

Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente

Damien Poitou



Mouna El Hafi



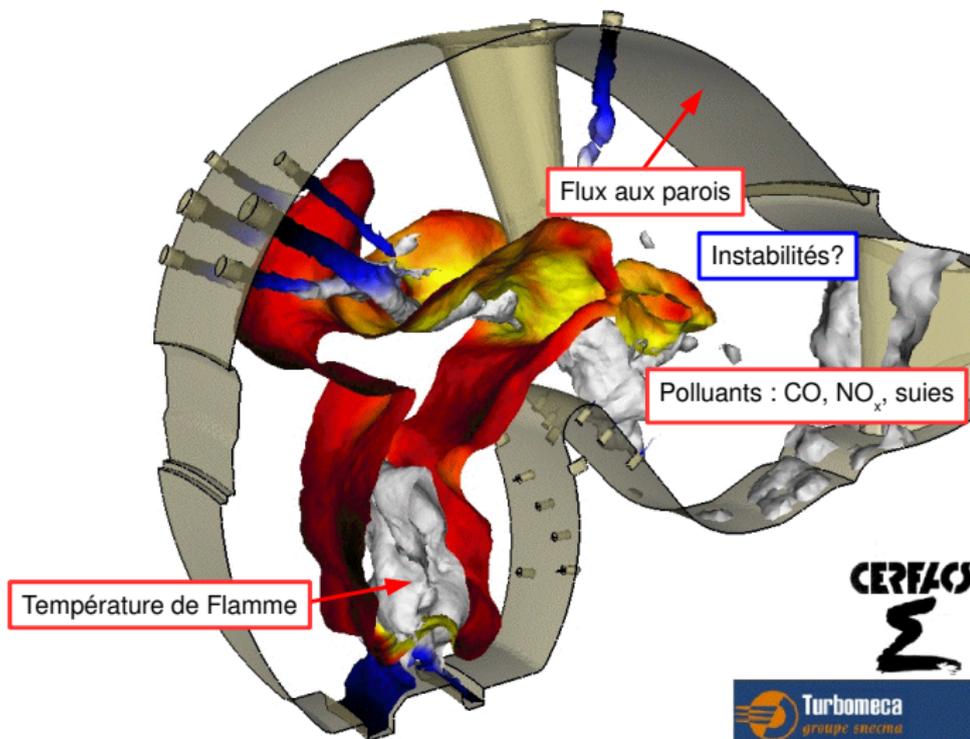
Bénédicte Cuenot

Journées SFT - Albi

25 - 26 mars 2010

Contexte de l'étude

Nécessité de prendre en compte **les pertes par rayonnement** dans les SGE [*Coelho, 2007; dos Santos 2007; Modest 2008*] :



1 Modélisation de la combustion et du rayonnement

- Modélisation de la combustion
- Modélisation du rayonnement

2 Mise en place d'un couplage

- Fréquence de couplage
- Configuration et paramètres de calcul
- Loi de paroi
- Mécanismes de couplage

3 Couplage combustion-rayonnement en LES

- Influence rayonnement \rightarrow combustion
- Influence turbulence \rightarrow rayonnement

4 Conclusions et Perspectives

1 Modélisation de la combustion et du rayonnement

- Modélisation de la combustion
- Modélisation du rayonnement

2 Mise en place d'un couplage

- Fréquence de couplage
- Configuration et paramètres de calcul
- Loi de paroi
- Mécanismes de couplage

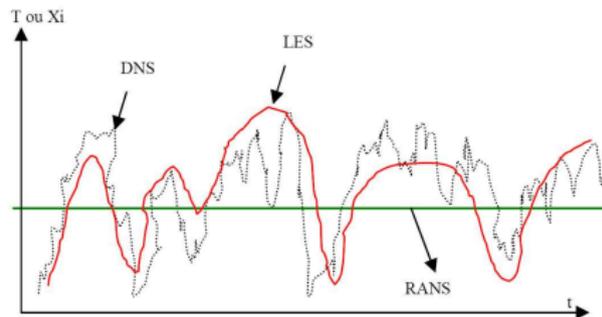
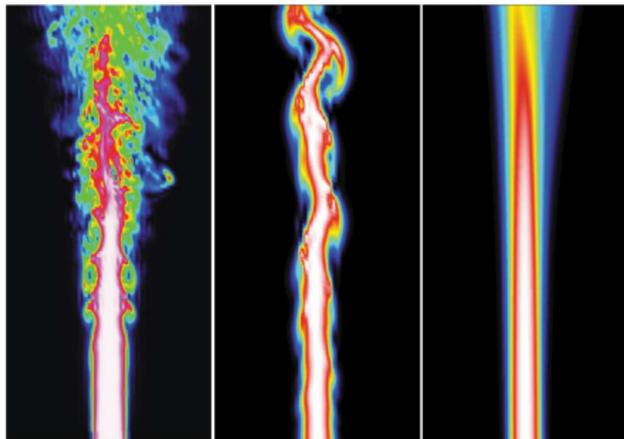
3 Couplage combustion-rayonnement en LES

- Influence rayonnement \rightarrow combustion
- Influence turbulence \rightarrow rayonnement

4 Conclusions et Perspectives

Différentes approches de la simulation de la combustion turbulente :

- Simulation Numérique Directe (SND),
- Simulation aux Grandes Échelles (**SGE** ou **LES**),
- Simulation des équations de Navier-Stokes moyennées (**RANS**).



[L. Gicquel]

[Poinsot et Veynante 2001]

Équations de conservation filtrées

- **Conservation de la quantité de mouvement :**

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{u}_i) + \partial_j(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j) = -\partial_i\bar{P} - \partial_j(\tilde{\tau}_{ij} + \tilde{\tau}_{ij}^t)$$

- **Conservation des espèces :**

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{Y}_k) + \partial_i(\bar{\rho}\tilde{Y}_k\tilde{u}_i) = -\partial_i(\tilde{J}_{k,i} + \tilde{J}_{k,i}^t) - \overline{\dot{\omega}_k}$$

- **Conservation de l'énergie :**

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{E}) + \partial_i((\bar{\rho}\tilde{E} + \bar{P})\tilde{u}_i) = \partial_j(\tilde{u}_i(\tilde{\tau}_{ij} + \tilde{\tau}_{ij}^t)) - \partial_i(\tilde{q}_{th,i} + \tilde{q}_{th,i}^t) + \overline{S_r} + \overline{\dot{\omega}_T}$$

où l'exposant t désigne les composantes sous-maille

Corrélations à modéliser en LES

Exposant $t \rightarrow$ composantes **sous-maille** :

- Le **tenseur des contraintes de Reynolds sous maille** : La viscosité turbulente μ_t est estimée par un modèle type WALE [*Ducros 1998, Nicoud 1999*],
- Les flux **de diffusion thermique** et de **diffusion des espèces** sous-maille : modélisés par des lois de type gradient,
- Le **terme source chimique** : **modèle sous-maille de combustion turbulente**
 \Rightarrow **modèle de flamme épaissie** [*Colin et al. 2000*],
- Le **terme source radiatif** S_r .

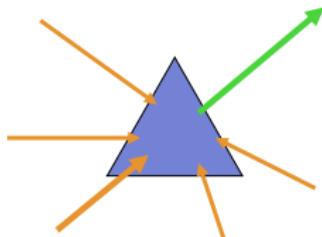
Solveur AVBP

- Équations de Navier-Stokes compressibles;
- Schémas numériques :
 - temps : Runge-kutta 3,
 - espace :
 - Lax Wendroff (volumes finis ordre 2),
 - TTGC (éléments finis ordre 3).
- Schémas cinétiques réduits pour modéliser la chimie;
- Conditions aux limites (NSCBC), loi de parois;
- Parallèle (décomposition en sous-domaines).

Équation de transfert radiatif

Bilan radiatif local dans un milieu non diffusant :

$$\mathbf{s} \cdot \nabla L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \kappa_\nu \left[\underbrace{L_\nu^0(\mathbf{x})}_{\text{Fonction de Planck}} - \underbrace{L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})}_{\text{Luminance incidente}} \right]$$



Contributions :

- directionnelle, \mathbf{u} ;
- fréquentielle ν .

