



Activité liée à la modélisation des propriétés spectrales des gaz

Nom : Poitou
 Prénom : Damien
 Adresse : CERFACS – Équipe CFD (Combustion)
 42 avenue Gaspard Coriolis
 31057 Toulouse
 Téléphone : 05 61 19 31 90
 Courriel : poitou@cerfacs.fr

Contexte

La simulation de la combustion turbulente connaît un nouvel essor avec l'introduction de la Simulation aux Grandes Échelles (SGE) qui permet de prédire l'évolution instationnaire de l'écoulement réactif turbulent. La prise en compte du rayonnement dans ce type de simulation permet d'améliorer le caractère prédictif des résultats essentiellement sur le calcul des flux aux parois et sur les prédictions de polluants (NO_x, suies). La prise en compte du couplage entre le rayonnement et la combustion turbulente permet également d'étudier de façon fondamentale les mécanismes d'interaction entre ces phénomènes comme l'interaction rayonnement-turbulence [2], les lois de parois utilisées pour modéliser la couche limite turbulente [5].

Différentes simulations couplées ont d'ores et déjà été réalisées au CERFACS (Fig. 1) : à 2 codes pour un couplage combustion-rayonnement dans un premier temps [3] puis à 3 codes avec un couplage combustion-rayonnement-conduction [6].

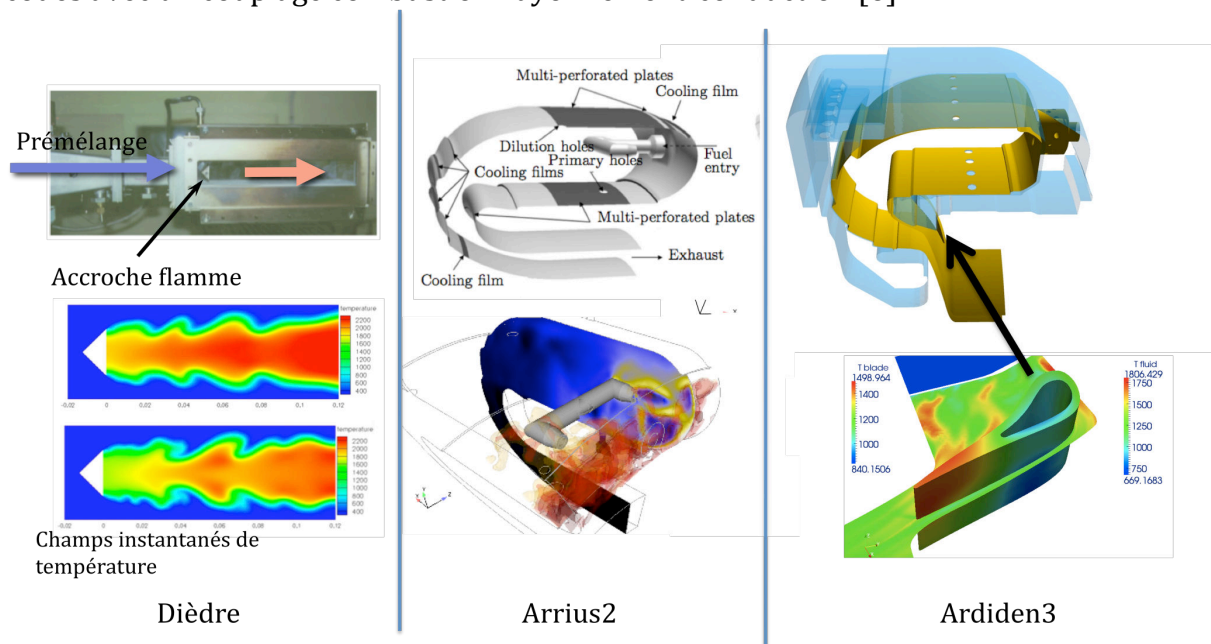


Fig. 1 : Exemples de configuration utilisées pour des couplages combustion-rayonnement et combustion-rayonnement-conduction.

La mise en place de ces calculs couplés a requis de développer une méthodologie de calcul pour évaluer l'impact des paramètres physiques et numériques. Il a été montré que sur des applications de type moteurs aéronautiques, le modèle spectral est un paramètre clef sur la précision et les temps du calcul radiatif [1]. Utilisé conjointement avec la méthode aux ordonnées discrètes (DOM), les modèles à bandes étroites (SNBcK) fournissent des solutions précises mais leur coût de calcul demeure trop important pour envisager un couplage instationnaire.

