G. Carvalho. Evaluation of a 3D model for the prediction of heat transfer in power station boilers. *International journal of energy research*, 19 :579–592, 1995.
- [27] P.J. Coelho and M.G. Carvalho. Evaluation of a three-dimensional mathematical model of a power station boiler. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118 :887–895, 1996.
- [28] P.J. Coelho, P. Perez, and M. El Hafi . Benchmark numerical solutions for radiative heat transfer in two-dimensional nongray sooting media. *Numerical Heat Transfer Part B*, 43 :425–444, 2003.
- [29] G. Cohen-Tannoudji. Mécanique quantique. *Hermann*, 1992.
- [30] B. Cuenot. *Etude Asymptotique et numérique de la structure des flammes de diffusion laminaires et turbulentes*. PhD thesis, C.E.R.F.A.C.S, 1995.
- [31] B. Cuenot and T. Poinsot. Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable lewis number and finite rate chemistry. *Combustion and Flames*, 104 :111–137, 1996.
- [32] T. Dagusé. *Effets du rayonnement thermique sur la structure de flammes laminaires de diffusion ou de prémelange en phase gazeuse*. PhD thesis, Ecole Centrale, Paris, 1996.
- [33] T. Dagusé, T. Croonenbroek, J.C. Rolon, N. Darabiha, and A. Soufiani. Study of radiative effects on laminar counterflow h₂/o₂/n₂ diffusion flames. *Combustion and Flame*, 106 :271–287, 1996.
- [34] T. Dagusé, A. Soufiani, N. Darabiha, and J.C. Rolon. Structure of diffusion and premixed laminar counterflow flames including molecular radiative transfer. *Fizika Goreniya i Vzryva*, 29 :55–60, 1993.

- [35] N. Darabiha. Transient behaviour of laminar counterfbw Hydrogen/Air diffusion flames with complex chemistry. *Combustion Science and Technology*, 86 :163–181, 1992.
- [36] N. Darabiha and S. Candel. The influence of the temperature on the extinction and ignition limits of strained Hydrogen/Air diffusion flames, journal = Combustion Science and Technology. 86 :67–85, 1992.
- [37] N. Darabiha, S.M. Candel, V. Giovangigli, and M.D. Smooke. Extinction of strained pre-mixed Propane/Air flame with complex chemistry. *Combustion Science and Technology*, 60 :267–285, 1988.
- [38] A. De Lataillade. *Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans les systèmes de combustion*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2001.
- [39] A. de Lataillade, S. Blanco, Y. Clergent, J.L. Dufresne, M. El Hafi , and R. Fournier. Monte Carlo method and sensitivity estimations. *accepted for publication in Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002.
- [40] A. de Lataillade, J.L. Dufresne, M. El Hafi , V. Eymet, and R. Fournier. A Net Exchange Monte Carlo approach to radiation in optically thick systems. *accepted for publication in Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002.
- [41] M.K. Denison. A Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary RTE Solvers. *Transactions of the ASME*, 115 :1004–1012, 1993.
- [42] M.K. Denison and B. Webb. The spectral line-based Weighted-Sum-of-Gray-Gases model in nonisothermal nonhomogeneous media. *Journal of Heat Tranfer*, 117 :359–365, 1995.
- [43] G. Dixon-Lewis, T. David, P.H. Gaskell, S. Fukutani, H. Jinno, J.A. Miller, R.J. Kee, M.D. Smooke, N. Peters, E. Effelsberg, J. Warnatz, and F. Behrendt. Calculation of the structure and extinction limit of a methane/air counterfbw diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder. In *20th Symposium (International) on Combustion*, pages 1893–1904, 1984.
- [44] G. Dixon-Lewis and S.M. Islam. Structure and extinction of counterfbw diffusion Flames of Hydrogen-Nitrogen mixtures in Air. *22th International Symposium on Combustion*, pages 1461–1470, 1988.

