

Simulation LES couplées permettant de prédire les températures dans les parois d'une chambre de combustion

Chai Koren^{‡§}, Ronan Vicquelin[§], Olivier Gicquel[§]

[§]Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, CNRS, Université Paris Saclay
Grande Voie des Vignes, 92295. Chatenay-Malabry cedex, France

[‡]Air Liquide

Centre de Recherche Paris-Saclay

1 Chemin de la Porte des Loges, 78350. Les-Loges-en-Josas, France

Résumé - Cette étude présente un exemple de un calcul multi-physique de haute fidélité permettant de simuler une chambre de combustion avec des méthodes au fait de la littérature : de la LES pour modéliser la combustion, un code de rayonnement Monte-Carlo avec une description détaillée des propriétés radiatives des gaz et une procédure permettant une adaptation automatique du pas de temps de couplage entre le code fluide et le code solide.

Les simulations sont validées par comparaison avec des mesures de température de paroi obtenues par phosphorescence induite par laser. La simulation prenant uniquement en compte la combustion et la thermique de paroi permet de reproduire très correctement ce champ de température avec une erreur relative locale inférieure à 10%. L'ajout de la prise en compte du rayonnement permet de réduire cette erreur relative locale à moins de 3%

1. Introduction

La simulation aux grandes échelles (LES) est aujourd'hui un outil mature qui peut être appliqué à des simulations réactives de configurations complexes réelles comme présenté dans [1, 2]. Ces avancées importantes ouvrent la voie aux simulations multi-physiques de haute fidélité comme la simulation des interactions entre la thermique des parois et un écoulement turbulent de gaz chauds. Ainsi l'étude de l'interaction d'un écoulement chaud avec des aubes de turbines ou dans une chambre de combustion ont déjà fait l'objet de publications entre autres par les équipes du CERFACS [3, 4, 5]. Pour prédire correctement les flux aux parois, enjeu particulièrement important pour la durée de vie des chambres de combustion, il est nécessaire de pouvoir calculer la thermique dans les parois, les interactions entre l'écoulement turbulent et la flamme ainsi que le rayonnement des gaz.

De telles simulations couplant ces trois phénomènes sont aujourd'hui encore rares dans la littérature et pour l'instant le calcul de la flamme est réalisé en se basant sur une modélisation RANS qui pour pouvoir prendre en compte correctement l'impact du rayonnement nécessite d'importants efforts de modélisation de l'interaction rayonnement turbulence (TRI). Le recours à la LES pour modéliser la combustion turbulente permet de s'affranchir de cet effort de modélisation, puisque par nature la LES donne accès aux champs instantanés d'espèces et de température ainsi qu'à la corrélation spatiale entre tous les points du domaine [6, 7]. La seule partie pour laquelle l'interaction rayonnement turbulence est négligée se situe dans la zone du front de flamme où les champs sont épaissis. Cependant en volume cette zone reste négligeable dans le domaine et n'impacte pas la qualité des résultats.

Dans cette étude, nous illustrons les possibilités de la simulation multi-physique de haute fidélité en calculant une flamme swirlée confinée [8, 9]. Cette flamme, étudiée au laboratoire

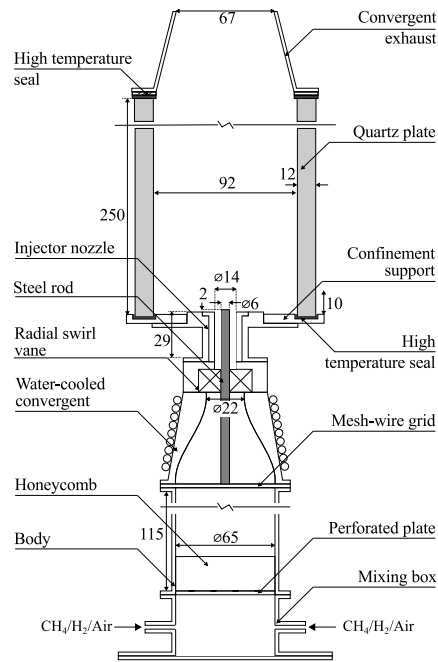


Figure 1 Schéma du brûleur VALOGAZ permettant d'obtenir une flamme swirlée confinée.