Conditions aux limites :

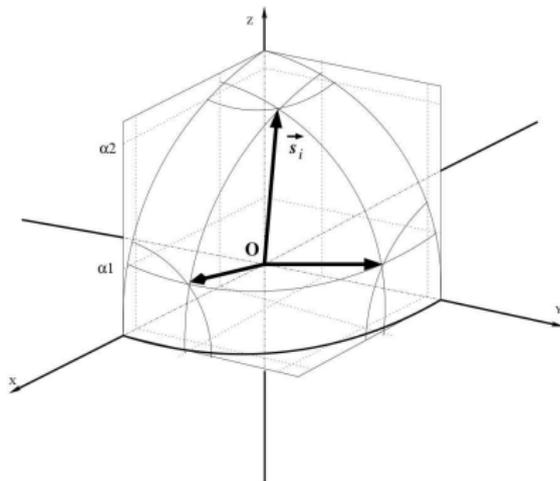
$$L_\nu(\mathbf{x}_w, \mathbf{u}) = \underbrace{\epsilon_\nu(\mathbf{x}_w) L_\nu^0(\mathbf{x}_w)}_{\text{Partie émise}} + \underbrace{\rho_\nu(\mathbf{x}_w) L_{\nu, \text{incident}}(\mathbf{x}_w, \mathbf{u})}_{\text{Partie réfléchie}}$$

Intégration **directionnelle** et **fréquentielle** \Rightarrow terme source macroscopique S_r :

$$S_r(\mathbf{x}) = \int_0^\infty \kappa_\nu \left[4\pi L_\nu^0(\mathbf{x}) - \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) d\Omega \right] d\nu$$

Discrétisation **angulaire** (DOM) et **fréquentielle** (modèle spectral) :

$$S_r(\mathbf{x}) \simeq \sum_{j=1}^{N_g} \omega_j \kappa_j \left(4\pi\sigma T^4(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k) \right)$$



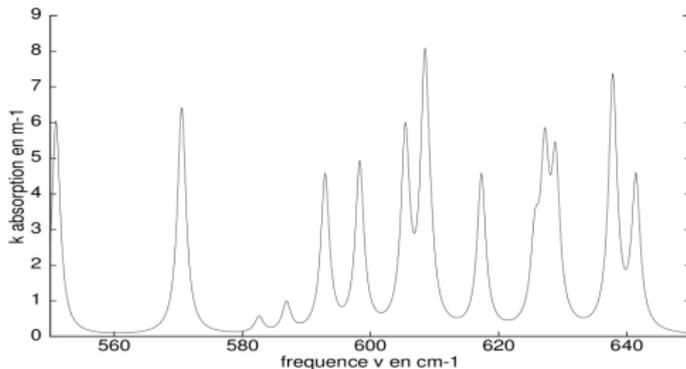
L'ETR monochromatique est discrétisée spatialement et suivant des directions discrètes par la **méthode des DOM** [Joseph 2004] :

$$S_{r,\nu}(\mathbf{x}) \simeq \kappa_{\nu} \left(4\pi L_{\nu}^0(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k) \right)$$

Modèle spectral

Nombre de résolution de l'ETR pour chaque direction :

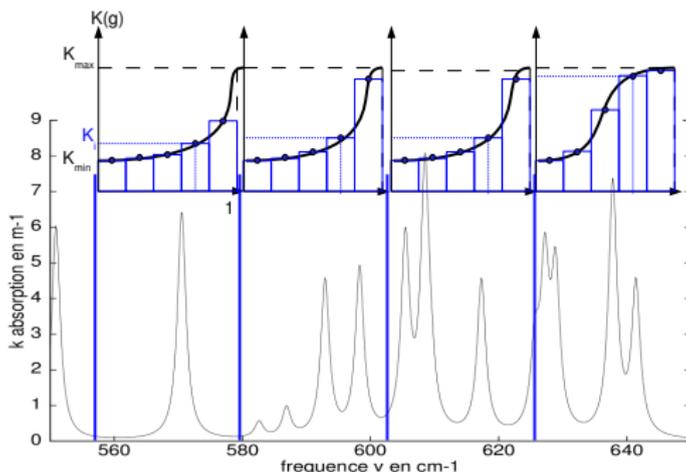
- modèles raie par raie \rightarrow plus de 1 000 000,



Modèle spectral

Nombre de résolution de l'ETR pour chaque direction :

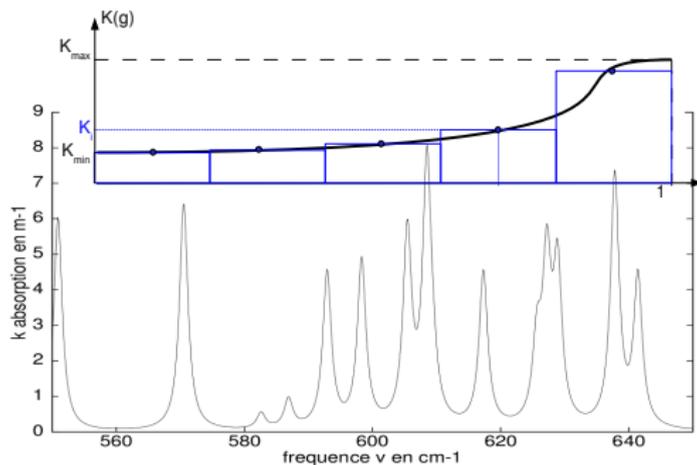
- modèles à bande étroite $\rightarrow 371 \times 5 \sim 1800$,



Modèle spectral

Nombre de résolution de l'ETR pour chaque direction :

- modèles globaux → 3 à 15.



Modèle spectral

Nombre de résolution de l'ETR pour chaque direction :

- modèles globaux → 3 à 15.

Besoin d'un **modèle global rapide** avec une description précise des **mélanges** : H_2O , CO_2 , CO

⇒ **modèle FS-SNBck** [*Liu et al. 2004, Poitou et al. 2009*] :

$$S_r(\mathbf{x}) \simeq \sum_{j=1}^{N_g} \omega_j \kappa_j \left(4\pi\sigma T^4(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k) \right)$$

→ *somme pondérée de N_g gaz gris*

κ_j calculé à partir des bandes étroites.

Solveur PRISSMA

- Équation de transfert radiatif sans diffusion;
- Schéma spatial en flux moyens (également schéma exponentiel);
- Discrétisation angulaire : DOM (S_n);
- Modèles spectraux : somme de gaz gris, k-distribution :
global/global tabulé/bandes étroites;
- Parallélisation domaines (partielle), fréquence, directions.
→ performante jusqu'à $2 \times N_{dir}$ processeurs. . .

1 Modélisation de la combustion et du rayonnement

- Modélisation de la combustion
- Modélisation du rayonnement

2 Mise en place d'un couplage

- Fréquence de couplage
- Configuration et paramètres de calcul
- Loi de paroi
- Mécanismes de couplage

3 Couplage combustion-rayonnement en LES

- Influence rayonnement → combustion
- Influence turbulence → rayonnement

4 Conclusions et Perspectives

Fréquence de couplage

- calcul SGE : 100 000 à 1 000 000 iterations avec le critère CFL (Courant-Friedrich-Levy) :

$$\Delta t = \tau_{acoustic} = \frac{0.7 \times \Delta x_{min}}{\bar{u}_c}$$

- Le rayonnement est instantané (propagation à c) mais qui évolue avec le temps convectif [Dos Santos et al. 2007].

$$\tau_{rad} = \tau_{convectiv} = \frac{\Delta x_{min}}{\bar{u}_{fluide}}$$

- Typiquement $\frac{\tau_{rad}}{\tau_{acoustic}} \approx \frac{\bar{u}_c}{\bar{u}_{fluide}} \sim 100 \Rightarrow$ Fréquence de couplage

