

Méthode aux Ordonnées Discrètes et calcul de contrôle par la méthode de Monte Carlo pour la simulation des transferts radiatifs en combustion

P. PEREZ*, **D. JOSEPH***, **M. EL HAFI***, **B. CUENOT****

* École des Mines d'Albi Carmaux, Campus Jarlard, route de Teillet, Albi, France
e-mail : patrice.perez@enstimac.fr

** C.E.R.F.A.C.S. 42, Av. Gaspard Coriolis, Toulouse, France

Résumé – La prise en compte du transfert radiatif en combustion reste une opération coûteuse surtout lorsque sont mis en jeu des géométries complexes et des spectres de gaz comportant plusieurs millions de raies. Nous proposons dans cet article l'utilisation conjointe de deux méthodes : l'une est basée sur la MOD (Méthode aux Ordonnées Discrètes) pour la production de solutions rapides et couplables aux codes de combustion, et la seconde sur la MCM (Méthode de Monte Carlo), méthode de référence qui permet de valider les approximations des MOD notamment en ce qui concerne le maillage angulaire et spatial. La mise en œuvre est présentée dans le cas d'une chambre de combustion réelle.

1 Introduction

La simulation complète de la combustion reste très coûteuse lorsqu'elle implique le traitement de phénomènes couplés comme la chimie détaillée, les calculs d'écoulements et la thermique dans le cas de géométries multidimensionnelles. La prise en compte détaillée des transferts radiatifs devient cruciale lorsqu'il s'agit de prédire des concentrations d'espèces mineures de type oxydes d'azote, des fractions volumiques de suie, ou des flux aux parois. Cependant, un calcul très précis de transfert radiatif nécessite des temps de calcul prohibitifs, ce qui freine considérablement la possibilité d'effectuer des calculs couplés combustion-rayonnement. Ceci est d'autant plus bloquant lorsqu'il s'agit de calculs de combustion instationnaire où le couplage complet devient nécessaire. De nombreux travaux en combustion mentionnent l'hypothèse de milieu optiquement mince. Dans ce cas, l'approximation qui est faite est justifiée pour des flammes de faibles dimensions induisant de faibles épaisseurs optiques mais devient inutilisable pour le traitement de flammes lumineuses de dimensions importantes. Un récent de travail de benchmark [1], dans le cadre de la simulation de feux, a été mené où plusieurs méthodes de calcul de transfert radiatif sont utilisées et comparées : la Méthode des Moments [2], la MOD [3, 4, 5], et la Méthode des Transferts Discrètes [6]. La précision de ces méthodes approchées a été évalué par comparaison aux méthodes de référence de type Monte Carlo [7, 8, 9, 10] ou Tracé de Rayons [11]. Ces deux méthodes sont capables de fournir des solutions très précises mais restent très coûteuses et ne peuvent pas à l'état actuel de leur développement, être couplées à la CFD (Computational Fluid Dynamics). C'est dans ce sens que l'objectif principal de cet article est de présenter une utilisation conjointe de la paire MOD/MCM. L'avantage de cette démarche est double : d'une part, elle permet de valider la solution obtenue par la MOD et d'autre part d'évaluer le degré de précision de la MOD à l'aide de la MCM (nombres de directions, schéma de discrétisation spatial) pour une application donnée. Dans une première partie, nous décrivons brièvement la formulation mathématique sur laquelle sont basées les deux méthodes

MOD et MCM. Dans une deuxième partie, nous présentons un cas de calcul de chambre de combustion réelle, induisant une géométrie complexe, décrite par un maillage non-structuré. Les solutions de combustion sont fournies par un code de calcul basé sur la Simulation aux Grandes Echelles et développé au CERFACS [12].

1.1 Méthode aux Ordonnées Discrètes (MOD)

1.1.1 Discrétisation angulaire

Pour la MOD, le code développé s'appelle DOMASIUM [4, 1], initialement conçu pour la simulation du transfert radiatif couplé à la combustion et adapté à des maillages non structurés. Le calcul du terme source radiatif en un point donné est basé sur la discrétisation de l'équation de transfert radiatif (ETR) sur un nombre fini N_{dir} de directions $\mathbf{s}_i(\mu_i, \eta_i, \xi_i)$ respectivement associées à un poids w_i , et où μ_i, η_i, ξ_i est un ensemble de cosinus directeurs. Une récente étude de Koch et Becker [13] compare différents types de quadratures angulaires et recommande la quadrature LC_{11} . La quadrature S_4 qui assure un bon compromis entre précision et temps de calcul est utilisée dans la présente étude, ainsi que la quadrature LC_{11} .