- [45] G.A. Domoto. Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : the inverse transmission function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 14 :935–942, 1974.
- [46] J-L. Dufresne, R. Fournier, and J-Y. Grandpeix. Méthode de Monte Carlo par échanges pour le calcul des bilans radiatifs au sein d'une cavité 2D remplie de gaz. *Compte-Rendu Académie des Sciences*, 326 :33–38, 1998.
- [47] J-L. Dufresne, R. Fournier, and J-Y. Grandpeix. Inverse Gaussian K-distributions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61 :433–441, 1999.
- [48] V. Eymet. *Simulation Monte Carlo et analyse en Puissances Nettes Echangées des transferts radiatifs Infrarouges avec diffusion : vers une paramétrisation dans un modèle de circulation générale atmosphérique*. PhD thesis, Université Paul Sabatier, 2003.
- [49] J.T. Farmer and J.R. Howell. Monte Carlo solution of radiative heat transfer in a 3D enclosure with an anisotropically scattering, spectrally dependent, inhomogenous medium. *Developments in Radiative heat transfer, ASME*, 203 :301–309, 1992.
- [50] J.T. Farmer and J.R. Howell. Hybrid Monte Carlo/Diffusion method for enhanced solution of radiative transfer in optically thick non-gray media. *Radiative Transfer : Current Research, Y. Bayazitoglu et al., eds. ASME, New York*, 276 :203–212, 1994.
- [51] J.T. Farmer and J.R. Howell. Monte Carlo Algorithms for predicting Radiative Heat transport in Optically Thick Participating Media. In *Proc. 10th International Heat Transfer Conference*, volume 2, pages 37–42, Brighton, 1994.
- [52] W.A. Fiveland. Discrete Ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal of Heat Transfer*, 106 :699–706, 1984.
- [53] W.A. Fiveland. DOM for radiative heat transfer in isotropically and anisotropically scattering media. *Journal of Heat Transfer*, 109 :809–812, 1987.
- [54] W.A. Fiveland. Three-Dimensional radiative heat transfer solutions by the Discrete Ordinates Method. *Journal of Thermophysics*, 2(4) :309–316, 1988.
- [55] W.A. Fiveland and A.S. Jamaluddin. Three-Dimensional spectral radiative heat transfer solutions by the Discrete Ordinates Method. *J.Thermophysics*, 5(3) :335–339, 1991.
- [56] W.A. Fiveland and J.P. Jessee. Comparison of Discrete Ordinates Method formulations for radiative heat transfer in multidimensional geometries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(1) :47–54, 1995.

- [57] C. Garcia, M.A. Tanoff, M.D. Smooke, and R.J. Hall. Application of non-optically thin radiation model to the study of low-strain laminar counterfbw flames. *Chemical and physical processes in combustion eastern states section, combustion institute 1996 DEC Hilton head*, pages 305–308, 1996.
- [58] J. Gonzalvez and P.J. Coelho. Parallelization of the dom. *Numerical Heat Transfer, Part B*, pages 151–173, 1997.
- [59] R. Goody, R. West, L. Chen, and D. Crisp. The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 42(6) :539–550, 1989.
- [60] Y. Goody. *Atmospheric Radiation theoretical basis*. 1989.
- [61] V. Goutière, A. Charette, and L. Kiss. Comparative performance of non-gray gas modeling techniques. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 41 :361–381, 2002.
- [62] V. Goutière, L. Fenshang, and A. Charette. An assessment of real-gas modelling in 2D enclosures. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64 :299–326, 2000.
- [63] J.S.A. Green. Division of radiative streams into internal transfer and cooling to space. *Quaterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 93 :371–372, 1967.
- [64] R.J. Hall, M.D. Smooke, and M.B. Colket. Predictions of soot dynamics in opposed jet diffusion flames. In *Physical and chemical aspects of combustion*, pages 189–230. Glasmann et al edition, 1997.
- [65] R.J. Hall and A. Vranos. Efficient calculations of gas radiation from turbulent flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 37(17) :2745–2750, 1994.
- [66] Chellian H.K., Law C.K., Ueda T., Smooke M.D., and Williams F.A. An experimental and theoretical investigation of the dilution, pressure and fbw-fiel effects on the extinction condition of Methane-Air-Nitrogen diffusion flames. *23th International Symposium on Combustion*, (503-), 1990.
- [67] H.C. Hottel and A.F. Sarofim. Radiative transfer. *McGraw-Hill Book Company*, 1967.
- [68] J.R. Howell. Thermal radiation in participating media : the past, the present, and some possible futures. *Journal of Heat Transfer*, 110 :1220–1229, 1988.

