



HAL
open science

Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo

Lionel Tessé

► **To cite this version:**

Lionel Tessé. Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo. Thermique [physics.class-ph]. Ecole Centrale Paris, 2001. Français. NNT: . tel-02104983

HAL Id: tel-02104983

<https://theses.hal.science/tel-02104983>

Submitted on 19 Apr 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE CENTRALE PARIS

Spécialité : Énergétique, Physique des Transferts et Combustion

par

Lionel Tessé

Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo

Soutenue le 12 décembre 2001 devant le jury composé de :

<i>Président et rapporteur :</i>	R. BORGHI	Professeur à l'Université Aix-Marseille II
<i>Rapporteur :</i>	J.-Y. GRANDPEIX	Chargé de Recherches au CNRS, Université Paris VI
<i>Examineurs :</i>	F. BEULÉ	Directeur de Département à SNECMA Moteurs
	N. DARABIHA	Professeur à l'École Centrale Paris
	F. DUPOIRIEUX	Ingénieur de Recherches à l'ONERA
	R. FOURNIER	Maître de Conférences à l'Université Paul Sabatier
	J. TAINE	Professeur à l'École Centrale Paris

N° 2001-34

Laboratoire d'accueil : Département d'Énergétique Fondamentale et Appliquée



ONERA

Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales
Centre de Palaiseau

Table des matières

Nomenclature	ix
Liste des abréviations employées	xiii
Introduction	1
1 Physique du rayonnement des flammes et étude bibliographique	5
1.1 Hypothèses et rappels succincts sur les transferts radiatifs dans les milieux semi-transparents	6
1.1.1 Hypothèses de l'étude et remarques préliminaires	6
1.1.2 Grandeur clé en rayonnement thermique	8
1.1.3 Equation de transfert du rayonnement (ETR)	8
1.1.4 Expressions du flux radiatif pariétal et de la puissance radiative volumique	9
1.2 Physique et modélisation du rayonnement des gaz	11
1.2.1 Physique du rayonnement des gaz	12
1.2.2 Approche raie par raie	13
1.2.3 Modèles approchés usuels de rayonnement des gaz	15
1.2.3.1 Modèles de bandes	15
1.2.3.2 Modèles globaux	17
1.3 Physique et modélisation du rayonnement des particules	17
1.3.1 Fondements théoriques et modèle de Mie	18
1.3.1.1 Cas d'une particule isolée	18
1.3.1.2 Cas d'une assemblée de particules	19
1.3.2 Caractérisation des particules de suie	19
1.3.2.1 Indice optique complexe des particules de suie	20
1.3.2.2 Aspect géométrique des particules de suie	21

1.3.3	Modélisation du comportement radiatif des suies dans les études numériques de combustion	21
1.4	Interaction rayonnement/turbulence (IRT)	25
1.5	Méthodes de résolution de l'ETR	27
1.5.1	Méthodes déterministes	28
1.5.2	Méthodes statistiques	29
1.6	Choix méthodologique et étude bibliographique	30
1.6.1	Choix méthodologique	30
1.6.2	Etude bibliographique	31
1.6.2.1	Etudes prenant en compte l'IRT	31
1.6.2.2	Etudes ne prenant pas en compte l'IRT	33
1.6.3	Conclusion	35
2	Méthodes de Monte Carlo directe et réciproques	37
2.1	Introduction	38
2.2	Reciprocal and forward Monte Carlo formulations	39
2.2.1	Exchange formulation of radiative transfer	39
2.2.2	Monte Carlo method approximation	42
2.2.3	Behaviors of the three Monte Carlo formulations	46
2.3	Implementation of the methods	47
2.4	Results and discussion	49
2.4.1	Case of a gray medium	49
2.4.2	Case of a real gas	56
2.5	Conclusion	59
3	Extension aux milieux diffusants	61
3.1	Modifications apportées à l'algorithme	62
3.1.1	Génération aléatoire d'un chemin optique	62
3.1.2	Construction d'un chemin optique	63
3.2	Résultats de validation	66
3.2.1	Validations en flux	67
3.2.1.1	Milieu absorbant non émissif	67
3.2.1.2	Milieu absorbant émissif avec parois absorbantes non émissives	69
3.2.2	Validation en puissance	70

4	Application à une flamme turbulente de diffusion éthylène/air	75
4.1	Présentations de la flamme et de sa simulation aérothermochimique	76
4.1.1	Description de la flamme étudiée	76
4.1.2	Domaine de calcul, maillage et conditions aux limites choisis	76
4.1.3	Modélisation aérothermochimique utilisée	76
4.1.3.1	Calcul eulérien	78
4.1.3.2	Calcul lagrangien	79
4.1.3.3	Hypothèses et données nécessaires au calcul des transferts radiatifs	82
4.2	Modélisation des transferts radiatifs au sein de la flamme	87
4.2.1	Domaine de calcul, maillage et conditions aux limites choisis	87
4.2.2	Modélisation des propriétés radiatives et discrétisation spectrale	91
4.2.3	Prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence	92
4.2.3.1	Modélisation de la turbulence	93
4.2.3.2	Traitement de l'émission	95
4.2.3.3	Traitement de l'absorption	96
4.2.3.4	Hypothèse de décorrélation entre mailles optiquement minces (DMOM)	97
4.2.4	Principe de réciprocité en milieu turbulent	98
4.3	Résultats	99
4.3.1	Comparaison des trois méthodes associées aux deux techniques de répartition	100
4.3.2	Influence de l'émission du milieu extérieur	105
4.3.3	Influence de l'interaction rayonnement/turbulence	106
4.3.4	Contribution des gaz et des suies	113
	Synthèse et perspectives	119
	Annexes	127
A	Description du générateur de nombres aléatoires	127
A.1	Choix du générateur de nombres aléatoires	127
A.2	Description du générateur de nombres aléatoires utilisé	128

B Etablissement des lois de tirage au sort des directions initiales des chemins optiques	129
B.1 Chemin optique partant d'une paroi	129
B.2 Chemin optique partant d'un volume	130
C Cas de validation	133
C.1 Présentation du cas du mur plan	133
C.2 Configuration choisie	134
D Justification de l'approche hybride	137
Bibliographie	139
Table des figures	153
Liste des tableaux	157