EM2C, est connue pour être très sensible à la température des parois pour sa stabilisation. Cette sensibilité a déjà été reproduite avec succès par l'équipe du laboratoire EM2C à l'aide de simulations LES non couplées pour lesquelles la température de paroi était imposée à partir des mesures expérimentales [10]. L'objectif de cette étude est de s'affranchir de la connaissance préalable de la température de paroi en réalisant dans un premier temps une simulation couplant combustion et thermique dans la paroi, puis dans un deuxième temps combustion, thermique de paroi et rayonnement des gaz.

2. Dispositif expérimental et configuration numérique

2.1. Le brûleur VALOGAZ

Le brûleur retenu pour cette étude est le brûleur appelé VALOGAZ étudié au laboratoire EM2C initialement par Guiberti *et al* [9, 10]. Un plan du dispositif expérimental est donné sur la figure 1. Pour cette étude il est utilisé dans une configuration permettant d'obtenir une flamme prémélangée swirlée composée de 60% d' H_2 et 40% de CH_4 en volume à une richesse de 0,7. Le nombre de swirl est de 0,4. La température des gaz frais est, elle, de 293 K. Cette flamme développe une puissance thermique de 4 kW.

Pour valider les calculs, des mesures des vitesses par anémométrie laser doppler ont été réalisées ainsi que de l'imagerie de chimiluminescence du radical OH^* et de la LIF OH . Ces résultats ont permis de valider la qualité de la partie aérodynamique des simulations et ne seront pas présentés ici. Les températures de paroi sont obtenues par excitation laser d'une couche de phosphore déposée sur l'une des quatre fenêtres de quartz sur une zone de 51 mm par 58 mm.

2.2. configuration numérique

Pour conduire ces simulations nous avons développé un environnement de calcul multi-physique qui permet à l'aide du logiciel OPEN-PALM [11] développé par le Cerfacs et l'ONERA de coupler différents types de logiciels. Pour notre étude, nous avons utilisé le logiciel YALES2 développé par le CORIA pour simuler en LES la partie fluide. Le modèle de combustion est le modèle F-TACLES [12] avec un modèle d'efficacité proposé par Charlette *et al* pour tenir compte de l'interaction flamme turbulence [13].

La thermique dans les parois est résolue à l'aide de deux instances de YALES2 dont l'une résout l'équation de la chaleur stationnaire et l'autre l'équation de la chaleur instationnaire. Les propriétés physiques retenues pour le quartz composant les parois (type GE-124) sont $c_{ps} = 954$ J/kg/K, $\rho_s = 2\,200$ kg/m³ et $\lambda_s = 1,52$ W/m/K. Comme condition aux limites pour la partie extérieure du brûleur, nous avons choisi d'imposer un flux qui tient compte à la fois de la convection naturelle et du rayonnement :

$$\phi_{bnd}^{ext} = h_{ext}(T_{bnd} - T_{ext}) + \epsilon_{bnd}\sigma(T_{bnd}^4 - T_{ext}^4) \quad (1)$$

Le premier terme modélise la contribution de la convection naturelle avec un coefficient de transfert $h_{ext}(z)$ et le deuxième modélise la contribution du rayonnement avec une émissivité $\epsilon_{bnd} = 0,75$ et σ la constante de Stefan-Boltzmann. Le coefficient de transfert $h_{ext}(z)$ est modélisé à partir du nombre de Nusselt exprimé sous la forme $Nu(z) = 0.39 Ra^{1/4}$ avec Ra le nombre de Rayleigh. Pour tenir compte de la géométrie réelle l'origine est décalée de $z_0 = 2$ cm ce qui donne :

$$h_{ext}(z) = \frac{Nu(z - z_0)\lambda_{air}}{z - z_0} \quad (2)$$

les propriétés de l'air et le nombre de Rayleigh étant calculés à l'aide de la température de film $T_m = 0,5(T_{ext} + T_{bnd})$.