- [69] J.R. Howell. The Monte Carlo Method in radiative heat transfer. *Journal of Heat Transfer*, 120 :547–559, 1998.
- [70] L.Y. Huang, Wen J.X., T.G. Karayiannis, and R.D. Matthews. Numerical prediction of high efficiency boiler heat exchanger performance. *Applied Thermal Engineering*, 18 :1089–1099, 1998.
- [71] A.S. Jamaluddin and P.J. Smith. Discrete-Ordinates solution of radiation transfer equation in nonaxisymmetric cylindrical enclosures. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 6(2) :242–245, 1992.
- [72] Y. Ju, G. Masuya, and P.D. Ronney. Effects of radiative emission and absorption on the propagation and extinction of premixed gas flames. *27th symposium on Combustion*, pages 2619–2626, 1998.
- [73] R. Koch and R. Becker. Evaluation of the Quadrature schemes for the Discrete Ordinates Method. In P. Lybaert, V. Feldheim, Lemonnier D., and N. Selçuk, editors, *Proceedings of Eurotherm73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media*, volume 11 of *Eurotherm Series*, pages 59–74. Elsevier, 2003.
- [74] R. Koch and R. Becker. Evaluation of the Quadrature schemes for the Discrete Ordinates Method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84 :423–435, 2004.
- [75] H.M. Koo, R. Vaillon, V. Goutière, V. Le Dez, Hojin Cha, and Song T.H. Comparison of three Discrete Ordinates Methods applied to two-dimensional curved geometries. *International Journal of Thermal Sciences*, 42 :343–359, 2003.
- [76] B.G. Lathrop, K.D. and Carlson. Discrete Ordinates angular quadrature of the neutron transport equation. *Los Alamos Scientific Laboratory Report*, LA-3186, 1965.
- [77] K.D. Lathrop. Discrete-Ordinates solution of radiation transfer equation in nonaxisymmetric cylindrical enclosures. *Nuclear Science and engineering*, 32 :357–369, 1968.
- [78] C.K. Law and F.N. Egolfopoulos. A unified chain-thermal theory of fundamental flammability limits. *24th International Symposium on Combustion*, pages 137–144, 1992.
- [79] C.E. Lee, S.R. Lee, J.W. Han, and J. Park. Numerical study on effect of CO_2 addition in flame structure and NO_x formation of CH_4/Air counterflow diffusion flames. *International Journal of Energy Research*, 25 :343–354, 2001.
- [80] S.C. Lee and C.L. Tien. Optical constants of soot in hydrocarbon flames. *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 1159–1166, 1981.

- [81] G. Li and M.F. Modest. Application of composition pdf methods in the investigation of turbulence-radiation interactions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73 :461–472, 2002.
- [82] H.S. Li, G. Flamant, and J.D. Lu. Reduction of false scattering of the discrete ordinates method. *Journal of Heat Transfer*, 124 :837–844, 2002.
- [83] H.S. Li, G. Flamant, and J.D. Lu. An alternative discrete ordinates scheme for collimated irradiation problems. *International Communications Heat Mass Transfer*, 30(1) :61–67, 2003.
- [84] H.S. Li, G. Flamant, and J.D. Lu. A new discrete ordinate algorithm for computing radiative transfer in one-dimensional atmospheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 83 :407–421, 2004.
- [85] F. Liu. Numerical solutions of three-dimensional non-grey gas radiative transfer using the statistical narrow-band model. *Transactions of the ASME*, 121 :200–203, February 1999.
- [86] F. Liu, O. Gulder, G.J. Smallwood, and Y. Ju. Non-grey gas radiative transfer analyses using the Statistical Narrow-Band model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41(14) :2227–2236, 1998.
- [87] F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood, and O. L. Gulder. Effects of gas and soot radiation on soot formation in a cofbw laminar ethylene diffusion flames. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73 :429–421, 2002.
- [88] F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood, O. L. Gulder, and M. El Hafi . Effects of gas and soot radiation on soot formation in a counterfbw laminar ethylene diffusion flames. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84 :501–511, 2004.
- [89] F. Liu, Ö.L. Gülder, and G.J. Smallwood. Three-dimensional non-grey gas radiative transfer analysis using the Statistical Narrow-Band model. *Revue Générale de Thermique*, 37 :759–768, 1998.
- [90] F. Liu and G.J. Smallwood. An effi cient approach for the implementation of the SNB based correlated-k method and its evaluation. In Lemonnier D. Selçuk N. (Eds) Lybaert P., Feldheim V., editor, *Proceedings of Eurotherm73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media*, volume 11 of *Eurotherm Series*, pages 109–118. Elsevier, Paris, France, 2003.