Fréquence de couplage

Avec la fréquence de couplage :

$$\frac{t_{\text{Radiatif}}}{t_{\text{Combustion, 100 itérations}}} \simeq 200$$

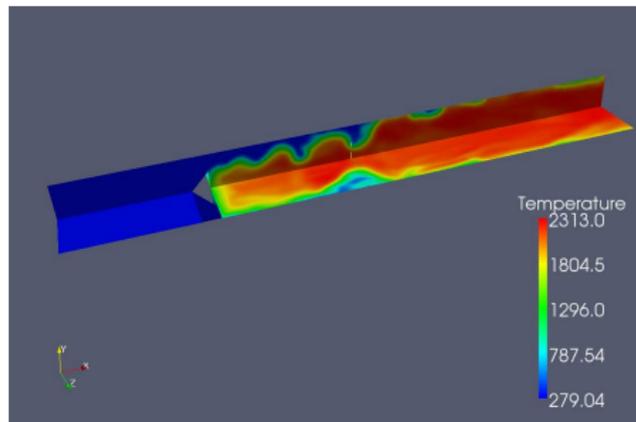
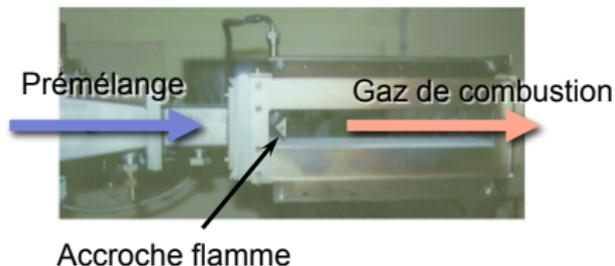
Réduire ce rapport en déterminant un optimum **temps de calcul/précision** pour le rayonnement.

Nombre de résolutions de l'ETR :

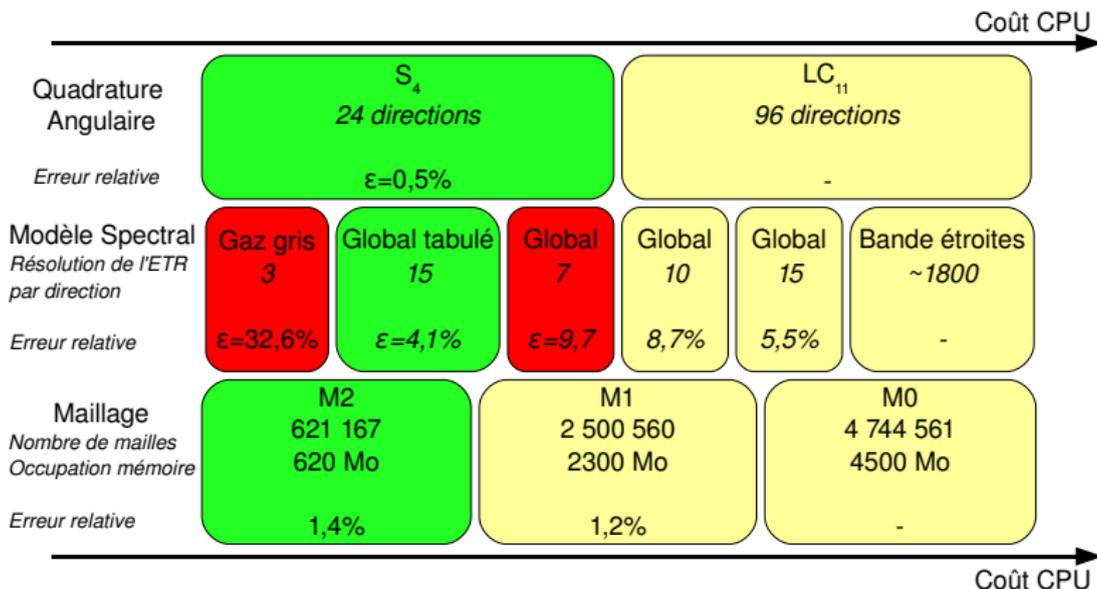
$$N_{\text{Directions}} \times N_{\text{Bandes}} \times N_q \times N_{\text{Points}}$$

- Influence de la **quadrature angulaire**,
- Influence du **modèle spectral**,
- **Maillage** du rayonnement.

La précision des paramètres du solveur radiatif PRISSMA est évaluée en post-traitement sur une solution instantanée [Knikker et al. 2000]:



⇒ Précision sur l'évaluation des pertes radiatives totales $\simeq 1,3 \text{ kW}$.

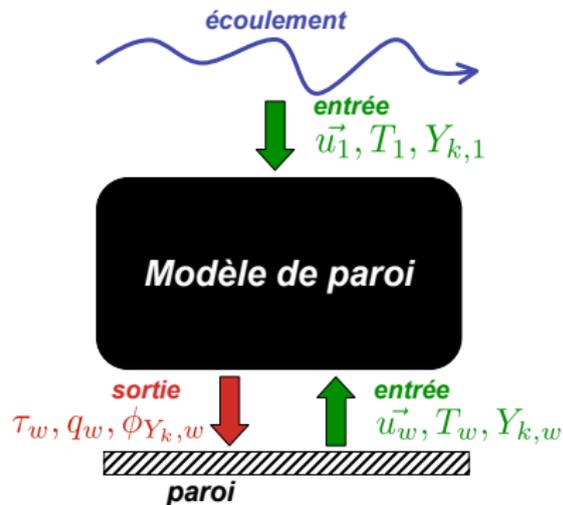
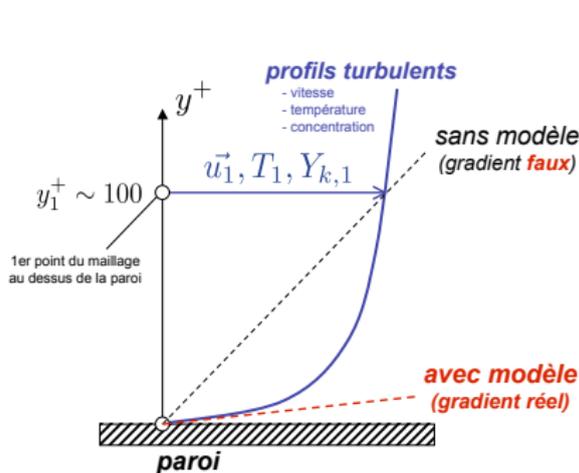


⇒ **Précision** sur les pertes radiatives totales : ~ 6%.

⇒ $\frac{t_{\text{Radiatif}}}{t_{\text{Combustion}}} \simeq 0,6$ avec **réflexion aux parois**.

Réduction d'un facteur ~ 400 (S₄, SNBcK, réflexion, M0).

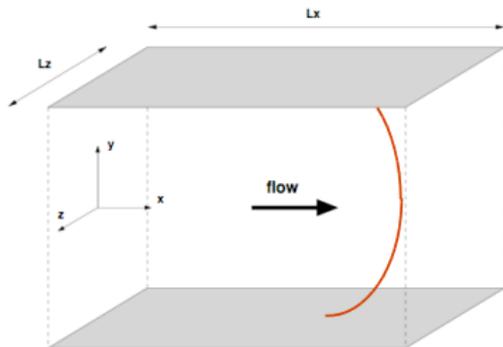
Loi de paroi [Amaya 2009]



Loi de paroi pour décrire les profils dans la première maille.

→ **modifiée par le rayonnement?**

Loi de paroi [Amaya 2009]



