

Modélisation du rayonnement des fumées de combustion (H_2O , CO_2): Etude du modèle SLWSGG à 3 gaz gris optimisés.

Patricia EVRARD, Véronique FELDHEIM, Paul LYBAERT

Université de Mons, Place du Parc, 20 – 7000 Mons, Belgique
Faculté Polytechnique de Mons, Thermique & Combustion, 56 rue de l'Epargne – B-7000 Mons

Résumé - Lors des simulations des phénomènes internes aux chambres de combustion haute température, généralement lourdes et complexes, le calcul du rayonnement des gaz est souvent tronqué par l'utilisation de modèles simplifiés afin que le temps de calcul reste acceptable. Ce travail vise à évaluer les performances d'un modèle de rayonnement des fumées de combustion dont la précision et le poids en terme de temps de calcul se situeraient entre les modèles "simples" et les modèles plus complexes ou plus lourds. Le modèle étudié est le modèle SLWSGG (« Spectral Line based Weighted Sum of Gray Gases ») de Denison & Webb [1] dans sa version réduite à 3 gaz gris optimisés par gaz réel. Les gaz considérés sont le CO_2 , l' H_2O , et leurs mélanges.

Nomenclature

C	coefficient d'absorption molaire, $m^2/mole$	<i>Symboles grecs</i>
C_{abs}	coefficient d'absorption molaire, $m^2/mole$	ε émissivité d'un gaz
I	intensité radiative, W/m^2	η nombre d'onde, m^{-1}
k	coefficient d'absorption, m^{-1}	ω poids d'un gaz gris
L	longueur caractéristique, m	<i>Indices et exposants</i>
N	densité molaire, $mole/m^3$	b corps noir
P_{atm}	pression atmosphérique, Pa	d dioxyde de carbone
q	flux radiatif, W/m^2	e eau
T	température, K	i espèce gazeuse
x	ordonnée cartésienne, m	j, k gaz gris
y	fraction molaire	

1. Introduction

Le but de notre recherche est de sélectionner et d'évaluer un modèle de rayonnement de gaz présentant un bon compromis entre précision et temps de calcul et qui autorise l'utilisation de n'importe quelle méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif (ETR). Ce modèle sera donc basé sur le calcul du coefficient d'absorption. Le modèle doit également être compatible avec le traitement des parois non grises et donc intégrer les caractéristiques spectrales du rayonnement. Le modèle SLWSGG de Denison & Webb répond, a priori, à ces différents critères. L'objectif est de modéliser l'absorption des mélanges CO_2 - H_2O -air mais les gaz "simples" (CO_2 -air, H_2O -air) font également partie de l'étude.

2. Principe du modèle SLWSGG à 3 gaz gris optimisés

On modélise, grâce à une optimisation, chaque gaz absorbant "i" par 3 gaz gris et ce pour un état thermophysique de référence (T_{ref} , P_{atm} , $y_{i,ref}$) et une gamme de "n" longueurs caractéristiques L_n représentatives du domaine gazeux étudié. L'état de référence correspond à l'état moyen du domaine. La procédure d'optimisation est basée sur la concordance des

valeurs d'émissivités du gaz calculées avec le modèle SLWSGG sur la gamme L_n lorsqu'on utilise, par gaz absorbant, 3 gaz gris optimisés et celles évaluées pour 30 gaz gris non optimisés. Le calcul des émissivités en considérant 30 gaz gris donne les valeurs d'émissivité qualifiées de « vraies ». L'objectif de l'optimisation est de déterminer, pour chaque espèce absorbante, les 3 couples (ω_j, k_j) qui permettent de reproduire au mieux l'émissivité du gaz (éq.1) dans l'état de référence $(T_{ref}, P_{atm}, y_{i,ref})$ pour toute la gamme de longueurs caractéristiques couvrant le domaine. Nous minimisons la somme des erreurs relatives sur l'émissivité pour l'ensemble des longueurs caractéristiques. Nous utiliserons ici une gamme de longueurs caractéristiques couvrant 4 décades avec 5 valeurs par décade.