Nomenclature

B	point source d'un chemin optique
c_0	célérité du rayonnement dans le vide ($2,998.10^8 \text{ m/s}$)
c_ν	célérité du rayonnement dans un milieu quelconque [m/s]
C_μ, C_τ	constantes égales respectivement à 0,09 et 0,7
D	point de diffusion d'un chemin optique
D_p	diamètre d'une particule sphérique [m]
E_d	épaisseur optique de diffusion
f, f_1, f_2, f_3	fonctions densité de probabilité (PDF)
$f_\theta, f_\varphi, f_d, f_t$	fonctions densité de probabilité (PDF)
f_V	fraction volumique de suie
Fr	nombre de Froude
F, G	points du système
h_P	constante de Planck ($6,626.10^{-34} \text{ J.s}$)
$I_\nu^0, L_\nu^0, I_\lambda^0$	luminances monochromatiques du rayonnement d'équilibre [$W/m^2/Sr/m^{-1}$]
k	pseudo coefficient d'absorption ou énergie cinétique turbulente [m^2/s^2]
k_B	constante de Boltzmann ($1,3805.10^{-23} \text{ J/K}$)
K_s	constante du coefficient d'absorption des suies
l_e	échelle de longueur caractéristique des structures énergétiques [m]
l_m	distance parcourue par le chemin optique dans la maille m [m]
l_t	taille caractéristique des structures turbulentes cohérentes [m]
L	distance entre les parois dans le cas du mur plan [m]
$L_\nu^0, L_\lambda^0, I_\nu^0$	luminances monochromatiques du rayonnement d'équilibre [$W/m^2/Sr/m^{-1}$]
$L_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}), L_\nu(s, \vec{\Delta}),$ $L_\nu(s, \vec{u})$	luminances monochromatiques directionnelles [$W/m^2/Sr/m^{-1}$]

n_ν, n	indices de réfraction (partie réelle de \hat{n}_ν égale à c_0/c_ν)
\hat{n}_ν	indice optique complexe
\vec{n}	vecteur normé normal à la paroi
N_i	nombre de chemins optiques à générer aléatoirement depuis la maille i
N_r	nombre de réflexions subies par un chemin optique
N_S, N_V	nombre de mailles surfaciques, volumiques
N_x, N_y, N_z	nombre de discrétisations respectivement dans les directions x, y, z
$\mathcal{N}(D_p)dD_p$	nombre de particules sphériques par unité de volume ayant un diamètre compris entre D_p et $D_p + dD_p$
p	pression [Pa]
$p_\nu(s, \vec{\Delta} \rightarrow \vec{\Delta}')$	fonction de phase monochromatique de diffusion
P	puissance radiative [W]
P_i^e	puissance totale émise par la maille i [W]
P_{ij}^{exch}	puissance radiative échangée entre les mailles i et j [W]
P_{ij}^{ea}	puissance radiative émise par la maille i et absorbée par la maille j [W]
P^R	puissance radiative volumique [W/m^3]
\vec{q}^R	vecteur flux radiatif surfacique (composantes en W/m^2)
Q_{va}, Q_{vd}	efficacités monochromatiques d'absorption, de diffusion
r	richesse
\vec{r}	vecteur position (composantes en mètre)
$R, R_a, R_d, R_\theta, R_\varphi$	nombres aléatoires tirés au sort uniformément entre 0 et 1
Re	nombre de Reynolds
\mathcal{R}	facteur de réflexion
s	abscisse curviligne [m]
S	surface [m^2]
t	temps [s]
T	température [K]
T_w	température de paroi [K]
\mathcal{T}	facteur de transmission
\vec{u}	vecteur directeur unitaire
v	vitesse [m/s]
V	volume [m^3]

x, y, z	coordonnées cartésiennes [m]
x_i	fraction molaire de l'espèce gazeuse i
$x_{\nu p}$	paramètre de taille d'une particule sphérique ($= \pi \nu D_p$)
Y_F	fraction massique de combustible

Symboles grecs

α_ν, α	absorptivités
β_ν, β	coefficients d'extinction [m^{-1}]
$\vec{\Delta}$	direction de propagation du rayonnement
$\Delta\nu$	largeur d'une bande spectrale [m^{-1}]
ϵ_k	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente [m^2/s^3]
ϵ_e	émissivité du milieu extérieur situé derrière une frontière ouverte
$\epsilon_{w\nu}, \epsilon_w$	émissivités de paroi
$\kappa_\nu, \kappa_\lambda, \kappa$	coefficients d'absorption [m^{-1}]
λ	longueur d'onde [m]
λ_R	conductivité radiative [$W/m/K$]
Λ	échelle de longueur intégrale de la turbulence [m]
ν	nombre d'onde [m^{-1}]
ξ	degré d'avancement d'une réaction chimique
ω	albedo (égal à σ/β)
$\dot{\omega}_F$	taux de disparition du combustible [s^{-1}]
Ω	angle solide [Sr]
ρ	masse volumique [kg/m^3]
σ_ν, σ	coefficients de diffusion [m^{-1}]
σ_s	constante de Stefan ($5,67 \cdot 10^{-8} W/m^2/K^4$)
τ_l	transmittivité limite ou critère de coupure (« cutoff level »)
τ_ν	transmittivité monochromatique
θ, φ	angles [$radian$]
ϕ^a, ϕ^e	flux surfacique absorbé, émis [W/m^2]
ϕ^i, ϕ^p	flux surfacique incident, partant [W/m^2]
ϕ^R	flux radiatif surfacique [W/m^2]
χ_ν	indice monochromatique d'extinction (partie imaginaire de \hat{n}_ν)

Indices

c	relatif au $c^{i\grave{e}me}$ passage d'un chemin optique dans une maille
d	relatif à la diffusion
i, j, m, q	relatif à la maille i, j, m ou q
n	relatif au $n^{i\grave{e}me}$ chemin optique
p	relatif à une particule
t	relatif à la turbulence
w	relatif à une paroi (wall)
ν	monochromatique

Notations

$\text{Im}(Z)$	partie imaginaire du nombre complexe Z
$\mathcal{P}(X)$	probabilité de l'événement X
$\sigma(X)$	écart type de la grandeur X (de la même dimension que X)
\tilde{X}	estimation statistique (Monte Carlo) de la grandeur X
$\langle X \rangle$	moyenne statistique (temporelle) de la grandeur turbulente X

Liste des abréviations employées

ARM	Absorption Reciprocity Method
ASTRE	Approche Statistique des Transferts Radiatifs dans les Ecoulements
CEDRE	Calculs d'Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Énergétique
CK	Correlated-K
DEFA	Département d'Énergétique Fondamentale et Appliquée
DMOM	Décorrélacion entre Mailles Optiquement Minces
ERM	Emission Reciprocity Method
ETR	Equation de Transfert du Rayonnement
FM	Forward Method
HPBM	High Pressure Box Model
IRT	Interaction Rayonnement/Turbulence
MOD	Méthode des Ordonnées Discrètes
NUD	Non Uniform Distribution
ONERA	Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales
OTFA	Optically Thin Fluctuation Approximation
OTL	Optically Thin Limit
PDF	Probability Density Function
PEUL	Probabiliste Eulerien Lagrangien
RDG-PFA	Rayleigh Debye Gans-Polydisperse Fractal Aggregate
SNB	Statistical Narrow Band
UD	Uniform Distribution

Introduction

Les constructeurs des secteurs aéronautique et spatial souhaitent réduire les coûts et les durées de développement de leurs moteurs tout en améliorant leurs performances et en augmentant leur durée de vie. Ces ambitions imposent de recourir à la simulation numérique afin de réduire les constructions de prototype et les essais. Cependant, la limitation du nombre des essais ne sera réellement possible que lorsque les codes de calcul seront suffisamment performants et précis pour prédire, par exemple :