1.1.2 Discrétisation spatiale pour des maillages hybrides

L'ETR est résolue pour chaque direction discrète \mathbf{s}_i en utilisant une approche aux volumes finis. L'intégration de l'ETR sur un volume V , limité par une surface Σ , et l'application du théorème de la divergence, conduisent à :

$$\int_{\Sigma} I(\mathbf{s}_i) \cdot \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n} d\Sigma = \int_V (\kappa I_b - \kappa I(\mathbf{s}_i)) dV \quad (1)$$

où $I(\mathbf{s}_i)$ est la luminance dans la direction \mathbf{s}_i , I_b est la luminance du corps noir, et κ et le coefficient d'absorption. $I(\mathbf{s}_i)$ et I_b sont considérées comme constantes sur le volume V , et on fait l'hypothèse que les luminances sur les faces délimitant le volume sont constantes sur chaque face. En notant I_j la luminance moyenne sur la j^{ime} face (prise au centre de la face), $I_{b,P}$ et I_P les luminances moyennes sur le volume V (prises au centre du volume), et en considérant que les faces sont planes et que leurs sommets sont reliés par des segments droits, on obtient :

$$\sum_{j=1}^{N_{face}} I_j(\mathbf{s}_i) \cdot (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j) A_j = \kappa V (I_{b,P} - I_P(\mathbf{s}_i)) \quad (2)$$

où \mathbf{n}_j est la normale sortante pour la face j .

Dans un cas monochromatique, le terme source radiatif S_r est alors donné par :

$$S_r = -\nabla \cdot \mathbf{Q}_r = -\kappa \left(4\pi I_b - \sum_{i=1}^{N_{dir}} w_i I(\mathbf{s}_i) \right) \quad (3)$$

où \mathbf{Q}_r est le vecteur flux radiatif. Pour le calcul de $I(\mathbf{s}_i)$, Ströhle et al. [14] ont proposé un schéma de dérivation spatiale basé sur un schéma de flux moyen très utilisé dans le cas de maillages hybrides. Il repose sur la formulation suivante :

$$I_P = \alpha \overline{I_{out}} + (1 - \alpha) \overline{I_{in}} \quad (4)$$

où $\overline{I_{in}}$ et $\overline{I_{out}}$ sont respectivement les luminances moyennées sur les faces entrantes et sortantes d'une face. α est une pondération, comprise entre 0 and 1. En remplaçant $\overline{I_{out}}$ obtenue par

l'équation (4) dans l'équation (2) on obtient (pour plus de détails, voir [4]) :

$$I_P = \frac{\alpha V \kappa I_b - \sum_{\substack{j \\ \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j < 0}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j A_j I_j}{\alpha \kappa V + \sum_{\substack{j \\ \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j > 0}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j A_j} \quad (5)$$

Si $\alpha = 0.5$, on obtient le schéma ‘‘Diamond Mean Flux Scheme’’ (**DMFS**) qui sera utilisé dans la suite de cet article et qui est plus précis que le schéma ‘‘Step’’ ($\alpha = 1$) [3].

1.1.3 Propriétés spectrales des gaz

Le coefficient d'absorption κ , fortement dépendant du nombre d'onde ν , est calculé en considérant les espèces rayonnantes suivantes : H_2O , CO_2 et CO . La dépendance spectrale du coefficient d'absorption sera ici représentée par un modèle *SNB-ck* [15, 16, 17]. Le traitement du mélange de gaz est obtenu par le même modèle en suivant la méthode de Liu [17] basée sur la limite optiquement mince. Les calculs radiatifs sont effectués $N_{bandes} \times N_{quad}$ fois de manière indépendantes, où $N_{bandes} = 367$ est le nombre de bandes étroites, de largeur $\Delta\eta = 25 \text{ cm}^{-1}$ considérées. Ces bandes permettent de considérer une région du spectre infrarouge allant de 150 cm^{-1} à 9300 cm^{-1} . $N_{quad} = 5$ représente le nombre de points de quadrature pour chaque bande étroite ; une quadrature de Gauss-Legendre est utilisée. En intégrant cette dimension spectrale, le terme source radiatif est donné par :

$$S_{r,MOD} = - \sum_{i=1}^{N_{bandes}} \sum_{j=1}^{N_{quad}} \Delta\nu_i w_{ij} \kappa_{ij} \left(4\pi \bar{I}_{b,ij} - \sum_{k=1}^{N_{dir}} w_k I_{ij}(\mathbf{s}_k) \right) \quad (6)$$