Le rayonnement des gaz est calculé à l'aide d'un code Monte Carlo, RAINIER, basé sur une approche réciproque développée en interne au laboratoire EM2C et optimisée à l'aide une technique d'échantillonnage préférentiel [14] permettant une convergence du calcul pour un coût CPU raisonnable. Les propriétés radiatives des gaz sont modélisées par une approche CK qui décrit très précisément les propriétés de CO₂ et H₂O [15].

L'ensemble des trois codes présentent des capacités de portabilité sur les plus grands calculateurs européens ce qui permet de conduire à l'aide de simulations massivement parallèles des calculs dans des configurations réalistes comme celle présentée ici.

Pour assurer les échanges d'informations entre le code fluide et le code résolvant la thermique de paroi nous avons utilisé une nouvelle technique récemment développée : Hybrid-Cell Neumann-Dirichlet (HCND) [16]. Cette nouvelle méthode basée sur une couche de cellules hybrides à l'interface entre le solide et le fluide permet pour des simulations LES ou DNS d'assurer un contrôle et une adaptation du pas de temps de couplage garantissant que l'erreur commise dans la prédiction de la température d'interface reste inférieure à une tolérance spécifiée. Il est donc ainsi possible de toujours utiliser un pas de temps de couplage optimum réduisant ainsi le coût de calcul tout en s'adaptant aux évolutions instationnaires de la physique étudiée.

Cependant calculer le régime transitoire dans une telle chambre de combustion reste encore inabordable aujourd'hui en terme de temps de calcul, c'est pourquoi nous avons utilisé en complément une méthode d'accélération pour permettre au calcul de converger vers le régime établi sans nuire à la représentation instationnaire de la thermique dans la paroi comme le font

les méthodes d'accélération traditionnelles. De plus amples détails sur cette méthode peuvent être obtenus dans [17].

L'actualisation du terme source de rayonnement est elle faite à pas constant, ce pas de couplage a été choisi égal à une actualisation toutes les 25 échanges entre le code fluide et le code de thermique de paroi. Ce pas de couplage a été validé à partir de plusieurs simulations différentes, il n'induit pas d'erreur sur la simulation complète.

3. Résultats et Discussion

Pour cette étude nous présentons et comparons deux simulations différentes la première tient compte uniquement du couplage entre la combustion et la thermique de paroi, notée dans la suite CASE-FW et la deuxième couplant la combustion, la thermique de paroi et le rayonnement des gaz, notée dans la suite CASE-FWR. Dans les deux cas la forme et la position de la flamme sont correctement reproduites. Ces résultats ne sont pas présentés ici, l'objectif de cette étude étant de démontrer la capacité de notre chaîne de calcul multi-physique à prédire correctement la température de paroi sans données *a priori*.

La figure 2 présente le champ de vitesse moyen dans le plan central pour le cas tenant compte du rayonnement des gaz, CASE-FWR. Les résultats pour le cas CASE-FW étant similaires, ils ne sont pas présentés. Il est possible d'observer les deux zones de recirculation A et B qui contrôlent directement les transferts en paroi. Sur la droite de la figure un instantané du champ de température et de la variable d'avancement sont proposés. Il est possible de voir que la zone de recirculation de gaz froids vient refroidir la flamme sur l'extérieur du domaine empêchant la réaction d'avoir lieu et contribuant ainsi à une stabilisation de la flamme sous une forme en V et non en M comme cela serait le cas avec un brûleur ayant des parois adiabatiques. Proche de l'axe de symétrie du brûleur les gaz atteignent une température proche de la température adiabatique de combustion contribuant à créer une zone de gaz chaud qui elle contrôle les flux radiatifs sur les parois.