$$\varepsilon(L_n) = \sum_j \omega_j \cdot (1 - e^{-k_j L_n}) \quad (1)$$

Dans le modèle SLWSGG, les poids (ω_j) et les coefficients d'absorption (k_j) associés aux gaz gris sont déterminés à l'aide d'une fonction F définie sur base du spectre haute résolution du coefficient d'absorption molaire $(C_{abs,j} = k_j/N_i)$. Il s'agit de la fonction de distribution du coefficient d'absorption molaire C_{abs} pondérée par la fonction de Planck. La fonction F (éq.2) est définie pour chaque espèce gazeuse absorbante (CO_2 [2] et H_2O [3]) à la pression atmosphérique. Les variables de cette fonction sont les variables thermophysiques du gaz, la température source, ainsi que le coefficient d'absorption molaire:

$$F(C_{abs}, T_b, T_g, P, Y_i) = \frac{1}{\sigma \cdot T_b^4} \sum_m \int_{\Delta\eta_m(C_{abs}, T_g, P, Y_i)} E_{b,\eta}(\eta, T_b) d\eta \quad (2)$$

Elle représente la fraction de l'énergie du corps noir sur les intervalles spectraux où le coefficient d'absorption molaire $C_{abs,\eta}$ est inférieur à C_{abs} (figure 1). F , fractionnelle, croît donc avec C_{abs} de 0 à 1 de façon monotone.

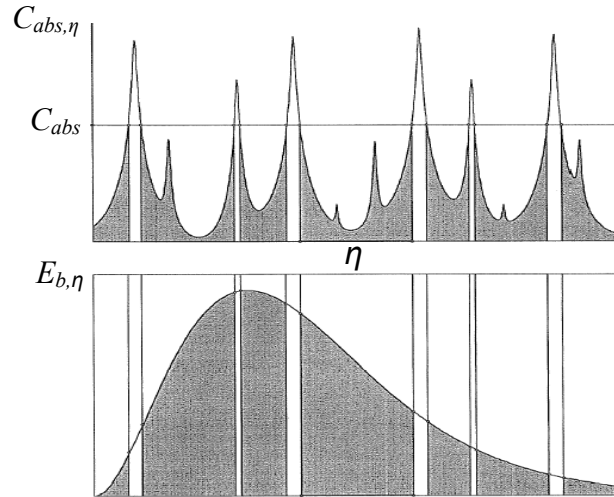


Figure 1 : Parties (en grisé) du spectre d'absorption et de l'énergie du corps noir correspondant à un $C_{abs,\eta}$ inférieur à C_{abs}

Le domaine de $C_{abs,\eta}$ d'une espèce gazeuse est divisé en 3 intervalles discrets représentant les 3 gaz gris. Le poids de chaque gaz gris est calculé par la différence des valeurs de la fonction de distribution F exprimée aux bornes d'un intervalle :

$$\omega_j(C_{abs_j}) = F(\tilde{C}_{abs_j}) - F(\tilde{C}_{abs_{j-1}}) \quad (3)$$

Il représente donc les fractions de l'énergie du corps noir à T_b délimitées par les intervalles spectraux pour lesquels le coefficient d'absorption molaire $C_{abs,\eta}$ évolue entre les 2 bornes du gaz gris considéré (voir figure 2). Notons que la somme des poids des 3 gaz gris et du gaz clair (correspondant aux parties du spectre où l'espèce gazeuse n'absorbe pas) vaut 1.