1.2 Méthode de Monte Carlo formulée en échanges nets (MCM-NEF)

Pour la MCM le code utilisé est MCRAD [1]. Ce code fournit les termes sources radiatifs, ainsi que les erreurs statistiques associées et utilise des techniques de base de la synthèse d'images. Il repose sur une formulation intégrale de l'ETR en puissances nettes échangées (NEF) et satisfait le principe de réciprocité des chemins lumineux [18]. Le modèle de propriétés spectrales utilisé, comme pour le code DOMASIUM, est basé sur un modèle statistique à bandes étroites décrit par le modèle de Malkmus [19]. En considérant par ailleurs un modèle en k-distribution, les puissances nettes échangées entre deux volumes, un volume et une surface, et deux surfaces sont exprimées par :

$$\begin{aligned} \varphi_{V_i \leftrightarrow V_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta\eta_n \int_0^1 dg \int_{V_i} dV_i \int_{V_j} dV_j \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa(g) \times \exp \left[- \int_{l_i}^{l_j} \kappa(g) dl \right] \kappa(g) \Delta I_{b,\eta} \\ \varphi_{V_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta\eta_n \int_0^1 dg \int_{V_i} dV_i \int_{S_j} dS_j \frac{\vec{u} \cdot \vec{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa(g) \times \exp \left[- \int_{l_i}^{l_j} \kappa(g) dl \right] \Delta I_{b,\eta} \\ \varphi_{S_i \leftrightarrow S_j} &= \sum_{n=1}^{n_b} \Delta\eta_n \int_0^1 dg \int_{S_i} dS_i \int_{S_j} dS_j \frac{(\vec{u} \cdot \vec{n}_i)(\vec{u} \cdot \vec{n}_j)}{l_{ij}^2} \times \exp \left[- \int_{l_i}^{l_j} \kappa(g) dl \right] \Delta I_{b,\eta} \end{aligned}$$

où l_{ij} est la longueur entre les points i et j , \vec{n}_i et \vec{n}_j sont les normales aux surfaces aux points i et j , et \vec{u} est le vecteur directeur de i vers j . g représente la cumulée de la fonction de distribution

des coefficients d'absorption dans une bande étroite. Pour des soucis de clarté, la formulation ici tient compte de parois noires pour les conditions aux limites ; les surfaces rencontrées sont considérées comme des corps noirs. La généralisation de cette formulation à des parois grises est décrite dans [9]. Le terme source radiatif pour un volume V_i est alors donné par :

$$S_r = \frac{\sum_{j=1}^{N_s} \varphi(V_i, S_j) + \sum_{j=1}^{N_v} \varphi(V_i, V_j)}{V_i} \quad (7)$$

où N_s est le nombre total de surfaces and N_v the nombre total de volumes.

2 Résultats : application à une chambre de combustion

Le calcul des termes sources radiatifs est effectué par MOD dans une chambre de combustion réaliste (Figure 1) [12]. Les données d'entrée proviennent d'un code de combustion basé sur une approche LES [20]. La configuration présentée est une flamme pré-mélangée stabilisée avec une injection méthane/air à 300 K et une stoechiométrie de 0.7. Les parois sont considérées comme des corps noirs, et adiabatiques. La figure 2 représente le profil de température d'entrée sur une coupe 2D de la chambre de combustion. La figure 3 montre le calcul de termes sources radiatif fait sur cette coupe par la MOD avec une quadrature S_4 . Le même calcul a été effectué avec une quadrature LC_{11} et les différences de résultats entre les deux quadratures sont représentées sur la figure 4 pour une ligne de visée, ainsi que les résultats donnés par la MCM. Nous remarquons que les termes sources radiatifs calculées avec une quadrature S_4 (24 directions) sont sous-estimés près des fronts de flamme (avec une erreur pouvant atteindre 20%). La solution calculée avec une LC_{11} (96 directions) est en meilleur accord avec la solution MCM de référence (3% de différence en moyenne).