La zone de recirculation B permet d'éviter que les gaz chauds ne rentrent directement en contact avec les parois. Les températures ainsi obtenues sont présentées dans la figure 3. Les températures mesurées par phosphorescence sur la paroi en quartz délimitée par le carré blanc sur la partie gauche de la figure 3 sont comparées à celles obtenues par simulation dans les cas CASE-FW et CASE-FWR, voir figure 4. Nous pouvons constater que le calcul qui ne prend pas en compte le rayonnement des gaz (au milieu) permet de reproduire déjà correctement la température de paroi, l'erreur maximum locale étant de l'ordre de 10%. Ce résultat confirme qu'à pression ambiante le rayonnement n'a pas une contribution majeure aux flux en paroi quand ceux-ci sont baignés par des gaz chauds.

Quand le rayonnement est pris en compte, CASE-FWR partie droite de la figure, nous pouvons constater une amélioration notable de la prédiction du champ de température, l'erreur maximum locale étant maintenant limitée à 3%.

4. Analyse de la contribution du rayonnement des gaz

La figure 5 présente un instantané du champ de température, du champ de puissance rayonnée émise localement et du champ de puissance radiative totale comprenant l'émission locale et l'absorption locale dues au flux radiatif émis par le reste du domaine. La différence entre les deux derniers champs illustre bien que faire l'hypothèse classique d'un milieu optiquement fin n'est pas valable même à pression atmosphérique. Il est donc nécessaire de résoudre l'équation

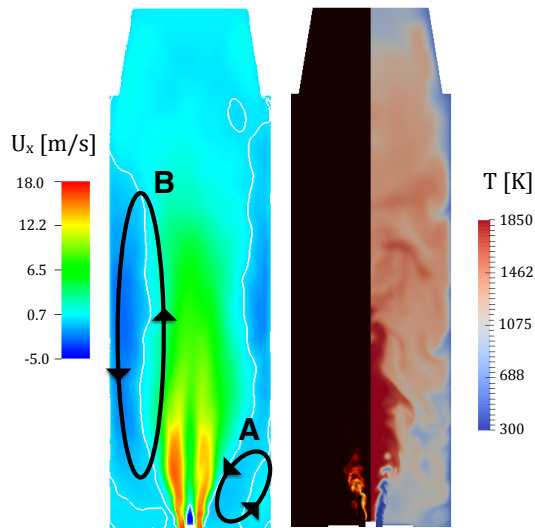


Figure 2 Coupe sur le plan central dans le cas avec prise en compte du rayonnement, CASE-FWR, à gauche le champ moyen de vitesse verticale U_x . L'isoligne blanche $U_x = 0 \text{ m.s}^{-1}$ permet d'illustrer la zone de recirculation. A droite un instantané de la variable d'avancement (à gauche du domaine) et du champ de température (à droite du domaine).

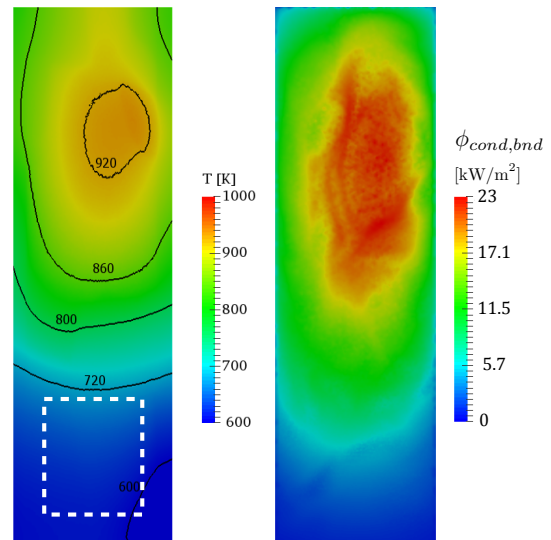


Figure 3 Illustration de la paroi latérale en quartz du brûleur, le carré blanc permet de localiser la zone où les mesures de température ont été réalisées, à gauche le champ de température moyen et à droite le flux conductif moyen. Ces résultats ont été obtenus dans le cas avec prise en compte du rayonnement, CASE-FWR.