292K cells and 307K nodes

$$T_{\text{bulk}} = 2000 \text{ K}$$

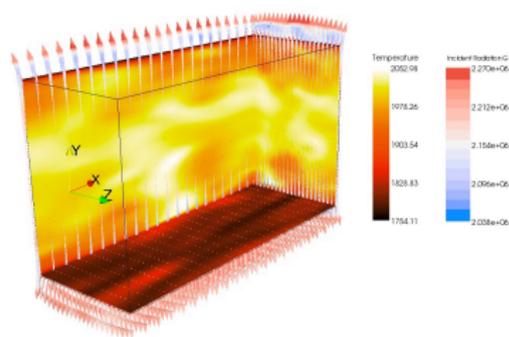
$$\text{Re}_{\tau} = 400$$

$$T_{\text{wall}} = 1750 \text{ K}$$

$$\text{Re}_h = 7500$$

$$X_{\text{soot}} = 0$$

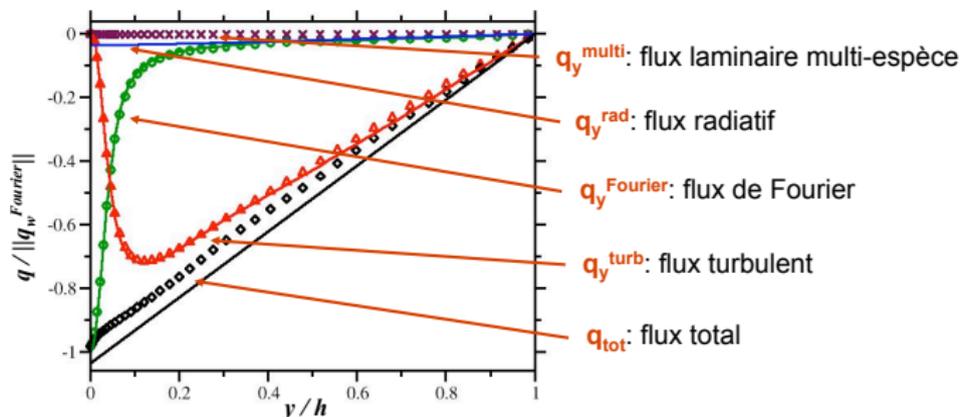
$$\Delta y^+_{\text{min}} = 0.9$$



- Gas composed of 7 species: H_2 , H , H_2O , OH , CO_2 , CO , N_2
- An adapted kinetical scheme comprising 7 reactions was developed by Cabrit and Nicoud [6].
- The gas is reacting, multicomponent, and optically non-homogeneous

[6] Cabrit, O, Nicoud, F, accepted in Physics of Fluids, 2009

Loi de paroi [Amaya 2009]



$$\frac{dq_{tot}}{dy} \approx \underbrace{\frac{d}{dy} \left(\bar{\rho} \{v'' h_s''\} + \bar{\rho} \sum_k \{v'' Y_k''\} \Delta h_{f,k}^0 \right)}_{q_y^{turb}} + \underbrace{\bar{\rho} \{h_k Y_k V_{k,y}\}}_{q_y^{multi}} - \underbrace{\lambda \frac{dT}{dy}}_{q_y^{Fourier}} - q_y^{rad} = \bar{Q}$$

Flux total = loi de paroi classique (**non modifiée**) + flux radiatif
 → Couche limite optiquement mince

Filtrage spatial

Impact des fluctuations **sous-maille** X' par rapport à la valeur filtrée \tilde{X} sur $S_r \Rightarrow \overline{S_r(T, X_i)} \stackrel{?}{=} S_r(\tilde{T}, \tilde{X}_i)$

filtrage LES

Faible impact des fluctuations **sous-maille** X' par rapport à la valeur filtrée \tilde{X} sur S_r [Poitou 2007, Coelho 2009, Roger 2009, Poitou 2009] :

$$\Rightarrow \overline{S_r(T, X_i)} \approx S_r(\tilde{T}, \tilde{X}_i)$$

Calcul **sans modèle sous-maille radiatif** sur une solution LES.

1 Modélisation de la combustion et du rayonnement

- Modélisation de la combustion
- Modélisation du rayonnement

2 Mise en place d'un couplage

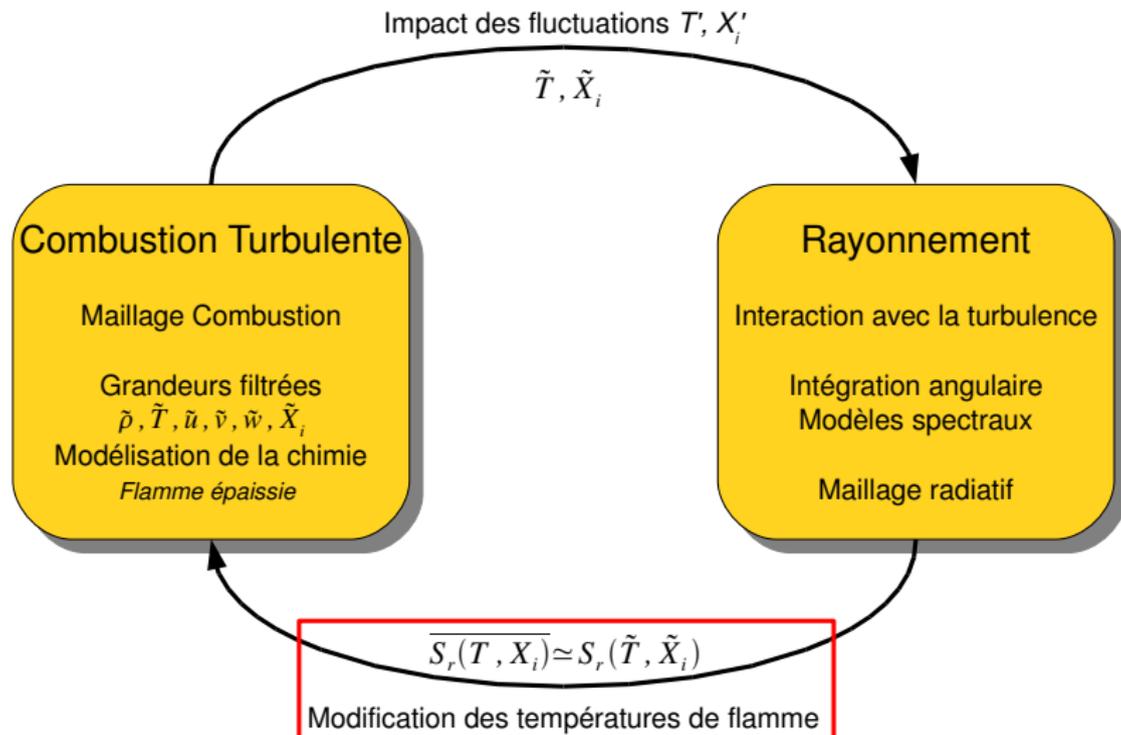
- Fréquence de couplage
- Configuration et paramètres de calcul
- Loi de paroi
- Mécanismes de couplage