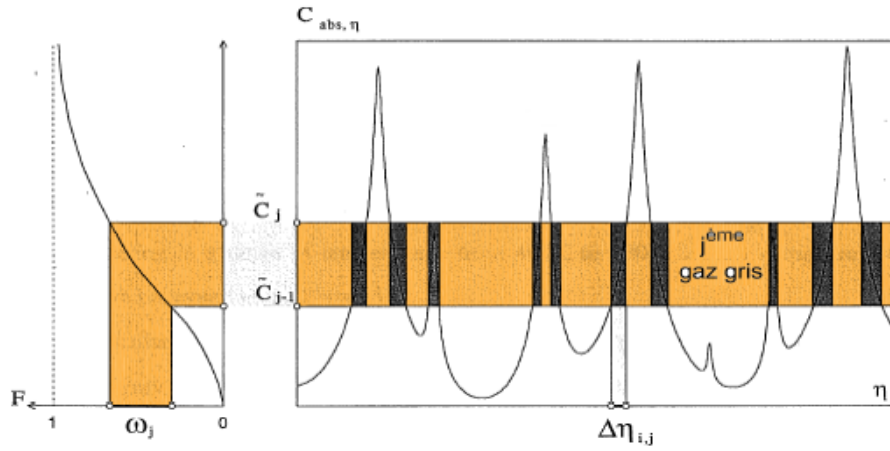


Figure 2 : Représentation du poids du $j^{\text{ème}}$ gaz gris

Pour l'état thermophysique de référence, la procédure d'optimisation détermine les coefficients d'absorption molaires délimitant les plages des gaz gris ainsi que le coefficient d'absorption molaire représentatif d'un gaz gris. (La notation du coefficient d'absorption molaire passera de C_{abs} à C dans le reste du document). Pour un autre état thermophysique (T_g, Y_i), les coefficients d'absorption molaires (C_j), caractérisant la discrétisation du spectre d'absorption du gaz en 3 gaz gris, seront déterminés par l'égalisation de la fonction F entre cet état et l'état de référence en maintenant la température source à $T_{b,ref}$ (éq.4 : dépendance implicite de C_j) ce qui permet de tenir compte de façon satisfaisante des effets de la non-isothermie et de la non-homogénéité du gaz. Cette approche est similaire à celle des $c-k$ (hypothèse des k -corrélés [4]) mais elle tient de plus compte de la variation de la fonction de Planck sur l'entièreté du spectre.

$$F(C_j, T_{b,ref}, T_g, P, Y_i) = F(C_{j,ref}, T_{b,ref}, T_{g,ref}, P, Y_{i,ref}) \quad \text{Obtention des } C_j \text{ pour } (T_g, Y_i) \quad (4)$$

Les 3 poids et les 3 coefficients d'absorption des gaz gris associés à un autre état thermophysique (température et/ou fraction molaire) sont ainsi déduits du résultat de l'optimisation à l'état de référence, ils ne font donc pas l'objet d'une autre optimisation qui serait relativement plus coûteuse en temps de calcul. L'ETR sera résolue pour chaque gaz gris:

$$\frac{dI_j}{ds} = -k_j \cdot I_j + \omega_j \cdot k_j \cdot I_b \quad \text{avec} \quad I = \sum_{j=1}^4 I_j \quad (\text{hypothèse: pas de scattering}) \quad (5)$$

Les mélanges

Pour modéliser les mélanges de 2 gaz absorbants, l'approche "directe" développée par Denison & Webb en 1995 [5] a été choisie. Les poids et coefficients d'absorption des gaz gris du mélange des 2 espèces sont déterminés par la combinaison de leurs spectres individuels en supposant qu'ils sont non corrélés. Les coefficients d'absorption du mélange s'exprimeront par : $k_{mél,jk} = N_d \cdot C_{d,j} + N_e \cdot C_{e,k}$ et leurs poids par $\omega_{mél,jk} = \omega_{d,j} \cdot \omega_{e,k}$. Le mélange présente ainsi 16 poids et 16 coefficients d'absorption (3 gaz gris + 1 gaz clair)², la somme des poids vaut 1.