- [91] F. Liu and G.J. Smallwood. An efficient approach for the implementation of the SNB based correlated-k method and its evaluation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84 :465–475, 2004.
- [92] F. Liu, G.J. Smallwood, and O.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. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43 :3119–3135, 2000.
- [93] F. Liu, G.J. Smallwood, and Ö.L. Gülder. Application of Statistical Narrowband Model to Three-Dimensional Absorbing-Emitting-Scattering Media. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 13(3) :285–291, 1999.
- [94] F. Liu, G.J. Smallwood, and Ö.L. Gülder. Asymptotic analysis of radiative extinction in counterflow diffusion flames of nonunity numbers. *Combustion and Flame*, 121 :275–287, 2000.
- [95] F. Liu, G.J. Smallwood, and Ö.L. Gülder. Band lumping strategy for radiation heat transfer calculations using a Narrowband Model. *Journal of Thermophysics*, 14(2) :278–281, 2000.
- [96] F. Liu, G.J. Smallwood, and Ö.L. Gülder. Application of the statistical narrow band correlated-k method to non grey gas radiation in CO_2 - H_2O mixtures : approximate treatments of overlapping bands. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 68 :401–417, 2001.
- [97] J. Liu, H.M. Shang, Y.S. Chen, and T.S. Wang. Development of an unstructured radiation model applicable for two dimensional planar, axisymmetric and 3-Dimensional geometries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 66 :17–33, 2000.
- [98] A. Liñan. The asymptotic structure of counterflow diffusion flame for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1 :1007, 1974.
- [99] F.C. Lockwood and N.G. Shah. A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. *8ieme Symposium on Combustion*, pages 1405–1413, 1981.
- [100] W. Luan, C.M.H. Lim, C.J. and Brereton, Bowen B.D., and J.R. Grace. Experimental and theoretical study of total and radiative heat transfer in circulating fluidized beds. *Chemical Engineering science*, 54 :3749–3764, 1999.

- [101] A.E. Lutz, R.J. Kee, J.F. Grcar, and F.M. Rupley. Oppdif : A fortran program for computing opposed-fbw diffusion flames. Technical Report 96-8243, Sandia National Laboratories, 1996.
- [102] W. Malkmus. Random Lorentz band model with exponential-tailed S-1 line-intensity distribution function. *Journal of Optical Society of America*, 57 :323–329, 1967.
- [103] J.G. Marakis, C. Papapavlou, and E. Kakaras. A parametric study of radiative heat transfer in pulverised coal furnaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43 :2961–2971, 2000.
- [104] K. Maruta, M. Yoshida, H. Guo, Y. Ju, and T. Niioka. Extinction of low-stretched diffusion flame in microgravity. *Combustion and Flame*, 112 :181–187, 1998.
- [105] S. Maruyama and T. Aihara. Radiative heat transfer of arbitrary 3D absorbing, emitting, and scattering media and specular and diffuse surfaces. *Journal of Heat Transfer*, 121 :722–726, 1997.
- [106] S. Maruyama and Z. Guo. Radiative heat transfer in arbitrary configurations with nongray absorbing, emitting, and anisotropic scattering media. *Journal of heat transfer*, 121 :722–726, 1999.
- [107] S. Maruyama and Z. Guo. Radiative heat transfer in inhomogenous, nongray, and anisotropically scattering media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43 :2325–2336, 2000.
- [108] S. Mazunder and M.F. Modest. A probability density function approach to modeling turbulence-radiation interactions in nonluminous flames. *International Journal Heat and Mass Transfer*, 42 :971–991, 1999.
- [109] J.P. Moder, G.N. Kumar, and J.C. Chai. An unstructured-grid radiative heat transfer module for the national combustion code. Technical Report AIAA-2000-0453, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2000.
- [110] M.F. Modest. The Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer. *Journal of Heat Transfer*, 113(3) :650–656, 1991.
- [111] M.F. Modest. *Radiative heat transfer*. Mc Graw-Hill Series in Mechanical Engineering, 1993.
- [112] M.F. Modest and S. Mazunder. Turbulence-radiation interactions in nonreactive fbw of combustion gases. *Journal of heat transfer*, 121 :726–729, 1999.