Une première étude [4] a permis de montrer qu'il est possible d'utiliser des approches globales en conservant une précision acceptable sur les applications de type moteur. Le premier modèle utilisé (*FS-SNBcK* ou *SNB-FSK*) est basé sur une hypothèse de milieu homogène, bien vérifiée du point de vue radiatif si les gaz frais ne contiennent pas de gaz absorbants. L'utilisation de ce modèle a montré qu'il ne permettait pas de réduire le temps de calcul de façon aussi importante que le modèle en somme pondérée de gaz gris (*WSGG*). Le temps de calcul des coefficients d'absorption devient prépondérant par rapport à l'intégration géométrique. Une technique de tabulation a été développée pour pré-calculer les coefficients d'absorption en fonction de 4 paramètres (température et fractions molaire de H₂O, CO₂, CO ; hypothèse de pression constante). Cette technique permet d'atteindre des temps de calcul comparables aux modèles de type *WSGG* mais avec une précision accrue, par exemple en tenant compte des propriétés locales de mélange.

L'utilisation du modèle SNB-FSK basé sur une hypothèse de milieu homogène donne de moins bons résultats dans des applications optiquement plus épaisses de type four. Le modèle global qui utilise l'hypothèse de corrélation et construit à partir des propriétés des bandes étroites (*SNB-FSCK*) permet d'améliorer la précision des résultats en introduisant un **état de référence** et une **température de pondération**. Selon les 2 paramètres choisis, plusieurs appellations apparaissent dans la littérature : *ADF*, *SLW*,... La question se pose quant à la façon optimale ou la démarche à adopter dans le choix de ces paramètres. La technique de tabulation développée pour le modèle homogène s'applique très bien sur le modèle global corrélé laissant supposer qu'elle puisse s'appliquer de façon relativement générique. Ce modèle a été appliqué sur des géométries décrivant des fours de raffinerie d'une dizaine de mètres en donnant des résultats avec une précision comparable au modèle à bandes étroites.

Questions ouvertes

Le modèle global tabulé en K corrélés apporte une réponse par rapport à la problématique du couplage en combustion dans des applications allant des moteurs aux fours. Toutefois la question de la modélisation spectrale reste ouverte.

Dans les calculs radiatifs effectués en combustion, les espèces rayonnantes considérées sont seulement les produits donc fortement corrélées à la température. Cette approche a pour conséquence de rendre le milieu assez homogène pour le rayonnement.

La présence de gaz absorbants dans les gaz frais demeure une question complètement ouverte : tant pour l'impact du rayonnement sur la combustion que pour la modélisation du rayonnement elle-même. Elle même pourrait remettre en question la validité de l'hypothèse de corrélation appliquée sur l'ensemble du spectre en raison des forts

gradients de température entre gaz brûlés et gaz frais. Les espèces rayonnantes des gaz frais peuvent être liées à :

- La prise en compte des effets d'absorption des carburants carbonés comme le méthane ;
- des cycles de cogénération ou de réinjection des gaz brûlés dans le système d'injection (CO₂ froid mélangé au carburant).

Il est donc indispensable de maintenir la veille sur les nouvelles approches comme le modèle *SLMB* dont la caractéristique principale est de re-questionner l'hypothèse de corrélation. Il faut également mettre en place des outils permettant de construire les paramètres de bandes étroites d'autres espèces rayonnantes.

Références :

- [1] Poitou, D.; El Hafi, M. & Cuenot, B. Analysis of radiation modeling for turbulent combustion : development of a methodology to couple turbulent combustion and radiative heat transfer in LES *Journal of Heat Transfer*, **2010**
- [2] Poitou, D.; Hafi, M. E. & Cuenot, B. Diagnosis of Turbulence Radiation Interaction in Turbulent Flames and Implications for Modeling in Large Eddy Simulation *Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences*, **2007**, 31, 371-381
- [3] Poitou, D. Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente *Institut National Polytechnique de Toulouse*, **2009**
<http://ethesis.inp-toulouse.fr/archive/00001019/01/poitou.pdf>
- [4] Poitou, D.; Amaya, J.; Bushan Singh, C.; Joseph, D.; Hafi, M. E. & Cuenot, B. Validity limits for the global model FS-SNBcK for combustion applications *Proceedings of Eurotherm83 -- Computational Thermal Radiation in Participating Media III*, **2009**
- [5] Amaya, J. Unsteady coupled convection, conduction and radiation simulations on parallel architectures for combustion applications *CERFACS*, **2010**
- [6] Amaya, J.; Cabrit, O.; Poitou, D.; Cuenot, B. & Hafi, M. E. Unsteady coupling of Navier-Stokes and radiative heat transfer solvers applied to an anisothermal multicomponent turbulent channel flow *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **2010**, 111, 295-301