- les niveaux de concentration en polluants (suies, NO_x , CO . . .) en sortie de tuyère, dans le but de réduire les émissions polluantes des avions civils et la signature infra-rouge des avions militaires et des missiles ;
- la quantité de chaleur reçue localement par les parois des chambres de combustion de turbines à gaz ; en effet, la température maximale atteinte par les parois mais surtout les gradients de température auxquels elles sont soumises déterminent la durée de vie des chambres de combustion ; SNECMA estime qu'une diminution de 10 K de la température des parois de la chambre M88 conduirait à une augmentation de 100 heures de sa durée de vie ; les transferts radiatifs jouent un rôle essentiel dans cette application car les flux convectifs sont rendus les plus faibles possibles (les parois sont protégées des gaz de combustion par un film d'air frais entrant dans la chambre parallèlement aux parois) ; en ce qui concerne les moteurs à propergol solide, la connaissance des flux de chaleur reçus est nécessaire au dimensionnement des protections thermiques et à la prédiction de l'allumage du propergol [1, 2] ;
- la température en sortie de chambre de combustion car la durée de vie de la turbine en dépend ;
- les limites d'extinction pauvre des chambres de combustion aérobie des moteurs aéronautiques ; SNECMA estime en effet qu'une diminution de 10% de la richesse en zone primaire entraînerait, pour la chambre M88, une baisse des concentrations en suies de l'ordre de 50% en sortie de tuyère et, par conséquent, une diminution importante de la signature infra-rouge ;
- l'allumage, les instabilités de combustion . . .

Afin de parvenir à ces objectifs, les codes de calcul doivent prendre en compte, de façon rigoureuse, les différents couplages entre turbulence, phénomènes liés au caractère diphasique de l'écoulement, transferts radiatifs et cinétique chimique détaillée incluant la production/destruction des particules de suie. Comme la plupart des polluants sont des espèces

minoritaires, leur prédiction impose nécessairement de prendre en compte une cinétique chimique détaillée. De plus, le mécanisme de formation des suies fait intervenir diverses espèces gazeuses minoritaires comme le benzène C_6H_6 , l'acétylène C_2H_2 et le radical OH [3–5]. Par ailleurs, les vitesses de réaction des polluants sont extrêmement sensibles à la température. Il est donc nécessaire d'être précis sur la température et de prendre en compte les fluctuations de température dans les calculs de cinétique chimique (voir figure 1). La nécessité de déterminer de façon précise le champ de température impose de prendre en compte de manière rigoureuse les transferts radiatifs, qui sont un terme source de l'équation de l'énergie par l'intermédiaire de la puissance radiative volumique. L'influence des transferts radiatifs sur le champ de température et sur la production de polluants tels que les suies ou les NO_x a été mise en évidence dans de nombreuses études [5–17] (voir figure 2). On comprend facilement que cet effet puisse être très important puisque, dans certains cas, la flamme peut perdre, sous forme radiative, jusqu'à 60% de l'énergie dégagée par la réaction chimique [18]. D'autre part, l'évaluation correcte des transferts radiatifs nécessite la prise en compte des fluctuations turbulentes car ces dernières (surtout celles de température et de fraction volumique de suie) ont une influence très importante sur les puissances radiatives [18–22]. Enfin, il existe également un couplage entre le comportement de la phase dispersée liquide et les transferts radiatifs : les gouttelettes de combustible liquide modifient les transferts radiatifs en diffusant du rayonnement et, si ces dernières sont aussi absorbantes, les transferts radiatifs accélèrent l'évaporation des gouttes.

En 1997, date de démarrage de cette thèse, le Département d'Energétique Fondamentale et Appliquée de l'ONERA (DEFA) disposait d'un code de calcul nommé PEUL (Probabiliste EULérien Lagrangien [3, 4], voir section 4.1.3) prenant en compte les couplages entre turbulence, cinétique chimique détaillée et formation des suies. En revanche, dans cette approche, les transferts radiatifs étaient modélisés d'une façon simplifiée assez approximative (la perte radiative était corrélée à la richesse). Le DEFA lança alors un projet de recherche sur 4 ans intitulé « Etude de la formation/destruction des polluants dans les flammes turbulentes » et comportant un volet modélisation et un volet expérimentation. Les travaux de thèse présentés dans ce mémoire étaient intégrés à la partie modélisation de ce projet. L'objectif de cette thèse était de développer un code de calcul de transferts radiatifs capable de traiter des géométries tridimensionnelles complexes et de tenir compte :

- de l'anisothermie et des hétérogénéités du milieu semi-transparent contenu dans la géométrie ;
- d'une discrétisation spectrale fine des propriétés radiatives des gaz et des particules diverses présentes dans ce milieu ;
- de l'interaction rayonnement/turbulence ;
- de la diffusion anisotrope du rayonnement par les particules.

Le code développé a été nommé ASTRE (Approche Statistiques des Transferts Radiatifs dans les Ecoulements).

L'écriture d'un code de calcul de transferts radiatifs nécessite la mise en œuvre d'une méthode de résolution de l'équation de transfert du rayonnement, associée à un modèle de