- [113] Brewster M.Q. *Thermal Radiative Transfer and Properties*. Wiley-Interscience Publication, 1992.
- [114] J.Y. Murthy and S.R. Mathur. Finite Volume Method for radiative heat transfer using unstructured meshes. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 12(3) :313–321, 1998.
- [115] V.S. Naik and Laurendeau N.M. Laser-saturated and linear laser-induced fluorescence measurements of nitric oxide in counterfbw diffusion flames under non-sooting oxygen-enriched conditions. *Combust. Sci. and Tech.*, 174 :1–21, 2002.
- [116] M.H.N. Naraghi and B.T.F. Chung. A unified matrix formulation for the zone method : a stochastic approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, pages 245–251, 1985.
- [117] D.E. Negrelli, J.R. Lloyd, and J.L. Novotny. A theoretical and experimental study of radiation-convection interaction in a diffusion flame. *Journal of Heat Transfer*, 99 :212–220, 1977.
- [118] B. Olsommer, M. von Spakovski, and D. Favrat. Transfert de chaleur par rayonnement dans un four d’incinération industriel : application de la méthode des zones. *Revue Gen. Therm*, 36 :125–134, 1997.
- [119] J. Park, S.G. Kim, K.M. Lee, and T.K. Kim. Chemical effect of diluents on flame structure and NO emission characteristic in methane-air counterfbw diffusion fbw. *International Journal of Energy Research*, 26 :1141–1160, 2002.
- [120] J. Park, K.H. Lee, and K.S. Kim. Dilution effect of air stream on no emission characteristic in h_2 /ar counterfbw diffusion flame. *International Journal of Energy Research*, 26 :455–473, 2002.
- [121] J. Park, K.H. Lee, and K.M. Lee. NO emission characteristics in counterfbw diffusion flame of blended fuel of $H_2/CO_2/Ar$. *International Journal of Energy Research*, 26 :229–243, 2002.
- [122] P. Perez. *Algorithmes de synthèse d’images et propriétés spectrales des gaz de combustion : méthode de Monte Carlo pour la simulation des transferts radiatifs dans les procédés à hautes température*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- [123] P. Perez, M. El Hafi , P.J. Coelho, and R. Fournier. Occurate solution for radiative heat transfer in two dimensional axisymmetric enclosures with gas radiation and reflective surface. *Rapport interne, DREE, EMAC*, 2004.

- [124] N. Peters. Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion. *Combustion Science and Technology*, 30 :1–17, 1983.
- [125] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10 :319–339, 1984.
- [126] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *Twenty first symposium International on Combustion*, page 1231, 1986.
- [127] L. Pierrot, Ph. Rivière, A. Soufiani, and J. Taine. A fictitious-gas-based absorption distribution function global model for radiative transfer in hot gases. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62 :609–624, 1999.
- [128] L. Pierrot, A. Soufiani, and J. Taine. Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in H_2O , CO_2 , and $H_2O - CO_2$ mixtures at high temperature. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62 :523–548, 1999.
- [129] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. Edwards, 2001.
- [130] G.D. Raithby. Discussion of the Finite Volume Method for radiation, and its application using 3D unstructured meshes. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 35 :389–405, 1999.
- [131] G.D. Raithby and E.H. Chui. A Finite Volume Method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. *Journal of Heat Transfer*, 112 :415–423, 1990.
- [132] R.V. Ravikrishna and Laurendeau N.M. Laser-saturated fluorescence measurements of nitric oxide in laminar counterflow diffusion flames. *Combustion and Flame*, 113 :473–475, 1998.
- [133] R.V. Ravikrishna and Laurendeau N.M. Laser induced fluorescence measurements and modeling of nitric oxide in methane-air and ethane-air counterflow diffusion flames. *Combustion and Flame*, 120 :372–382, 2000.
- [134] J.-F. Ripoll. An averaged formulation of the m_1 radiation model with mean absorption coefficients and presumed probability density functions for turbulent flows. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 83 :493–517, 2004.
- [135] P. Rivière, A. Soufiani, and Taine J. Correlated-k and Fictitious Gas Methods for H_2O near $2.7 \mu m$. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 48(2) :187–203, 1992.