La procédure d'optimisation double alors le nombre de ses paramètres car les spectres individuels d'absorption, représentés chacun par 3 gaz gris (+ 1 gaz clair), sont combinés pour figurer le comportement du mélange. Les poids $\omega_{mél,jk}$ représentent la fraction de l'énergie du corps noir dans les parties du spectre où le coefficient d'absorption molaire représentatif est $C_{e,k}$ pour l' H_2O et $C_{d,j}$ pour le CO_2 . L'ETR est modifiée comme suit (l'indice "mél" est éliminé pour plus de lisibilité):

$$\frac{dI_{jk}}{ds} = -k_{jk} \cdot I_{jk} + \omega_{jk} \cdot k_{jk} \cdot I_b \quad \text{avec} \quad I = \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^4 I_{jk} \quad (6)$$

3. Nouvelles corrélations

Modest M., Mehta R. et Singh V. [6] [7] ont établi de nouvelles corrélations pour le CO_2 et l' H_2O à partir des bases de données spectroscopiques CDSD-1000 (2003) et HITEMP (2000). Celles de Denison & Webb avaient été établies à partir de la base de données HITRAN (1992) qui présente des lacunes au niveau des "hotlines". Les calculs seront réalisés à l'aide des nouvelles corrélations ainsi qu'avec les précédentes à des fins de comparaison.

4. Résultats

Le modèle SLWSGG à 3 gaz gris optimisés a été testé sur un grand nombre de problèmes monodimensionnels (milieu gazeux entre 2 murs parallèles) tirés du travail de Martin Denison [8]. Deux méthodes de résolution de l'ETR sont utilisées dans cette étude: la méthode à 2 flux (Schuster-Schwarzschild approximation) et la méthode des Ordonnées Discrètes avec une quadrature S20. Nous avons choisi de présenter ici 3 cas monodimensionnels issus du travail de Denison. Nous tracerons pour ceux-ci le profil des termes sources et déterminerons le flux net à la paroi froide. Nos résultats seront comparés à ceux de Denison (profils numérisés). Denison résout l'ETR via la méthode des ordonnées discrètes (DO) en utilisant une discrétisation S20 de l'angle 4π . Comme cas de référence, il exploite le modèle LBL qui globalise quelques 300000 intégrations spectrales.

4.1. CO_2

Le premier cas présenté est celui d'un milieu constitué de 20% (fraction molaire) de CO_2 dans l'air. Ce gaz, à 1000K, est borné par 2 parois grises ($\epsilon = 0.7$) distantes de 10m. La paroi de gauche est à 2000K, celle de droite est à 300K. Le tableau 1 permet de comparer les résultats de l'optimisation entre les 2 corrélations employées (Denison et Webb: "Old", Modest et al: "New"). Les erreurs relatives moyenne (E_{moy}) et maximale (E_{max}) sur le calcul des émissivités y figurent. Le profil obtenu par Denison pour 3 gaz gris optimisés est trop proche du profil LBL pour être reporté sur la figure 3, le flux à la paroi froide vaut 475 kW/m^2 . Les profils issus de nos calculs sont assez similaires et les flux nets obtenus satisfaisants. Les deux corrélations ne donnent pas des résultats très différents.

Old corr.	ω_j	0.3080	0.0573	0.0150	k_j	0.227	10.67	125.6	E_{moy}	0.9%	E_{max}	1.9%
New corr.	ω_j	0.3275	0.0803	0.0351	k_j	0.18	13.67	135.3	E_{moy}	1.9%	E_{max}	2%

Tableau 1 : comparaison des résultats de l'optimisation entre ancienne et nouvelle corrélation