3 Couplage combustion-rayonnement en LES

- Influence rayonnement → combustion
- Influence turbulence → rayonnement

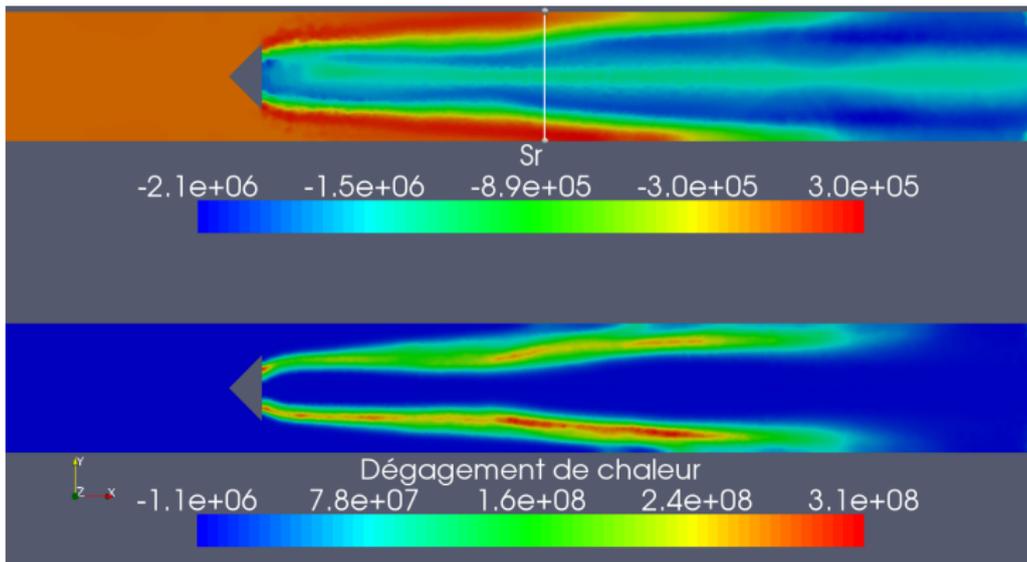
4 Conclusions et Perspectives

Influence rayonnement → combustion



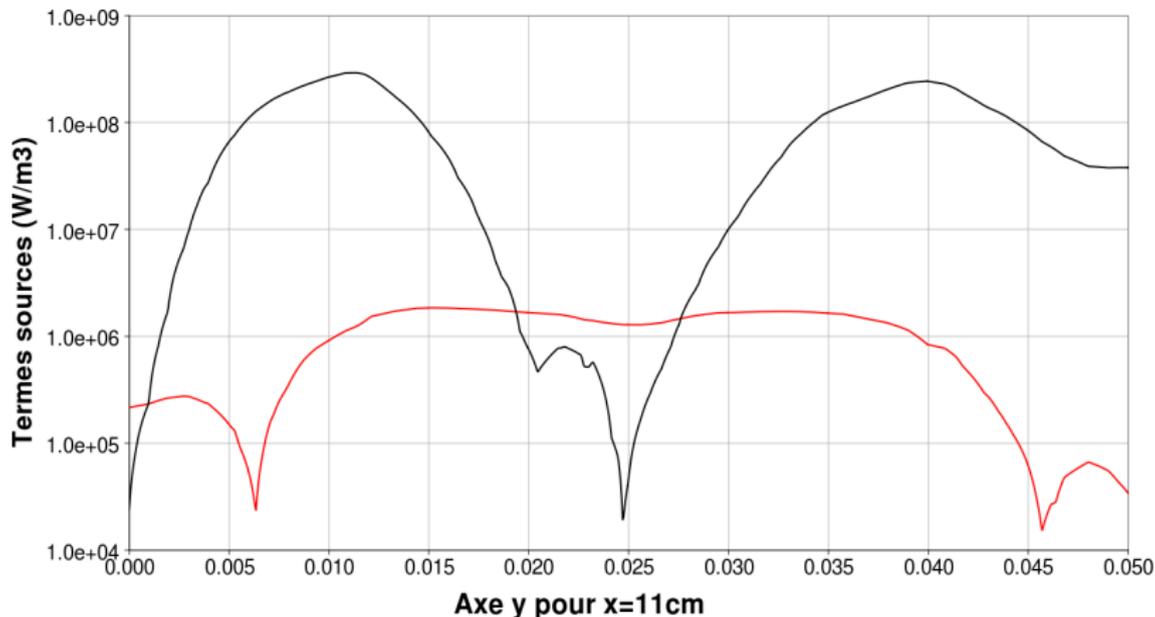
Couplage rayonnement-combustion :

- impact sur l'énergétique,
- impact sur la chimie,
- impact sur la dynamique de l'écoulement.



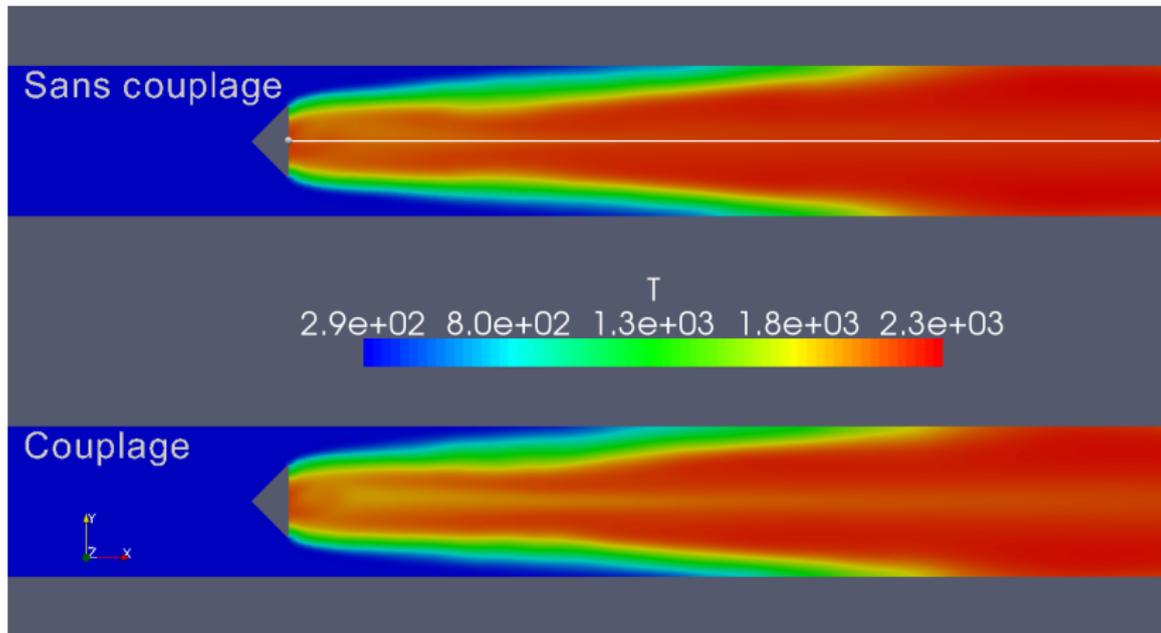
Impact énergétique

Pertes radiatives $\sim 2\%$ de l'énergie chimique.