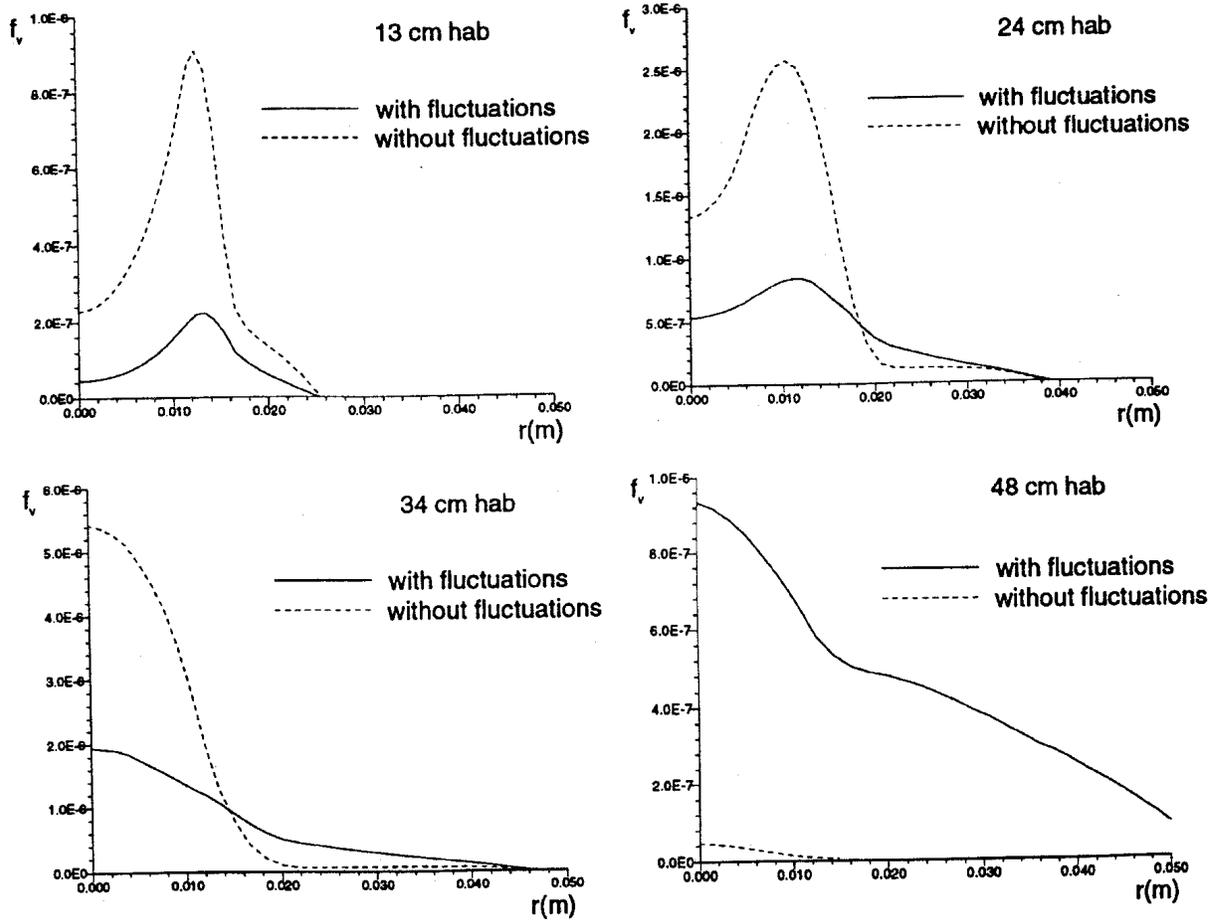


Figure 1: Influence de la prise en compte des fluctuations turbulentes sur la fraction volumique de suie, dans une flamme turbulente de diffusion éthylène/air, pour différentes hauteurs au-dessus du brûleur (figure issue de [8]).

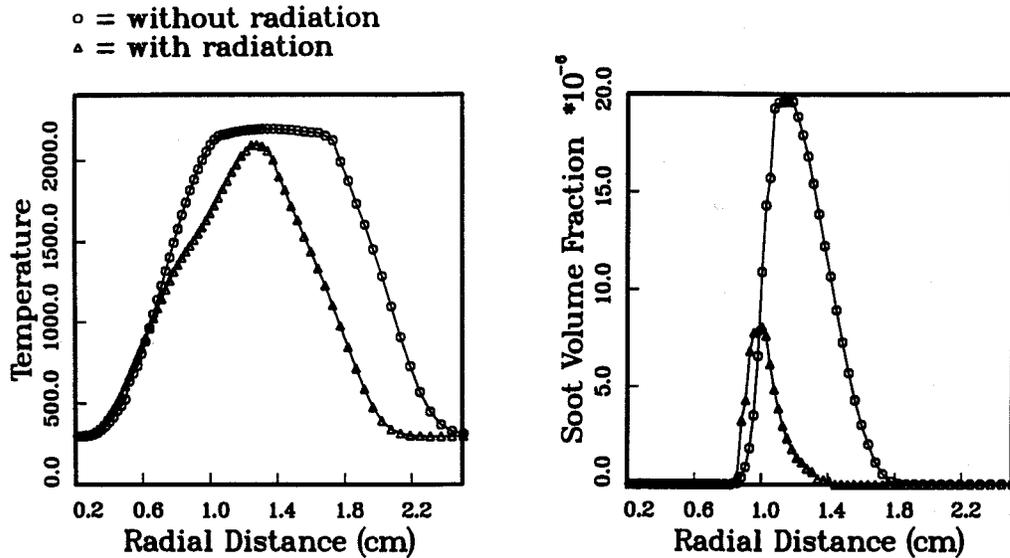


Figure 2: Influence de la prise en compte des transferts radiatifs sur la température et la fraction volumique de suie à 10 cm de hauteur dans une flamme turbulente de diffusion éthylène-azote/air (figure issue de [15]).

propriétés radiatives pour les gaz et les particules et à une modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence. Le choix de la méthode numérique de résolution est guidé par les différentes contraintes énumérées précédemment et le modèle de rayonnement des gaz doit être compatible avec cette méthode. Dans le chapitre 1, après de brefs rappels sur les transferts radiatifs dans les milieux semi-transparents, ces différents points sont abordés successivement et notre choix méthodologique est justifié. Une étude bibliographique est également présentée permettant de mettre en évidence l'originalité de ce travail. La méthodologie adoptée pour traiter des milieux non diffusants et non turbulents est décrite au début du chapitre 2. Cette première version du code a été validée sur le cas test monodimensionnel, dit du « mur plan », pour lequel il existe des solutions de référence. Les résultats obtenus pour plusieurs milieux gris et mélanges de gaz réels, ainsi que pour différentes épaisseurs optiques et conditions thermiques, sont présentés à la fin du chapitre 2. Le chapitre 3 est consacré à l'extension de cette méthode aux milieux diffusants et à sa validation sur le même type de configuration que précédemment. Le code de calcul PEUL et la modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence sont décrits dans le chapitre 4. Les résultats de validation du code ASTRE sur une flamme turbulente de diffusion éthylène/air, contenant des particules de suie non diffusantes, y sont également présentés ; l'influence de l'interaction rayonnement/turbulence, ainsi que l'erreur commise lors de l'utilisation d'une hypothèse de décorrélation des fluctuations turbulentes entre mailles optiquement minces sont étudiées ; les influences de différents paramètres intervenant dans la modélisation des transferts radiatifs sont successivement mises en évidence ; les contributions respectives des gaz et des suies à la perte radiative totale de la flamme sont données.

Chapitre 1

Physique du rayonnement des flammes et étude bibliographique

Une flamme est constituée d'un mélange gazeux contenant éventuellement des particules solides ou liquides. De tels milieux sont généralement semi-transparents du point de vue du rayonnement thermique, c'est-à-dire qu'un élément de volume de ces milieux émet, absorbe et diffuse (s'il y a des particules de taille suffisante) du rayonnement.