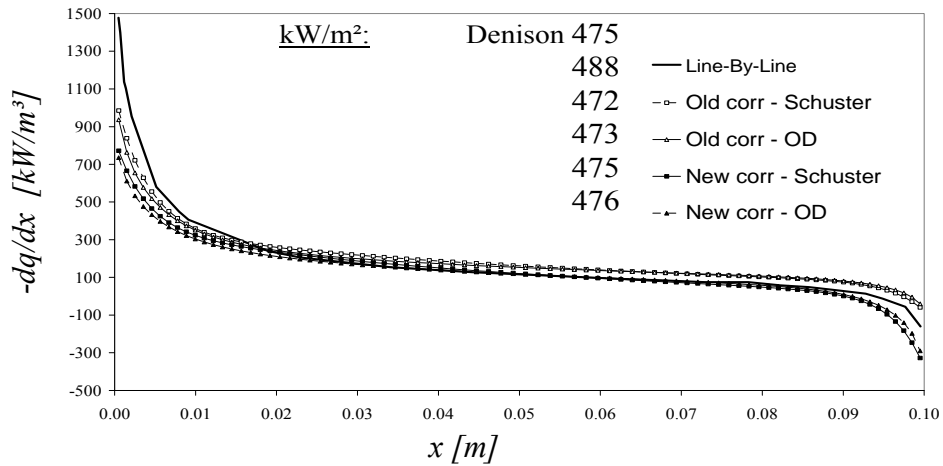


Figure 3 : CO_2 - profils des termes sources et flux nets à la paroi froide

4.2. H_2O

Soit un profil parabolique de température (400K aux parois et 2000K au centre du domaine gazeux). Le gaz est constitué de vapeur d'eau $Y = 0.1$ dans l'air. Les parois sont noires à 400K et distantes de 1m. Denison, pour le modèle SLWSGG à 3 GG optimisés, obtient un flux net à la paroi de 30 kW/m^2 et de 31 kW/m^2 pour le modèle LBL (Fig. 4). Ses profils sont trop proches pour être reportés sur la figure 4. La gamme de longueurs caractéristiques s'étale de 0.001 à 10 m. Les anciennes corrélations donnent des résultats satisfaisants en termes de flux à la paroi froide mais les profils des termes sources sont moins bons au centre du domaine, là où la température est maximale. Les résultats OD sont cependant meilleurs. L'erreur relative moyenne sur l'émissivité est de 0.7%, l'erreur maximale est de 1.29%.

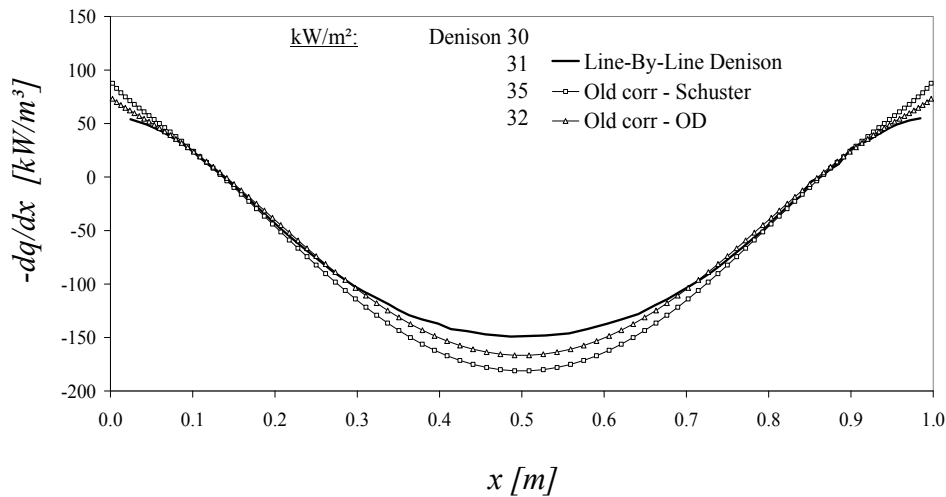


Figure 4 : H_2O - profils des termes sources et flux nets à la paroi froide

4.3. Mélange $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$

Le milieu étudié est constitué de 20 % d' H_2O et de 40 % de CO_2 . Ce gaz est à 1250K, la paroi de gauche à 400K, celle de droite à 1500K. Les parois sont grises ($\epsilon=0.8$) et distantes de 0.1 m. Le profil de termes sources obtenu via un calcul LBL par Denison est reporté sur la figure 5. Denison obtient, par sa modélisation à 3 gaz gris optimisés, un profil de termes sources quasi confondu avec le profil LBL et un flux à la paroi froide identique au flux LBL: 184 kW/m^2 . Le tableau 2 donne les résultats de l'optimisation pour le mélange. Le flux à la

paroi froide et le profil des termes sources obtenus avec les nouvelles corrélations ne sont pas très différents de ceux obtenus avec les anciennes, on obtient 183 kW/m² sauf pour la combinaison "ancienne corrélation et résolution OD" qui donne 184 kW/m². Les différences entre profils ne sont pas très significatives.