3 Conclusion

Le développement de modèles radiatifs approchés rapides est indispensable dans une optique de couplage dans des applications en combustion. Le niveau de précision dépend des approximations faites dans la MOD, et est estimé au moyen d'un calcul de contrôle par une MCM. Cette démarche permet une optimisation des temps de calcul par une paramétrisation de la MOD (quadrature angulaire, schéma de dérivation spatiale) par comparaison avec une solution de référence en différents points sondes. On obtient ainsi les paramètres de la MOD offrant le meilleur compromis entre précision et temps de calcul dans un cas donné. Ce travail a permis d'ouvrir des perspectives intéressantes pour le couplage de calculs radiatifs précis à la combustion ¹.

Références

- [1] Jensen K.A., Ripoll J.F., Wray A. A., Joseph D., and El Hafi M. On various modeling approaches for radiative heat transfer in pool fires. *accepted in Combustion and Flame*, (2006).
- [2] Modest M.F. *Radiative heat transfer*. McGraw-Hill 3rd ed., (2003).
- [3] Liu J., Shang H.M., Chen Y.S., and Wang T.S. Development of an unstructured radiation model applicable for two dimensional planar, axisymmetric and 3-dimensional geometries. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 66 :17–33, (2000).
- [4] Joseph D. and El Hafi M., Fournier R., and Cuenot B. Comparison of three spatial differencing schemes in discrete ordinates method using three-dimensional unstructured meshes. *Int. J. Thermal Sci.*, 44(9) :851–864, (2005).

¹<http://www.em2c.ecp.fr/ACTIVITES/NUMERIQUE/CORAYL/corayl.html>

- [5] Joseph D. *Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, (2004).
- [6] F. C. Lockwood and N.G. Shah. A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. In *Eighteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute*, pages 1405–1409, (1981).
- [7] Perez P. *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 haute température*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, (2003).
- [8] de Lataillade A., Dufresne J.L., El Hafi M., Eymet V., and Fournier R. A net exchange Monte Carlo approach to radiation in optically thick systems. *Jour. of Quant. Spectrosc. and Radiat.Transfer*, 74(5) :563–584, (2002).
- [9] Perez P., El Hafi M., Coelho P.J., and Fournier R. Accurate solutions for radiative heat transfer in two-dimensional axisymmetric enclosures with gas radiation and reflective surfaces. *Numerical Heat Transfer, Part B-Fund.*, 46 :39–63, (2005).
- [10] Tessé L., Dupoirieux F., and Taine J. Monte carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 47 :555–572, (2004).
- [11] Liu F. Numerical solutions of three-dimensional non-grey gas radiative transfer using the statistical narrow-band model. *Jour. Heat transfer*, 121, (1999).
- [12] Roux S., Lartigue G., Poinot T., Meier U., and Bérat. C. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combustion and Flame*, 141 :40–54, (2005).
- [13] Koch R. and Becker R. Evaluation of the Quadrature schemes for the Discrete Ordinates Method. *Lybaert P., Feldheim V., Lemonnier D., Selçuk N. (Eds), Proceedings of Eurotherm73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media, Eurotherm Series 11, Elsevier, Paris, France*, pages 59–74, (2003).
- [14] Strohle J., Schnell U., and Hein K.R.G. A mean flux discrete ordinates interpolation scheme for general coordinates. In *3rd International Conference on Heat Transfer, Antalya*, (2001).
- [15] Soufiani A. and Taine J. 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 . *Int. J. Heat Mass Transfer*, 40(4) :987–991, (1997).
- [16] Liu F., Smallwood G.J., and Gulder O.L. Application of the statistical narrow-band correlated-k method to low-resolution spectral intensity and radiative heat transfer calculations - effects of the quadrature scheme. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 43 :3119–3135, (2000).
- [17] Liu F., Smallwood G.J., and Gulder O.L. 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. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 68 :401–417, (2001).
- [18] J.S.A. Green. Division of radiative streams into internal transfer and cooling to space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 93 :371–372, (1967).
- [19] 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).
- [20] Schonfeld T. and Rudyard. M. Steady and unsteady flows simulations using the hybrid flow solver avbp. *AIAA Journal*, 37(11) :1378–1385, (1999).