Pour caractériser le rayonnement, trois grandeurs peuvent être utilisées : la longueur d'onde λ (en m ou usuellement en μm ou nm), la fréquence f (en Hz) et le nombre d'onde ν (en m^{-1} ou usuellement en cm^{-1}). Les relations qui lient ces trois grandeurs sont les suivantes :

$$f = \nu c_0 = \frac{c_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta})}{\lambda(\vec{r}, \vec{\Delta})}, \quad (1.1)$$

où c_0 est la célérité du rayonnement dans le vide, égale à $2,998.10^{-8}$ m/s et c_ν la célérité du rayonnement dans le milieu réel. On constate que la longueur d'onde d'un rayonnement qui se propage dans un milieu réel quelconque dépend de la position \vec{r} et de la direction de propagation $\vec{\Delta}$, alors que la fréquence et le nombre d'onde sont invariants dans un référentiel donné. Il n'est donc pas judicieux d'utiliser la longueur d'onde pour caractériser le rayonnement dans un milieu semi-transparent quelconque. Par conséquent, dans cette étude, le rayonnement sera caractérisé par le nombre d'onde.

L'intervalle de nombre d'onde devant être considéré dans les applications de rayonnement thermique des flammes s'étend de 100 à 10000 (domaine infrarouge) voire 25000 cm^{-1} selon la température de la flamme. Plus la température de la flamme est élevée, plus il faut augmenter la valeur de la borne supérieure car une quantité d'énergie radiative non négligeable peut alors être émise dans le visible (compris entre 12500 et 25000 cm^{-1}).

Dans ce chapitre, des notions de base sur les transferts radiatifs dans les milieux semi-transparents sont rappelées dans la section 1.1 avant que le rayonnement des flammes ne soit abordé. Ensuite, les différentes modélisations des divers phénomènes physiques intervenant dans le rayonnement des flammes, c'est-à-dire les processus d'émission/absorption par les gaz de combustion, les processus d'émission/absorption et de diffusion par les particules, ainsi que les fluctuations turbulentes de température et de concentrations, sont examinées respectivement dans les sections 1.2, 1.3 et 1.4. Puis, les différentes méthodes numériques de résolution

d'un problème de transferts radiatifs sont présentées et discutées dans la section 1.5. Dans la section 1.6, notre choix méthodologique est présenté et justifié. Enfin, les principales études disponibles dans la littérature sur le rayonnement des flammes sont présentées afin de situer nos travaux dans le contexte scientifique.

1.1 Hypothèses et rappels succincts sur les transferts radiatifs dans les milieux semi-transparentes

Afin d'approfondir certains points abordés dans cette section, le lecteur pourra consulter des ouvrages généraux comme, par exemple, ceux de Taine et Petit [23], Siegel et Howell [24], Hottel et Sarofim [25], Modest [26] et Brewster [27].

1.1.1 Hypothèses de l'étude et remarques préliminaires

Dans le cadre de cette étude, deux hypothèses classiques et quasiment incontournables sont faites :

- celle de l'équilibre thermodynamique local (ETL) [23], c'est-à-dire que dans un élément de volume dV (petit à l'échelle macroscopique mais grand à l'échelle microscopique, c'est-à-dire contenant 10^{15} à 10^{20} molécules) et pendant un intervalle de temps dt , le milieu est infiniment voisin d'un état d'équilibre caractérisé par un ensemble de grandeurs physiques extensives et intensives données par des lois statistiques comme celle de Maxwell-Boltzmann ;
- les effets de polarisation du rayonnement électromagnétique sont négligés.

Deux autres hypothèses concernant l'indice optique complexe sont également faites. Ces hypothèses sont présentées ci-dessous. Rappelons qu'un milieu quelconque (opaque ou semi-transparent) est caractérisé optiquement par un indice complexe (sans unité) noté :

$$\hat{n}_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}) = n_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}) - i\chi_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}), \quad (1.2)$$

où n_ν est l'indice de réfraction égal à $\frac{c_0}{c_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta})}$ et χ_ν l'indice d'extinction du milieu.

La troisième hypothèse de notre étude consiste à considérer l'indice optique réel et égal à l'indice de réfraction en négligeant χ_ν devant n_ν , soit :

$$\hat{n}_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}) = n_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}). \quad (1.3)$$

Ceci est vrai dans le cas des gaz et de la plupart des milieux semi-transparentes, comme les verres par exemple [23]. Cependant, il faut avoir clairement à l'esprit que l'indice d'extinction χ_ν n'est pas nul puisque c'est lui qui confère au milieu son caractère absorbant ou diffusant. En effet, on montre que le coefficient d'absorption monochromatique κ_ν (en m^{-1})¹ d'un milieu homogène non diffusant s'exprime de la façon suivante [23] :

$$\kappa_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}) = 4\pi\nu\chi_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}). \quad (1.4)$$

La dernière hypothèse consiste à négliger toutes les dépendances de l'indice de réfraction et à le prendre égal à 1, soit :

$$n_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}) = n = 1. \quad (1.5)$$

Dans le cas des gaz, n vaut 1 à quelques 10^{-4} près [23]. Compte tenu de cette hypothèse, l'indice de réfraction n n'apparaîtra plus dans les formules dans la suite du rapport (excepté celui des particules).

Ces hypothèses reviennent directement à considérer, du point de vue de la propagation du rayonnement (mais pas de l'absorption), que le milieu environnant est le vide. Par conséquent, le rayonnement se propage à la vitesse c_0 (car n est égal à 1) et de façon rectiligne (car n est uniforme). Plus exactement, les chemins optiques sont des lignes brisées puisqu'il y a les réflexions sur les parois et éventuellement la diffusion, considérée en champ lointain, par les particules présentes dans le milieu semi-transparent si ce dernier est diffusant.

La dernière conséquence de ces hypothèses est que la luminance monochromatique du rayonnement d'équilibre du milieu est isotrope et égale à celle du vide. En effet, de façon assez générale, celle du milieu s'écrit [23] :

$$L_\nu^0(\vec{r}, \vec{\Delta}, T) = \frac{c_0^2}{c_\nu^2(\vec{r}, \vec{\Delta})} \frac{2h_P c_0^2 \nu^3}{\exp\left(\frac{h_P \nu c_0}{k_B T}\right) - 1} = n_\nu^2(\vec{r}, \vec{\Delta}) L_\nu^0(T), \quad (1.6)$$

où T est la température (en K), h_P la constante universelle de Planck égale à $6,626 \cdot 10^{-34}$ J.s, k_B celle de Boltzmann égale à $1,3805 \cdot 10^{-23}$ J/K et $L_\nu^0(T)$ la luminance monochromatique isotrope du rayonnement d'équilibre dans le vide (en $\text{W}/\text{m}^2/\text{Sr}/\text{m}^{-1}$) aussi appelée fonction de Planck.

Enfin, il faut signaler que, lorsqu'on décide de travailler en nombre d'onde, il faut utiliser la loi de déplacement de Wien² formulée en nombre d'onde, c'est-à-dire :

$$\frac{\nu_m}{T} = 1,961 \quad \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}. \quad (1.7)$$

En effet, utiliser cette loi formulée en longueur d'onde ($\lambda_m T = 2898 \mu\text{m} \cdot \text{K}$), puis poser $\nu_m = 1/\lambda_m$ conduit à une erreur sur l'estimation de ν_m . On rappelle que la relation qui lie $L_\lambda^0(T)$ et $L_\nu^0(T)$ est :

$$L_\lambda^0(T) d\lambda = -L_\nu^0(T) d\nu, \quad (1.8)$$

avec $\nu = \frac{1}{\lambda}$.