Old corr.	ω_{jd}	0.562	0.024	0.009	ω_{je}	0.603	0.24	0.082	E_{moy}	0.03%	E_{max}	0.08%
	k_{jd}	0.086	37.08	143.4	k_{je}	0.041	1.5	8.4				
New corr.	ω_{jd}	0.492	0.093	0.009	ω_{je}	0.797	0.078	0.041	E_{moy}	0.05%	E_{max}	0.14%
	k_{jd}	0.0001	3.97	132.6	k_{je}	0.208	3.37	25.86				

Tableau 2 : comparaison des résultats de l'optimisation entre ancienne et nouvelle corrélation

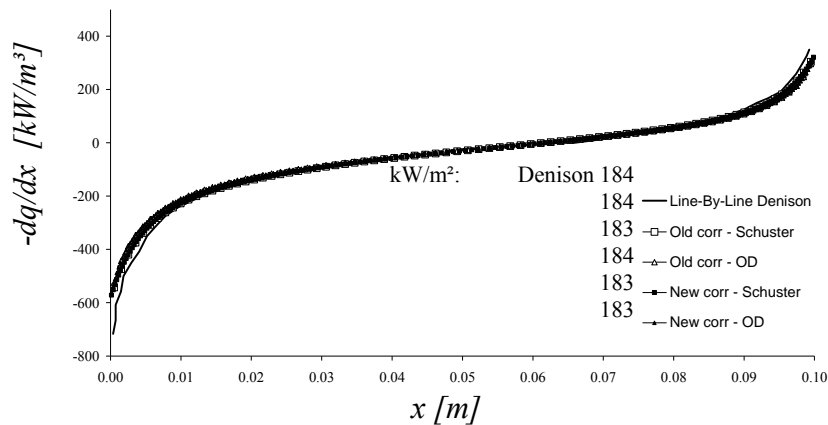


Figure 5 : mélange - profils des termes sources et flux nets à la paroi froide

5. Conclusion

Le modèle SLWSGG semble répondre aux critères souhaités mais l'étude de la procédure d'optimisation doit être approfondie car son résultat conditionne la précision de la méthode.

Références

- [1] M.K. Denison, B.W. Webb, *The Spectra-Line Weighted-Sum of Gray Gases Model-A Review*, Proceedings of the First International Symposium of Radiative Heat Transfer, Turkey. Begell House 193-208, 1996.
- [2] M.K. Denison, B.W. Webb, *Development and application of an absorption-line blackbody distribution function for CO₂*, Int. J. Heat Mass Transfer. Vol.38, n°10, pp. 1813-1821, 1995.
- [3] M.K. Denison, B.W. Webb, *An absorption-line blackbody distribution function for efficient calculation of total gas radiative transfer*, JQSRT Vol. 50, n°5, pp. 499-510, 1993.
- [4] R. Goody, R. West, L. Chen, D. Crisp, *The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres*, JQSRT, vol. 42, n°6, pp. 539-550, 1989.
- [5] M.K. Denison, B.W. Webb, *The spectral-line weighted-sum-of-gray-gases model for H₂O/CO₂ mixtures*, Transactions of the ASME, Vol.117 August 1995, pp. 788-792.
- [6] Michael F. Modest, Varun Singh, *Engineering correlations for full spectrum k-distributions of H₂O from the HITEMP spectroscopic databank*, JQSRT Vol. 93, pp. 263-271, 2005.
- [7] Michael F. Modest, Ranjan S. Mehta, *Full spectrum k-distribution correlations for CO₂ from the CDSD-1000 spectroscopic databank*, Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 47, pp. 2487-2491, 2004.
- [8] M.K. Denison, *A spectral line based weighted sum of gray gases model for arbitrary RTE solvers*, Ph. D. Thesis, Department of Mechanical Engineering, Brigham Young University, 1994.