- [136] J. Ruan, H. Kobayashi, T. Niioka, and Y. Ju. Combined effects of nongray radiation and pressure on premixed ch4/o2/co2 flames. *Combustion and Flame*, pages 225–230, 2001.
- [137] M. Sakami and A. Charette. A new differencing scheme for the Discrete Ordinates Method in complex geometries. *Revue générale de thermique*, 37 :440–449, 1998.
- [138] M. Sakami and A. Charette. Application of a modified Discrete Ordinates Method to two-dimensional enclosures of irregular geometries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64 :275–298, 2000.
- [139] M. Sakami, A. Charette, and V. LeDez. Application of the Discrete Ordinates Method to combined conductive and radiative heat transfer in a two-dimensional complex geometry. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 56(4) :517–533, 1996.
- [140] M. Sakami, A. Charette, and V. LeDez. Radiative heat transfer in 3-Dimensional enclosures of complex geometry by using the Discrete Ordinate Method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 59(1/2) :117–136, 1998.
- [141] N. Selçuk and N. Kayakol. Evaluation of Discrete Ordinates Method for radiative in rectangular furnaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40 :213–222, 1997.
- [142] S.H. Seo and T.K. Kim. Study on interpolation schemes of the Discrete Ordinates method Interpolation Method for Three-Dimensional radiative transfer with nonorthogonal grids. *ASME Journal of Heat Transfer*, 120 :1091–1094, 1998.
- [143] R. Siegel and J. H. Howell. Thermal radiation heat transfert. *Hemisphere publishing corporation, Third Edition*, 1992.
- [144] Y.R. Sivathanu and J.P. Gore. Coupled radiation and soot kinetics calculations in laminar acetylene/air diffusion flames. *Combustion and Flame*, 97 :161–172, 1994.
- [145] Y.R. Sivathanu and J.P. Gore. Effects of gas-band radiation on soot kinetics in laminar methane/air diffusion flames. *Combustion and Flame*, 110 :256–263, 1997.
- [146] A. Soufiani and J. Taine. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H_2O , CO_2 and CO , and correlated-K model for H_2O and CO_2 . *Technical note in International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40 :987–991, 1997.
- [147] D.B. Spalding. *Proceeding of Royal Society, Londres*, page 83, 1957.

- [148] J. Ströhle, U. Schnell, and K.R.G. Hein. A mean flux Discrete Ordinates interpolation scheme for general coordinates. *3rd International Conference on Heat Transfer (Antalya)*, 2001.
- [149] J. Taine and A. Soufiani. Gas ir radiatives properties : From spectroscopic data to approximate models. In *Advances in Heat Transfer*, volume 33, pages 295–414. 1998.
- [150] T. Takeno and M. Nishioka. Species conservation and emission indices for flames described by similarity solutions. *Combustion and Flame*, 92 :465–468, 1993.
- [151] Lionel Tessé. *Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo*. PhD thesis, École Centrale Paris, 2001.
- [152] L. Tessé, F. Dupoirieux, and J. Taine. Monte carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 :555–572, 2004.
- [153] C.P. Thurgood. A critical evaluation of DOM using HEART and TN quadrature. *Ph.D thesis, Queen's University, Kingston (Canada)*, 1992.
- [154] C.P. Thurgood, A. Pollard, and H.A. Becker. The TN quadrature set for the Discrete Ordinates Method. *Journal of Heat Transfer*, 117 :1068–1070, 1995.
- [155] C.L. Tien. Thermal radiation properties of gases. *Advances in Heat Transfer*, 5 :253–324, 1968.
- [156] J.S. T'ien. Diffusion flame extinction at small stretch rates : the mechanism of radiative loss. *Combustion and flame*, 65 :31–34, 1986.
- [157] O.B. Toon, C.P. Mc Kay, and T.P. Ackerman. Rapid calculation of radiative heating rates and photodissociations rates in inhomogeneous multiple scattering atmospheres. *Journal of Geophysical Research*, 94(D13) :16287–16301, 1989.
- [158] J.S. Truelove. Discrete-Ordinate solutions of the radiation transport Equation. *Journal of Heat Transfer*, 109 :1048–1051, 1987.
- [159] J.S. Truelove. Three-Dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering in using the Discrete-Ordinates approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 39 :27–31, 1988.
- [160] H. Tsuji. Counterfbw diffusion flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 8 :93–119, 1982.