1. Le nombre d'onde ν et le coefficient d'absorption monochromatique κ_ν s'expriment dans la même unité, le m^{-1} , mais celle-ci a une signification différente dans chaque cas. Le nombre d'onde est l'inverse d'une longueur d'onde. C'est donc une grandeur énergétique qui caractérise une position sur le spectre du rayonnement électromagnétique, au même titre que la longueur d'onde ou la fréquence. En revanche, le coefficient d'absorption monochromatique est l'inverse d'une longueur : $\frac{1}{\kappa_\nu}$ est le libre parcours moyen d'un photon avant son absorption.

2. Cette loi donne, en fonction de la température, la longueur d'onde λ_m , le nombre d'onde ν_m ou la fréquence f_m pour laquelle la luminance isotrope du rayonnement d'équilibre dans le vide est maximale.

1.1.2 Grandeur clé en rayonnement thermique

Le champ de rayonnement électromagnétique est caractérisé à l'échelle macroscopique par la connaissance en tout point \vec{r} du milieu, pour toute direction $\vec{\Delta}$ et pour tout nombre d'onde ν , d'une grandeur énergétique $L_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta})$ appelée luminance monochromatique directionnelle (en $\text{W}/\text{m}^2/\text{Sr}/\text{m}^{-1}$).

Cette luminance est définie par la relation suivante :

$$d^5\Phi_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta}) = L_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta})dS \cos\theta d\Omega d\nu, \quad (1.9)$$

où $d^5\Phi_\nu(\vec{r}, \vec{\Delta})$ est le flux radiatif monochromatique directionnel (en W) traversant un élément de surface dS dans un angle solide $d\Omega$ centré autour d'une direction $\vec{\Delta}$ faisant un angle θ avec la normale à l'élément de surface.

La résolution d'un problème de transfert radiatif consiste donc (excepté dans les méthodes statistiques, voir section 1.5) à déterminer explicitement le champ de luminance monochromatique directionnelle. Par conséquent, il faut établir une équation traduisant l'évolution spatiale de cette grandeur pour un chemin optique et un nombre d'onde donnés.

1.1.3 Equation de transfert du rayonnement (ETR)

Cette équation s'obtient en écrivant l'évolution, entre deux positions s et $s+ds$ d'un trajet optique (voir figure 1.1), du flux radiatif monochromatique directionnel qui se propage, dans l'angle solide $d\Omega$, centré autour de la direction $\vec{\Delta}$, à travers l'élément de surface dS normal à celle-ci. L'équation d'évolution du flux est de la forme :

$$\begin{aligned} \text{flux sortant en } s+ds - \text{flux entrant en } s &= \text{flux émis entre } s \text{ et } s+ds \text{ dans la direction } \vec{\Delta} \\ &+ \text{flux entrant entre } s \text{ et } s+ds \text{ dans une} \\ &\quad \text{direction } \vec{\Delta}' \text{ et diffusé dans la direction } \vec{\Delta} \\ &- \text{flux entrant en } s \text{ dans la direction } \vec{\Delta} \\ &\quad \text{et absorbé entre } s \text{ et } s+ds \\ &- \text{flux entrant en } s \text{ dans la direction } \vec{\Delta} \text{ et diffusé} \\ &\quad \text{entre } s \text{ et } s+ds \text{ dans une autre direction } \vec{\Delta}'' . \end{aligned}$$

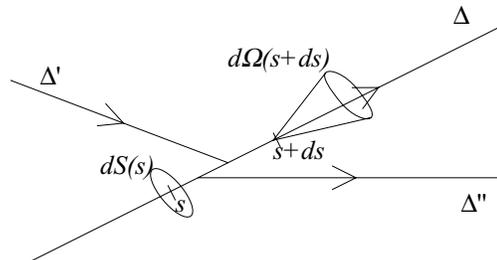


Figure 1.1: Evolution du flux le long du chemin optique.

La formulation mathématique de cette relation pour un indice de réfraction n quelconque est par exemple donnée dans [23]. Dans le cas où on suppose que cet indice est égal à 1, elle

devient :

$$\frac{\partial L_\nu(s, \vec{\Delta})}{\partial s} = \underbrace{\kappa_\nu(s) L_\nu^0(T)}_{\text{émission}} + \underbrace{\frac{\sigma_\nu(s)}{4\pi} \int p_\nu(s, \vec{\Delta}' \rightarrow \vec{\Delta}) L_\nu(s, \vec{\Delta}') d\Omega'}_{\text{diffusion constructive}} - \underbrace{[\kappa_\nu(s) + \sigma_\nu(s)] L_\nu(s, \vec{\Delta})}_{\text{extinction : absorption+diffusion}}, \quad (1.10)$$

où σ_ν est le coefficient monochromatique de diffusion (en m^{-1}) du milieu, $p_\nu(s, \vec{\Delta}' \rightarrow \vec{\Delta})$ la fonction de phase de diffusion (sans unité) et $d\Omega'$ l'angle solide élémentaire centré autour de $\vec{\Delta}'$ (en Sr).

Cette équation, appelée équation de transfert du rayonnement (ETR), donne l'évolution de la luminance monochromatique directionnelle le long de la trajectoire d'un rayonnement. L'équation (1.10) est la formulation locale de l'ETR, mais il existe également une formulation intégrale de l'ETR. Pour un milieu non diffusant ($\sigma_\nu = 0$), elle s'écrit :

$$L_\nu(s, \vec{\Delta}) = L_\nu(0, \vec{\Delta}) \tau_\nu(0 \rightarrow s) + \int_0^s \kappa_\nu(s') L_\nu^0(T(s')) \tau_\nu(s' \rightarrow s) ds', \quad (1.11a)$$

$$= L_\nu(0, \vec{\Delta}) \tau_\nu(0 \rightarrow s) + \int_0^s L_\nu^0(T(s')) \frac{\partial \tau_\nu(s' \rightarrow s)}{\partial s'} ds', \quad (1.11b)$$

où $\tau_\nu(s' \rightarrow s)$ est la transmittivité monochromatique de s' à s qui s'exprime de la façon suivante :

$$\tau_\nu(s' \rightarrow s) = \exp \left[\int_{s'}^s -\kappa_\nu(s'') ds'' \right], \quad (1.12)$$

où $\int_{s'}^s \kappa_\nu(s'') ds''$ représente l'épaisseur optique entre s' et s (sans dimension). Le premier terme du second membre des équations (1.11) représente la transmission de 0 à s de la luminance incidente en 0. Le second terme traduit l'émission de toutes les positions s' comprises entre 0 et s et la transmission de cette émission de s' à s .