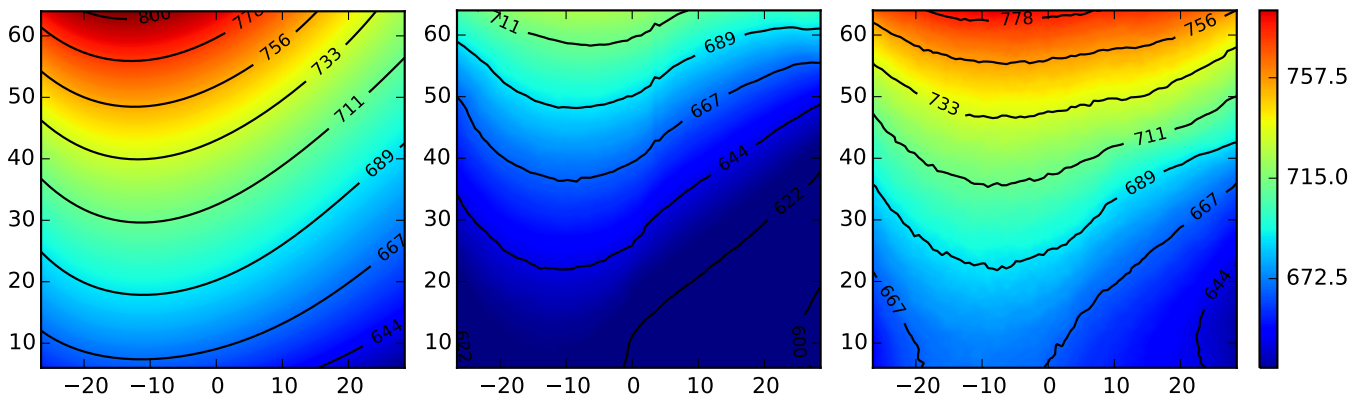


Figure 4 Représentation de la température de paroi (en K) dans la zone illustrée en blanc sur la figure 3, à gauche les valeurs expérimentales [10], au centre les valeurs obtenues avec la simulation ne prenant pas en compte le rayonnement et à droite celles obtenues en incluant l'effet du rayonnement.

de transfert radiatif avec une description spectrale détaillée si l'on souhaite obtenir des résultats les plus proches possibles de la réalité.

Les champs de température moyens obtenus dans les cas CASE-FW et CASE-FWR sont présentés dans la figure 6. On peut constater que la température maximum des gaz est la même dans les deux cas, cette zone localisée juste après le front de flamme étant peu sensible aux effets

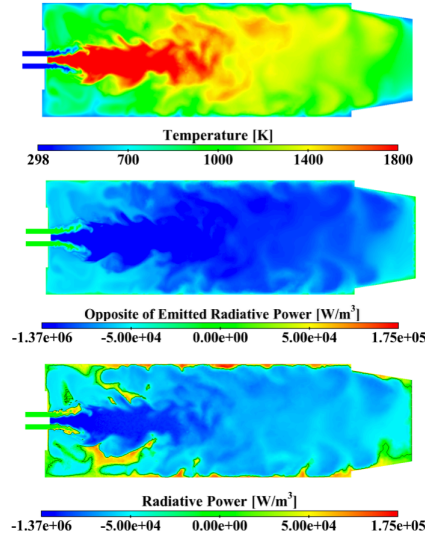


Figure 5 Représentation d'un instantané sur le plan central, en haut le champ de température, au milieu la puissance émise localement, en bas la puissance radiative totale comprenant l'émission et l'absorption.

du rayonnement. Dans le reste du domaine le rayonnement contribue bien à l'homogénéisation du champ de température. La zone de gaz brûlée est bien plus froide quand le rayonnement est pris en compte comme on peut le constater par la modification importante de l'isoline $T = 1400$ K entre les deux configurations. En contrepartie, les zones froides localisées dans le bas de la chambre sont légèrement plus chaudes.