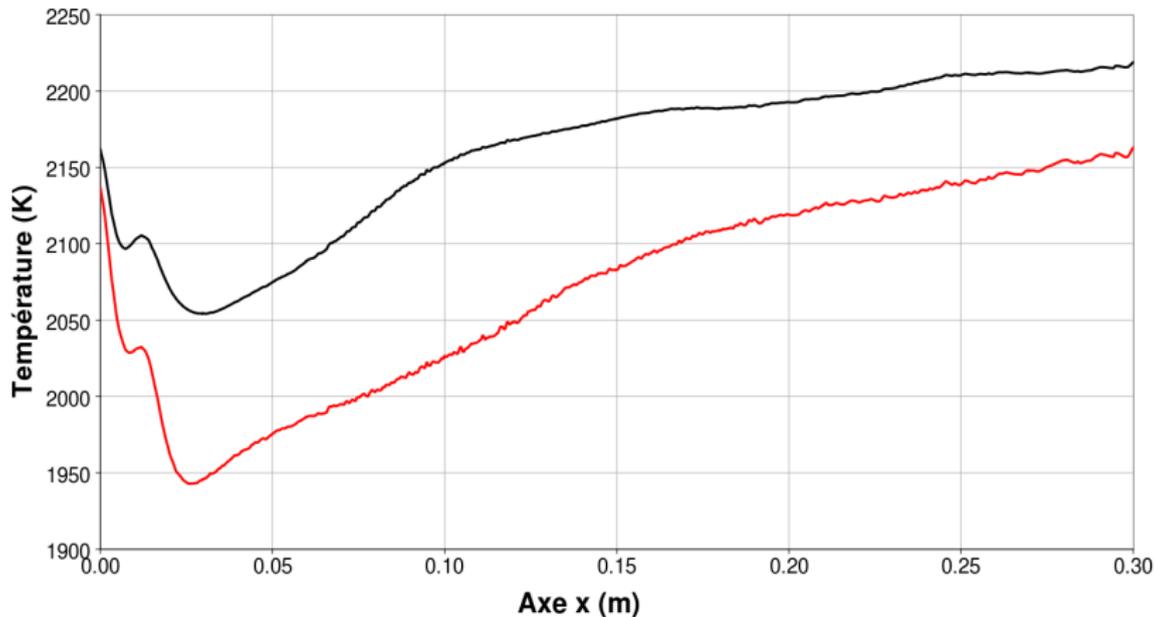


— : Chimique, - : Radiatif

Impact énergétique

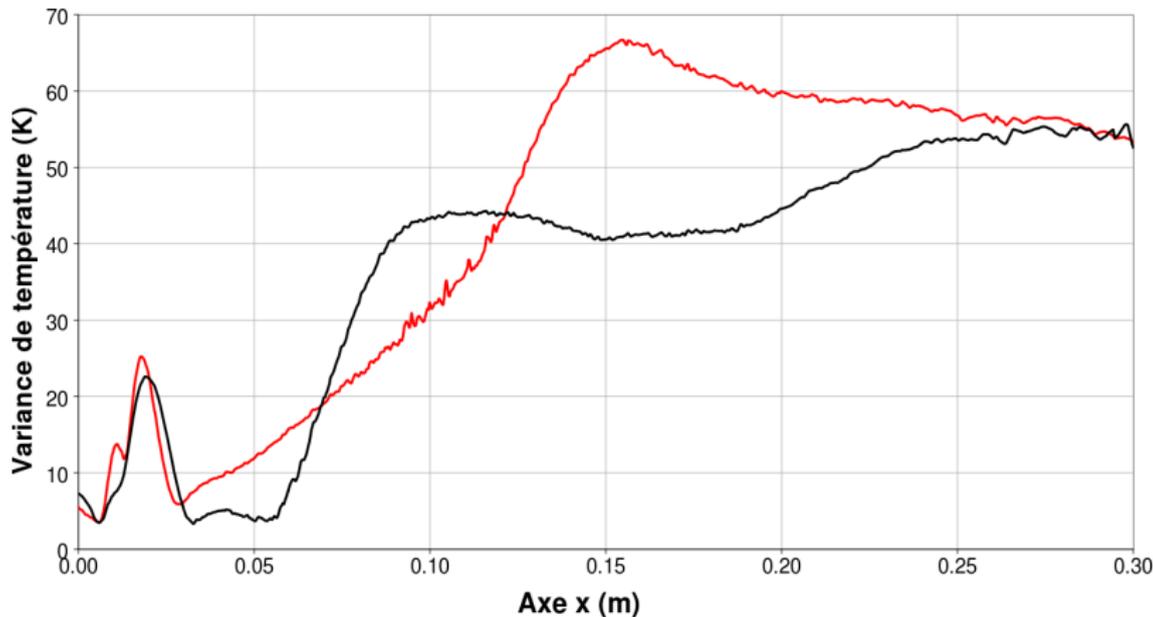


Impact énergétique



— : sans rayonnement, — : avec rayonnement

Impact énergétique

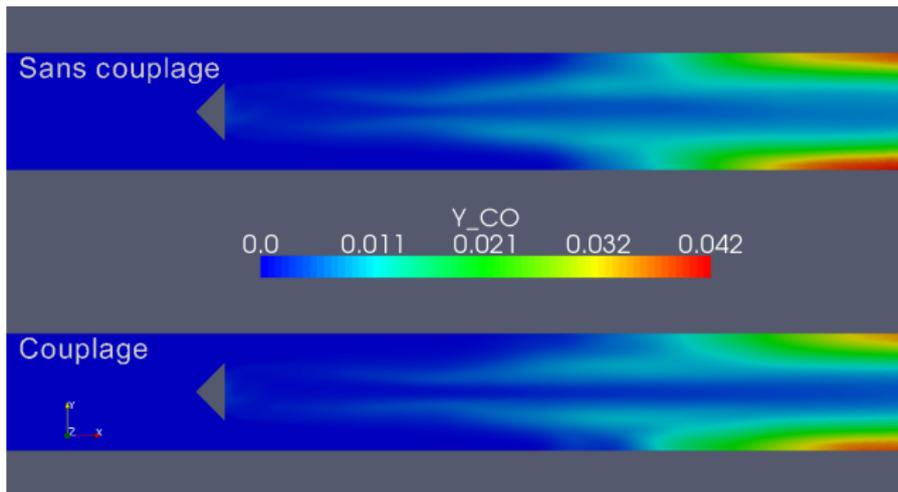


— : sans rayonnement, — : avec rayonnement

Impact chimique

Modification des pics de température : **impact sur la chimie**

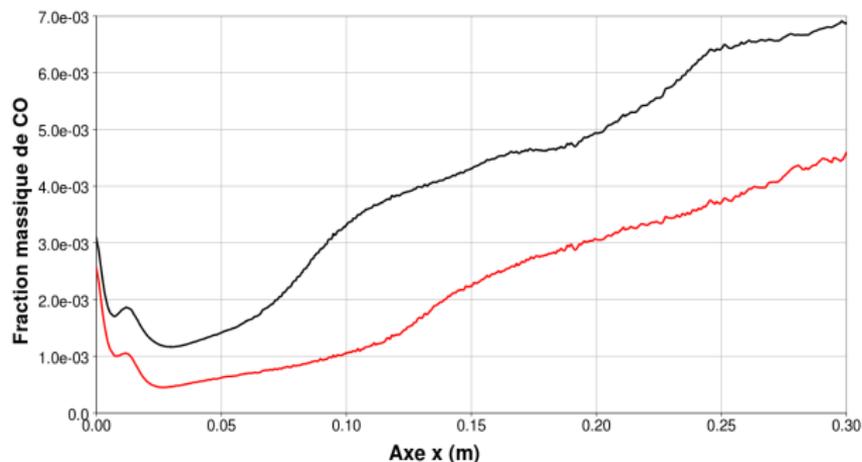
- Impact négligeable sur H_2O , CO_2 .
- **Fraction totale de CO diminuée de 20%** si le rayonnement est considéré.



Impact chimique

Modification des pics de température : **impact sur la chimie**

- Impact négligeable sur H_2O , CO_2 .
- **Fraction totale de CO diminuée de 20%** si le rayonnement est considéré.



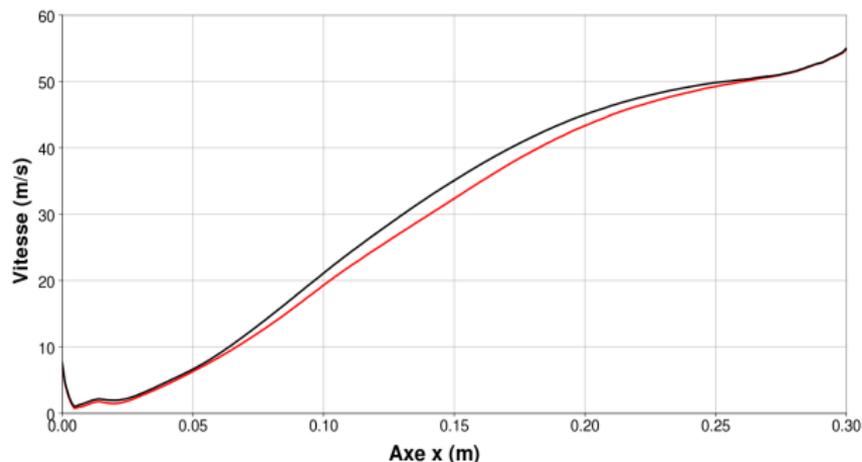
— : sans rayonnement
— : avec rayonnement

Impact dynamique

Couplage avec la dynamique \rightarrow **indirect** :

- par l'**équation d'état** des gaz parfaits
refroidissement \rightarrow *compression*,
- diminution de la **viscosité** des gaz avec T.

Effet faible sur la **dynamique moyenne** de l'écoulement.



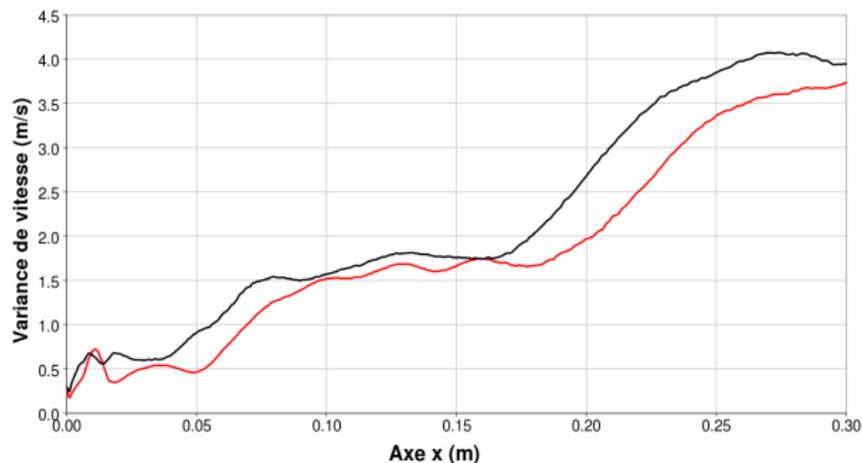
— : sans rayonnement
— : avec rayonnement

Impact dynamique

Couplage avec la dynamique \rightarrow **indirect** :