Les conditions aux limites de l'ETR sont discutées dans [23]. On constate que ces conditions aux limites ne sont pas classiques lorsque le domaine considéré contient des frontières réfléchissantes. En effet, la luminance partant d'une frontière (émission + réflexions) dépend alors de la luminance du rayonnement qu'elle reçoit, c'est-à-dire, dépend des luminances partant de toutes les autres frontières et des luminances partant de tous les points du milieu semi-transparent. Il y a donc un couplage entre les luminances de tous les points (surfaciques et volumiques) du domaine considéré. Ceci est dû aux interactions instantanées à grande distance que constituent les phénomènes radiatifs. Pour cette raison, certaines méthodes numériques de résolution de l'ETR sont itératives (voir section 1.5). Cependant, dans le cas de parois noires (émissivité égale à 1, c'est-à-dire réflectivité nulle), ce couplage disparaît car il n'y a plus de réflexions sur les parois ; le flux partant est alors égal au flux émis.

1.1.4 Expressions du flux radiatif pariétal et de la puissance radiative volumique

Considérons un système tridimensionnel quelconque contenant un milieu semi-transparent (voir figure 1.2). On définit, en tout point de ce système, le vecteur flux radiatif surfacique \vec{q}^R

par la relation suivante :

$$\vec{q}^R = \int_0^{+\infty} \int_{4\pi} L_\nu(s, \vec{u}) \vec{u} d\Omega d\nu, \quad (1.13)$$

où $L_\nu(s, \vec{u})$ est la luminance monochromatique directionnelle et \vec{u} le vecteur directeur unitaire de la direction Δ autour de laquelle est centré l'angle solide élémentaire $d\Omega$. En tout point F de la frontière, le flux radiatif surfacique ϕ^R (en W/m²) est donné par la relation :

$$\phi^R(F) = -\vec{n} \cdot \vec{q}^R(F) = \phi^i(F) - \phi^p(F), \quad (1.14)$$

où \vec{n} est la normale à la frontière, au point F , orientée vers l'intérieur du domaine. $\phi^i(F)$ et $\phi^p(F)$ désignent respectivement les flux surfaciques incident et partant au point F et s'expriment de la manière suivante :

$$\phi^i(F) = \int_0^{+\infty} \int_{2\pi(\cos\theta < 0)} L_\nu(F, \vec{u}) |\cos\theta| d\Omega d\nu, \quad (1.15a)$$

$$\phi^p(F) = \int_0^{+\infty} \int_{2\pi(\cos\theta > 0)} L_\nu(F, \vec{u}) \cos\theta d\Omega d\nu, \quad (1.15b)$$

où θ est l'angle entre les vecteurs \vec{n} et \vec{u} .

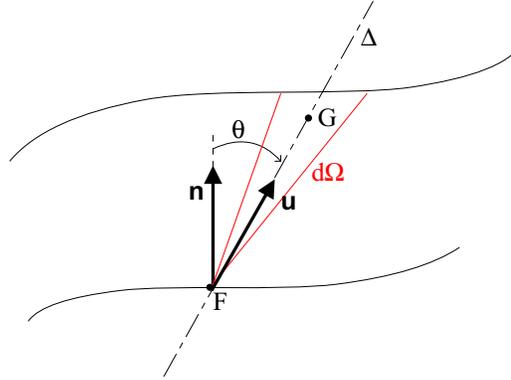


Figure 1.2: *Système tridimensionnel quelconque.*

Il est intéressant de noter que le flux radiatif surfacique ϕ^R peut également s'écrire de la façon suivante :

$$\phi^R(F) = \phi^a(F) - \phi^e(F), \quad (1.16)$$

où $\phi^a(F)$ et $\phi^e(F)$ désignent respectivement les flux surfaciques absorbé et émis au point F . Ces deux flux sont donnés par les relations suivantes :

$$\phi^a(F) = \int_0^{+\infty} \int_{2\pi(\cos\theta < 0)} \varepsilon_{w\nu}(F, \Delta) L_\nu(F, \vec{u}) |\cos\theta| d\Omega d\nu, \quad (1.17a)$$

$$\phi^e(F) = \int_0^{+\infty} L_\nu^0(T_F) \int_{2\pi(\cos\theta > 0)} \varepsilon_{w\nu}(F, \Delta) \cos\theta d\Omega d\nu, \quad (1.17b)$$

où $\varepsilon_{w\nu}(F, \Delta)$ est l'émissivité monochromatique directionnelle (sans dimension) de la paroi au point F .

Comme l'énergie radiative se conserve sur l'ensemble du système considéré, les puissances radiatives volumiques $P^R(G)$ (en W/m^3), intervenant dans l'équation de bilan d'énergie, sont liées aux flux radiatifs surfaciques sur les frontières par la relation suivante :

$$\int_{\text{volume}} P^R(G) dV + \oint_{\text{surface}} \phi^R(F) dS = 0. \quad (1.18)$$

En faisant intervenir le vecteur flux radiatif surfacique \vec{q}^R et en appliquant le théorème de Green-Odstrogradski, l'intégrale sur la surface fermée du flux radiatif surfacique ϕ^R devient :

$$\oint_{\text{surface}} \phi^R(F) dS = \oint_{\text{surface}} -\vec{n} \cdot \vec{q}^R(F) dS, \quad (1.19a)$$

$$= \int_{\text{volume}} \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{q}^R \right]_{s=G} dV. \quad (1.19b)$$

En injectant la relation (1.19b) dans l'équation (1.18), la puissance radiative volumique dissipée en tout point G du volume s'exprime comme l'opposé de la divergence de \vec{q}^R prise au point G , soit :

$$P^R(G) = - \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{q}^R \right]_{s=G} = - \int_0^{+\infty} \int_{4\pi} \left[\frac{\partial L_\nu(s, \vec{u})}{\partial s} \right]_{s=G} d\Omega d\nu. \quad (1.20)$$

En combinant l'équation (1.20) avec l'équation (1.10), on obtient une nouvelle expression de la puissance radiative volumique :

$$P^R(G) = \underbrace{\int_0^{+\infty} \int_{4\pi} \kappa_\nu(G) L_\nu(G, \vec{u}) d\Omega d\nu}_{\text{absorption}} - \underbrace{4\pi \int_0^{+\infty} \kappa_\nu(G) L_\nu^0(T_G) d\nu}_{\text{émission}}. \quad (1.21)$$

En effet, après intégration sur toutes les directions de l'espace, les termes d'extinction et de construction par diffusion se compensent exactement.

1.2 Physique et modélisation du rayonnement des gaz

Dans cette étude, la diffusion Rayleigh par les molécules de gaz est négligée. Par conséquent, dans cette section, seuls les phénomènes d'émission et d'absorption de rayonnement par une molécule de gaz sont abordés. Pour plus de détails sur l'ensemble de cette section, le lecteur pourra consulter la référence [28].