Les flux conductif et radiatif, limités à la partie en quartz, sont illustrés sur la figure 7 dans le cas avec prise en compte du rayonnement, CASE-FWR. Les deux flux sont du même ordre de grandeur comme constaté aussi par Berger *et al* [18]. Le rapport du flux conductif et du flux total intégré sur la paroi en quartz uniquement,

$$\frac{\int_w \phi_{cond,bnd} dS}{\int_w (\phi_{cond,bnd} dS + \phi_{rad,bnd} dS)}, \quad (3)$$

est égal à 0.53 dans notre cas. Il paraît donc évident que la prise en compte du rayonnement dans les calculs est cruciale pour arriver à estimer correctement le flux au paroi. Cependant, dans le cas sans prise en compte du rayonnement le flux en paroi est aussi correctement prédit ce qui peut sembler contradictoire avec la constatation précédente. Cela peut s'expliquer par le fait que le rayonnement change le champ de température proche paroi ce qui a tendance à changer l'équilibre global et dans notre cas à compenser l'ajout d'un flux radiatif.

5. Conclusion

Cette étude présente un exemple de un calcul multi-physique de haute fidélité permettant de simuler une chambre de combustion avec des méthodes au fait de la littérature : de la LES pour modéliser la combustion, un code de rayonnement Monte-Carlo avec une description détaillée des propriétés radiatives des gaz et une procédure permettant une adaptation automatique du pas de temps de couplage entre le code fluide et le code solide.

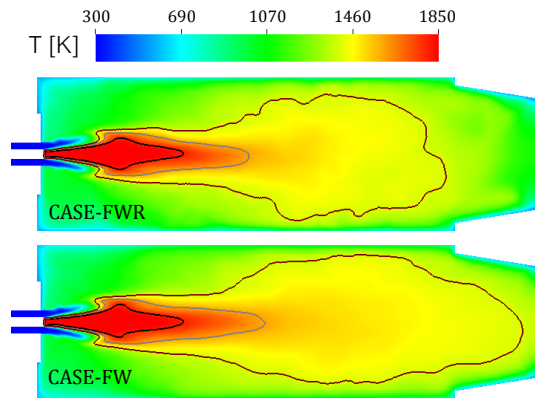


Figure 6 Champ de température moyen, en haut le cas sans prise en compte du rayonnement, en bas le cas avec prise en compte du rayonnement. Les isolignes représentent $T = 1800$ K en noir, $T = 1600$ K en gris et $T = 1400$ K en marron.

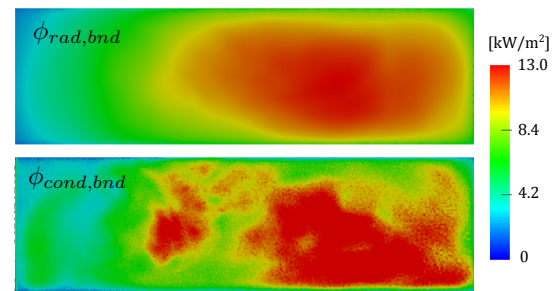


Figure 7 Représentation du flux radiatif (en haut) et du flux convectif (en bas) sur la paroi dans le cas de la simulation prenant en compte le rayonnement.

Les simulations ont été validées par comparaison avec des mesures de température de paroi obtenues par phosphorescence induite par laser. La simulation prenant uniquement en compte la combustion et la thermique de paroi permet de reproduire très correctement ce champ de température avec une erreur relative locale inférieure à 10%. L'ajout de la prise en compte du rayonnement permet de réduire cette erreur relative locale à moins de 3%

De tels résultats montrent bien qu'aujourd'hui il est possible de mener des simulations numériques prédictives dans des configurations réalistes. La prochaine étape pour l'utilisation de ces outils consistera à regarder les effets instationnaires des variations de température et de flux dans la paroi pour tenter d'estimer leurs impacts sur le vieillissement des matériaux.