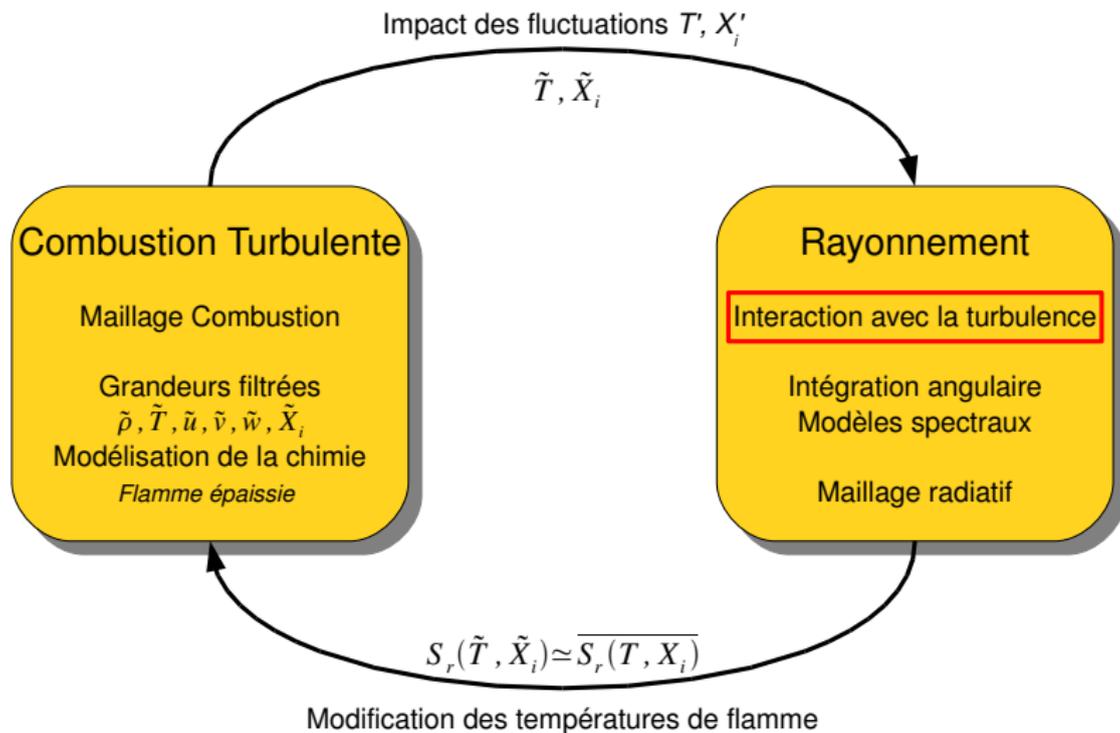
- par l'**équation d'état** des gaz parfaits
refroidissement \rightarrow *compression*,
- diminution de la **viscosité** des gaz avec T.

Effet faible sur la **dynamique moyenne** de l'écoulement.



— : sans rayonnement
— : avec rayonnement

Influence turbulence → rayonnement



Couplage turbulence-rayonnement

Interaction rayonnement-turbulence dans la moyenne temporelle de l'équation de l'énergie :

$$\langle S_r(T, X_i) \rangle \neq S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$$

avec

$$X = \langle X \rangle + X''$$

X'' : fluctuations à toutes les échelles.

Le terme source se décompose comme :

$$\langle S_r(T, X_i) \rangle = \underbrace{4\sigma \times \kappa_P(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)}_{\text{Quantités moyennes}} \cdot \langle T \rangle^4 \times \underbrace{R_{\kappa_P}(R_{T^4} + R_{I_b})}_{\text{Corrélations}}$$

$$- \int_0^\infty \underbrace{\langle \kappa_\nu \rangle \cdot \langle G_\nu \rangle}_{\text{Quantités moyennes}} + \underbrace{\langle \kappa_\nu'' G_\nu'' \rangle}_{\text{Corrélation}} d\nu$$

Études RANS

Fluctuations **à toutes les échelles** X'' par rapport à $\langle T \rangle$ et $\langle \kappa \rangle$:

- **+ 50 à 300%** sur l'émission radiative (Gore and Faeth, 1986, 1988 ; Sivathanu and Kounalakis, 1990),
- **+ 40%** sur les flux aux parois (Li and Modest, 2003; Coelho, Teerling and Roekaerts, 2003).

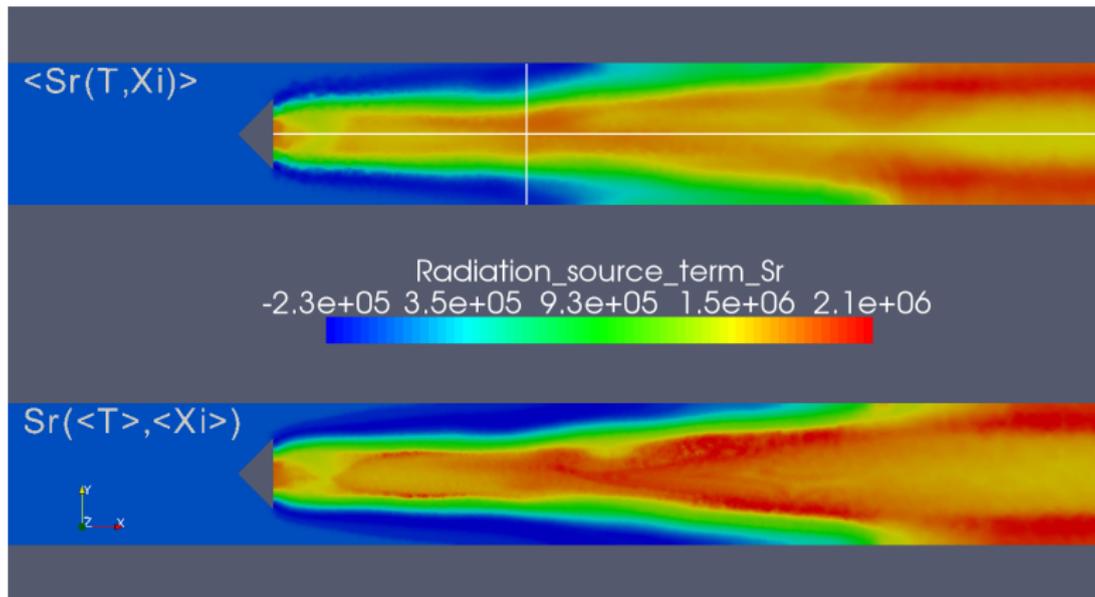
Corrélations temporelles

- A modéliser en RANS :
 - terme d'émission : pdf, Taylor . . . ,
 - aucun modèle pour $\langle \kappa''_{\nu} G''_{\nu} \rangle$!!
- Calculées en LES à partir des fluctuations résolues : pas de modèle nécessaire.
 \Rightarrow Intérêt du couplage instationnaire pour le rayonnement.

Étude de l'interaction rayonnement-turbulence en SGE

A partir des fluctuations résolues en SGE

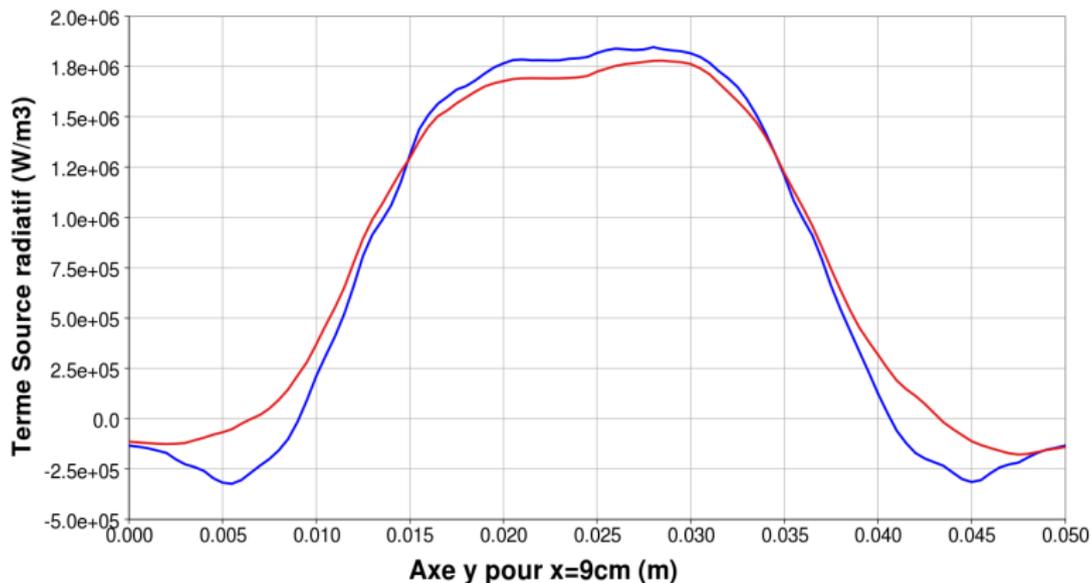
\rightarrow moyennes temporelles $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ et $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$