- [161] B. Varoquié. *Etude expérimentale de la combustion turbulente non prémixée pour la simulation aux grandes échelles*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2004.
- [162] R. Viskanta and M.P. Menguc. Radiation heat transfer in combustion systems. *Prog. Energy Combustion science*, 13 :97–160, 1987.
- [163] J. Wang and T. Niioka. The effect of radiation reabsorption on *NO* formation in CH_4 /Air counterfbw diffusion flames. *Combustion Theory and Modelling*, 5 :385–398, 2001.
- [164] J. Warnatz, U. Maas, and R.W. Dibble. *Combustion*. Springer-Verlag, 1996.
- [165] F. Williams. A review of some theoretical combustions of turbulent flame. *AGARD Conference Proceedings*, 164 :II.1.1–II.1.25, 1975.
- [166] I. Yamaoka, H. Tsuji, and Y. Harigaya. Extinction and structure of methane/very lean methane-air counterfbw diffusion flames. *21st International Symposium on Combustion*, pages 1837–1843, 1986.
- [167] H. Yamashita, M. Nishioka, and T. Takeno. Prediction of *NOx* production rate in the turbulent diffusion flame. *Energy Conversa Mgmt*, 38(10-13) :1343–1352, 1997.
- [168] Y. Yan and G. Holmstedt. Three-dimensional computation of heat transfer from flames between vertical parallel walls. *Combustion and Flame*, 117 :574–588, 1999.
- [169] G.H. Yeoh, R.K.K. Yuen, S.C.P. Chueng, and W.K. Kwok. On modelling combustion, radiation and soot processes in compartment fires. *Building and Environment*, 38 :771–785, 2003.
- [170] L.I. Zaichik, V.A. Pershukov, Koselev M.V., and A.A. Vinberg. Modeling of dynamics, heat transfer, and combustion in two phase turbulent fbws : Flows with heat transfer and combustion. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 15 :311–322, 1997.
- [171] J.B. Zeldovitch. *Journal Technics Physics (URSS)*, 19 :1199–1210, 1949.

Résumé :

MODÉLISATION DES TRANSFERTS RADIATIFS DANS LES SYSTÈMES EN COMBUSTION PAR MÉTHODE AUX ORDONNÉES DISCRÈTES SUR DES MAILLAGES NON STRUCTURÉS TRIDIMENSIONNELS

Mots clés : Transferts radiatifs, combustion, maillage non structuré, méthode aux ordonnées discrètes, modèle de rayonnement des gaz

La prédiction des concentrations d'espèces polluantes, telles que les suies et oxydes d'azote, émises par les systèmes de combustion et l'évaluation de la durée de vie des parois de ce type d'installation nécessitent une bonne prise en compte des transferts radiatifs dans les modèles de combustion. Dans cette optique, nous avons développé un code de calculs des transferts radiatifs basé sur la Méthode aux Ordonnées Discrètes et utilisant des maillages non structurés de la dynamique des fluides. Le rayonnement des gaz de la combustion est pris en compte par un modèle statistique à bandes étroites en k -corrélés. Divers types de quadratures angulaires et trois schémas de dérivation spatiale différents ont été intégrés et comparés. Des tests de validation ont permis de montrer les limites à fortes épaisseurs optiques de l'approximation de type volumes finis sur laquelle s'appuie la méthode aux ordonnées discrètes. Les premiers calculs effectués sur des solutions obtenues par LES permettent de déterminer les termes sources radiatifs et les flux incidents aux parois instantanés, ce qui permet d'envisager le couplage avec la combustion.

Abstract :

RADIATIVE TRANSFER MODELLING IN COMBUSTING SYSTEMS USING DISCRETE ORDINATES METHOD ON THREE-DIMENSIONAL UNSTRUCTURED GRIDS

Keywords : Radiative transfer, combustion, unstructured grids, Discrete Ordinates Method, Spectral Line Gaseous Radiation Model

The prediction of pollutant species such as soots and NO_x emissions and lifetime of the walls in a combustion chamber is strongly dependant on heat transfer by radiation at high temperatures. This work deals with the development of a code based on the Discrete Ordinates Method (DOM) aiming at providing radiative source terms and wall fluxes with a good compromise between cpu time and accuracy. Radiative heat transfers are calculated using the unstructured grids defined by the Computational Fluid Dynamics (CFD) codes. The spectral properties of the combustion gases are taken into account by a statistical narrow bands correlated- k model (SNB- ck). Various types of angular quadrature are tested and three different spatial differencing schemes were integrated and compared. The validation tests show the limit at strong optical thicknesses of the finite volume approximation used the Discrete Ordinates Method. The first calculations performed on LES solutions are presented, it provides instantaneous radiative source terms and wall heat fluxes. Those results represent a first step towards radiation/combustion coupling.