Références

- [1] Moin, P., and Apte, S. V., Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors., *AIAA Journal*, 44(4) (2006) 698-708.
- [2] Gicquel, L. Y. M., Staffelbach, G., and Poinso, T., Large Eddy Simulations of gaseous flames in gas turbine combustion chambers., *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(6), (2012) 782-817.
- [3] Duchaine, F., Corpron, A., Pons, L., Moureau, V., Nicoud, F., and Poinso, T., Development and assessment of a coupled strategy for conjugate heat transfer with Large Eddy Simulation : Application to a cooled turbine blade., *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(6), (2009) 1129-1141.
- [4] Duchaine, F., Maheu, N., Moureau, V., Balarac, G., and Moreau, S., Large-eddy simulation and conjugate heat transfer around a low-mach turbine blade., *Journal of Turbomachinery*, 136(5), 10, (2013) 051015-051015.
- [5] Jaure, S., Duchaine, F., Staffelbach, G., and Gicquel, L., Massively parallel conjugate heat transfer methods relying on large eddy simulation applied to an aeronautical combustor., *Computational Science & Discovery*, 6(1), (2013) 015008.
- [6] Coelho, P. J., Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows., *Progress in Energy and Combustion Science*, 33, (2007) 311-383.
- [7] Coelho, P. J., Turbulence-Radiation Interaction : From Theory to Application in Numerical Simulations., *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, 134(3), (2012).
- [8] Guiberti, T. F., Durox, D., Zimmer, L., and Schuller, T., Analysis of topology transitions of swirl flames interacting with the combustor side wall., *Combustion and Flame*, 162(11), (2015) 4342-4357.

- [9] Guiberti, T., Durox, D., Scoufflaire, P., and Schuller, T., Impact of heat loss and hydrogen enrichment on the shape of confined swirling flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2), (2015) 1385-1392.
- [10] Mercier, R., Guiberti, T., Chatelier, A., Durox, D., Gicquel, O., Darabiha, N., Schuller, T., and Fiorina, B., Experimental and numerical investigation of the influence of thermal boundary conditions on premixed swirling flame stabilization., *Combustion and Flame*, 171, (2016) 42-58.
- [11] Buis, S., Piacentini, A., and De ?clat, D., Palm : a computational framework for assembling high-performance computing applications., *Concurrency and Computation : Practice and Experience*, 18(2), (2006) 231-245.
- [12] Fiorina, B., Vicquelin, R., Auzillon, P., Darabiha, N., Gicquel, O., and Veynante, D., A filtered tabulated chemistry model for les of premixed combustion., *Combustion and Flame*, 157(3), (2010) 465-475.
- [13] Charlette, F., Meneveau, C., and Veynante, D., A power-law flame wrinkling model for les of premixed turbulent combustion, part i : non-dynamic formulation. *Combustion and Flame*, 131(1/2), (2002) 159-180.
- [14] Zhang, Y., Gicquel, O., and Taine, J., Optimized emission-based reciprocity monte carlo method to speed up computation in complex systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(25), (2012) 8172-8177.
- [15] Taine, J., and Soufiani, A., Gas IR radiative properties : From spectroscopic data to approximate models., *Advances in Heat Transfer*, 33 (1999) 295-414
- [16] Koren, C., Vicquelin, R., and Gicquel, O., Self- adaptive coupling frequency for unsteady coupled conjugate heat transfer simulations. *International Journal of Thermal Sciences* (2016) (Submitted).
- [17] Koren, C., Vicquelin, R., and Gicquel, O., Simulation of conjugate heat transfer in a wall-impinging flame with a coupling time step controlling method. *ASME Turbo EXPO* (2017) (Submitted).
- [18] Berger, S., Richard, S., Duchaine, F., Staffelbach, G., and Gicquel, L. Y. M., On the sensitivity of a helicopter combustor wall temperature to convective and radiative thermal loads. *Applied Thermal Engineering*, 103, 6, (2016) 1450-1459.

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre de la Chaire Air Liquide sur l'oxycombustion et les transferts thermiques pour l'énergie et l'environnement portée conjointement par Air Liquide, le CNRS et CentraleSupélec. Il est aussi financé par le projet ANR OXYTEC - ANR-12-CHIN-0001. Les ressources de calculs ont été obtenues au près de GENCI dans le cadre de l'allocation 2015-x20142b0164 sur les machines du CINES. Les auteurs souhaitent particulièrement remercier Ghislain Lartigue et Vincent Moureau du CORIA pour avoir fourni le CODE YALES2 ainsi que Thibault Guiberti et Adrien Chatelier pour les échanges fructueux autour des résultats expérimentaux.