Étude de l'interaction rayonnement-turbulence en SGE

A partir des fluctuations résolues en SGE

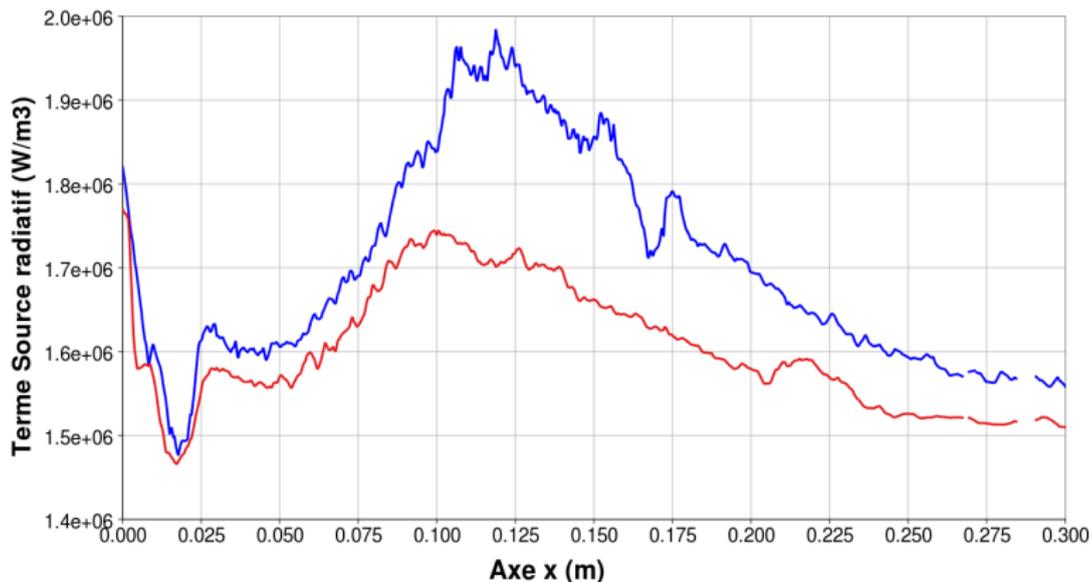
\rightarrow moyennes temporelles $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ et $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$



Étude de l'interaction rayonnement-turbulence en SGE

A partir des fluctuations résolues en SGE

\rightarrow moyennes temporelles $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ et $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$



Étude de l'interaction rayonnement-turbulence en SGE

A partir des fluctuations résolues en SGE

\rightarrow **moyennes temporelles** $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ et $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$

- La turbulence augmente ($\leq +170\%$) ou diminue ($\geq -30\%$) S_r localement,
- Les pertes radiatives totales augmentent de 6% avec turbulence,
- Toutes les corrélations temporelles peuvent être calculées :

$$R_{\kappa_P}, R_{T^4}, R_{I_b}, \langle \kappa''_{\nu} G''_{\nu} \rangle$$

\Rightarrow SGE permet de calculer correctement $\langle S_r \rangle$ sans modéliser les corrélations temporelles.

1 Modélisation de la combustion et du rayonnement

- Modélisation de la combustion
- Modélisation du rayonnement

2 Mise en place d'un couplage

- Fréquence de couplage
- Configuration et paramètres de calcul
- Loi de paroi
- Mécanismes de couplage

3 Couplage combustion-rayonnement en LES

- Influence rayonnement \rightarrow combustion
- Influence turbulence \rightarrow rayonnement

4 Conclusions et Perspectives

Faisabilité du couplage

- Calcul radiatif à partir de solutions SGE **sans modèle sous-maille**.
- Loi de parois non modifiées.
- Contrainte forte sur le **temps de calcul**
 - **Fréquence de couplage**,
 - **Réduction du temps** de calcul radiatif : modèle spectral, maillage.

Faisabilité du couplage

- Calcul radiatif à partir de solutions SGE **sans modèle sous-maille**.
- Loi de parois non modifiées.
- Contrainte forte sur le **temps de calcul**
 - **Fréquence de couplage**,
 - **Réduction du temps** de calcul radiatif : modèle spectral, maillage.

Pertinence du couplage

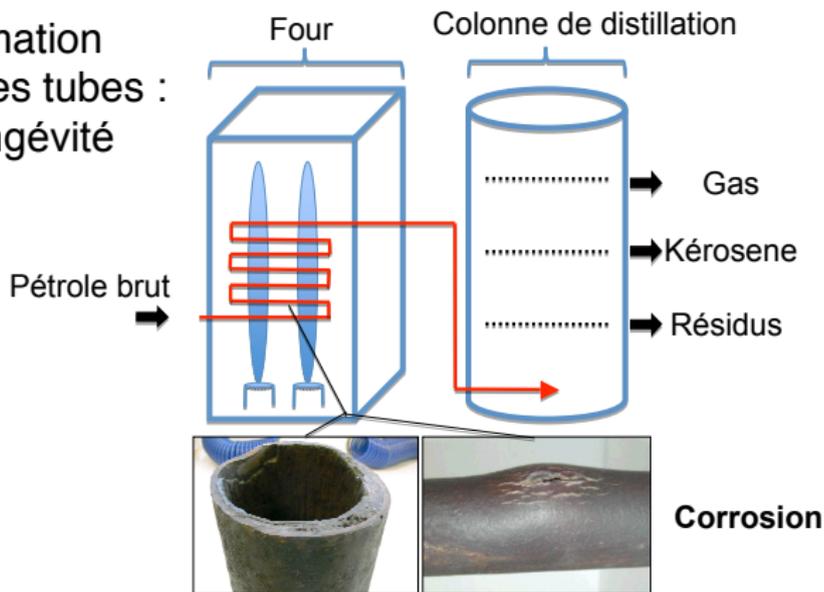
⇒ Prise en compte du rayonnement dans la combustion turbulente instationnaire d'**une flamme de laboratoire** :

- Modification des **pics de température $\sim 100 K$** ,
- Impact important sur les espèces mineures, **diminution de 20% pour le CO**,
- Impact **faible sur la dynamique moyenne**,
- Calcul correct de $\langle S_r \rangle$ et des **corrélations temporelles**.

Flammes à grandes échelles

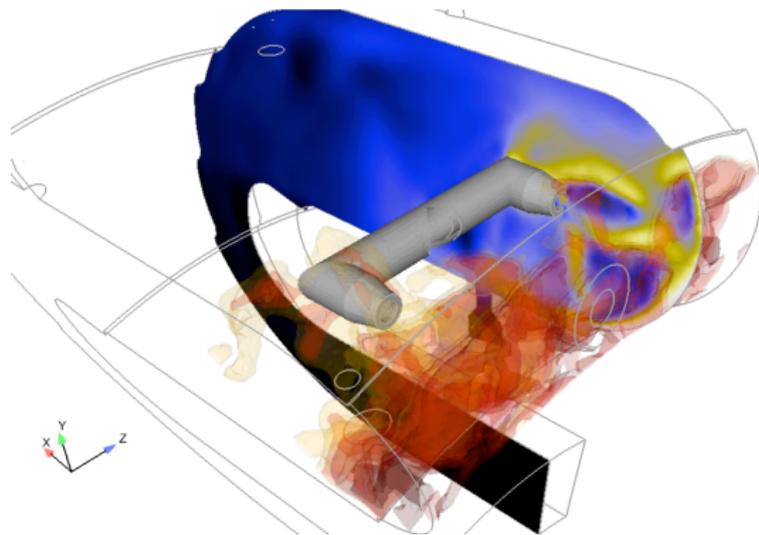
(Pedot, 2009-2012)

Prévenir la formation
de coke dans les tubes :
améliorer la longévité



Couplage multi-physique sur configuration industrielle

Jorge Amaya (2006 - 2010)



Couplage combustion/thermique/rayonnement dans une chambre d'hélicoptère à flux inversé.

Merci pour votre attention ...