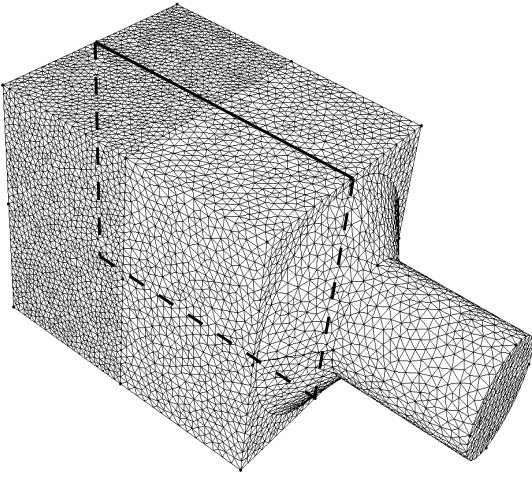


Figure 1 : Maillage de la chambre de combustion.

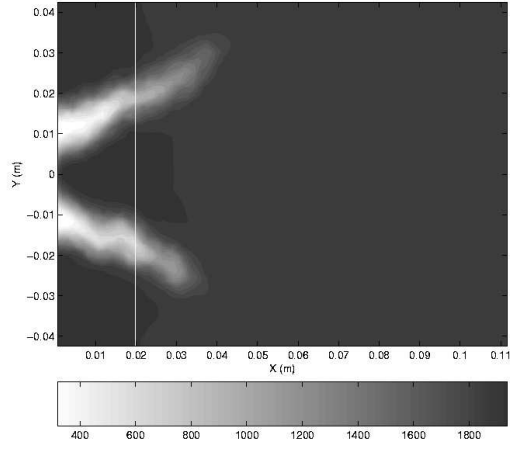


Figure 2 : Profil de températures sur une coupe 2D de la chambre de combustion (K).

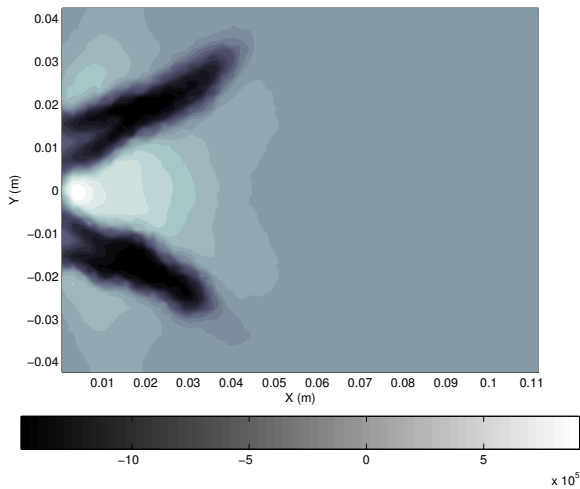


Figure 3 : Profil de termes sources obtenu avec la MOD en utilisant une quadrature S_4 ($W.m^{-3}$).

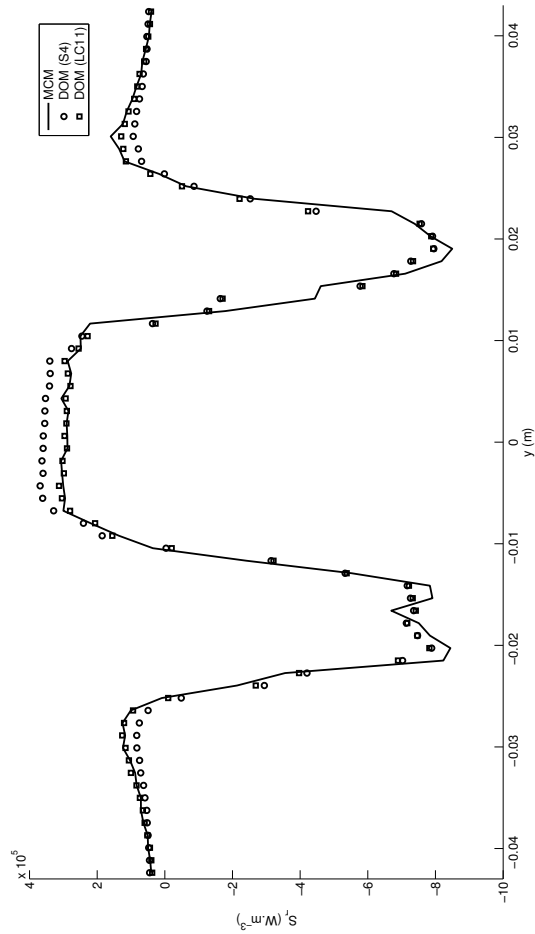


Figure 4 : Termes sources radiatif sur une ligne avec une MOD/ S_4 , une MOD/ LC_{11} , et une MCM.