1.2.1 Physique du rayonnement des gaz

De nombreuses espèces gazeuses présentes dans les gaz de combustion (H_2O , CO_2 , CO , OH , N_2O , NO , CH_4 , C_2H_4 , HCl . . .) émettent et absorbent du rayonnement. Ces phénomènes physiques sont d'origine quantique et sont intimement liés au moment dipolaire électrique de la molécule [28]. Ce moment dipolaire peut être permanent (molécules polaires comme H_2O , CO . . .), engendré par la vibration de la molécule (H_2O , CO_2 . . .), lié à l'état électronique (NO) ou créé par un champ électrique excitateur extérieur comme une source laser (principe des mesures par diffusion Rayleigh ou Raman par exemple).

Aux différents états quantiques d'une molécule sont associés des niveaux d'énergie discrets. Au sein d'un état électronique (surface de potentiel), il existe de nombreux niveaux de vibration auxquels sont associés de nombreux niveaux de rotation. Tout phénomène d'émission ou d'absorption de rayonnement par une molécule correspond à une transition entre deux de ces niveaux, appartenant éventuellement à des états électroniques différents. Une transition entre deux niveaux de vibration-rotation appartenant à des états électroniques différents (transition rovibronique) conduit à un rayonnement visible ou ultraviolet ; une transition entre deux niveaux de vibration-rotation appartenant au même état électronique (transition rovibrationnelle) conduit à un rayonnement infrarouge (ce sont ces transitions qui nous intéressent ici) ; et enfin, une transition entre deux niveaux de rotation appartenant au même niveau vibrationnel (transition rotationnelle) conduit à un rayonnement dans le domaine infrarouge lointain ou micro-onde.

Le spectre (exprimé en coefficient d'absorption, émissivité, transmittivité ou luminance) associé à une transition est une raie caractérisée par une intensité, la position de son centre ($\nu_c = \Delta E / (c_0 h_P)$ où ΔE est la différence d'énergie entre les deux niveaux de la transition) et un profil (Lorentz, Doppler ou Voigt (produit de convolution des deux précédents)). En effet, la raie n'est pas un Dirac car elle est élargie par trois phénomènes physiques principaux [28] :

- par effet Doppler (caractérisé par un profil du même nom) ; le nombre d'onde d'un rayonnement émis ou absorbé est effectivement égal à ν_c dans le référentiel lié à la molécule, mais varie légèrement autour de cette valeur pour un observateur placé dans un autre référentiel dans lequel la molécule est en mouvement ;
- par effet des collisions intermoléculaires (caractérisé par un profil Lorentz) ; au moment de la transition radiative, la molécule est perturbée par ses voisines, ce qui déplace légèrement ses niveaux d'énergie ;
- par effet de largeur naturelle ; la durée de vie des niveaux d'énergie étant faible à cause du phénomène d'émission spontanée, le principe d'Heisenberg impose une incertitude δE sur les niveaux d'énergie ; l'élargissement associé à ce phénomène est souvent négligeable devant l'élargissement total dû aux deux effets précédents.

Dans les milieux en combustion qui nous intéressent ici, l'élargissement par effet des collisions est souvent prépondérant.

Les spectres d'émission/absorption d'un gaz ont donc une structure spectrale très fine constituée d'une succession de raies très étroites (voir figure 1.3). On constate également sur cette figure que, lorsque la température augmente, le nombre des raies et l'étalement spectral de leurs centres augmentent et le niveau global des intensités des raies diminue. Cependant,

les largeurs des raies évoluent assez peu car l'élargissement par effet Doppler augmente avec la température tandis que celui dû aux collisions diminue. En revanche, les raies s'élargissent très fortement par effet des collision lorsque la pression augmente et le spectre devient alors beaucoup plus lisse (voir figure 1.4).

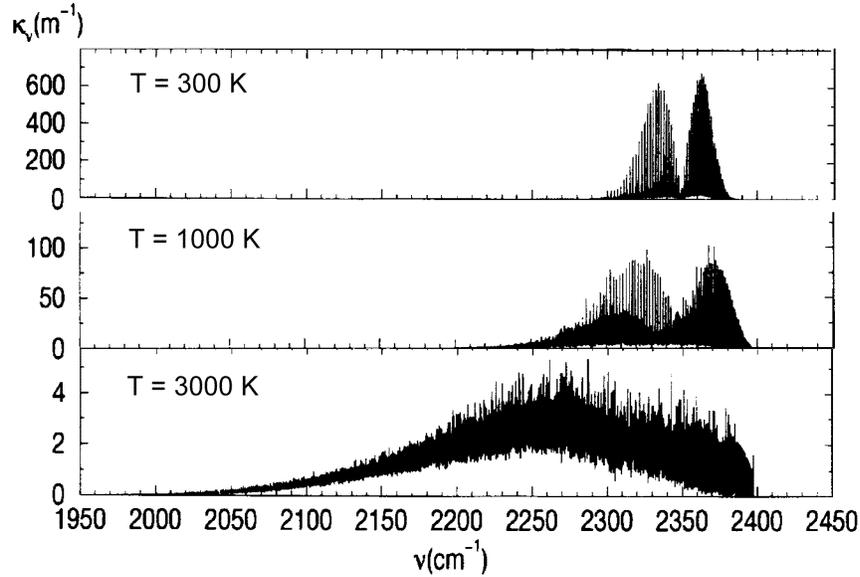


Figure 1.3: *Evolution en fonction de la température du spectre en coefficient d'absorption de CO_2 : $x_{CO_2} = 0,02$; $x_{N_2} = 0,98$; $p = 1\text{ atm}$ (figure obtenue à partir de figures issues de [28]).*

1.2.2 Approche raie par raie

Les modèles raie par raie sont les modèles de rayonnement des gaz les plus rigoureux et les plus précis. Ce sont des modèles de référence pour tout problème de transferts radiatifs en milieu gazeux. Dans cette approche, le coefficient d'absorption à un nombre d'onde donné est obtenu en sommant, à ce nombre d'onde, les contributions de toutes les raies. La précision de ce type de modèle dépend donc directement de celle de la base de données spectroscopiques (position du centre, intensité et profil de chaque raie) utilisée et éventuellement des troncatures des ailes de raies effectuées lors de la mise en œuvre.

Dans les applications de combustion, il est nécessaire de prendre en compte quelques 10^6 raies et, étant données la largeur typique d'une raie (environ 10^{-2} cm^{-1}) et l'étendue spectrale à discrétiser (10^2 à 10^4 cm^{-1}), il faut considérer jusqu'à 10^6 points spectraux. On voit donc immédiatement la lourdeur de mise en œuvre de tels modèles dans des systèmes tridimensionnels réels nécessitant également une discrétisation spatiale (entre 10^4 et 10^5 points) et directionnelle (environ 10^2 directions) ; d'où la nécessité d'utiliser des modèles approchés demandant moins de temps de calcul et moins d'occupation mémoire. Cependant, ces modèles ont des domaines de validité limités et ils doivent donc être comparés à un calcul de référence raie par raie dans certaines conditions d'utilisation.

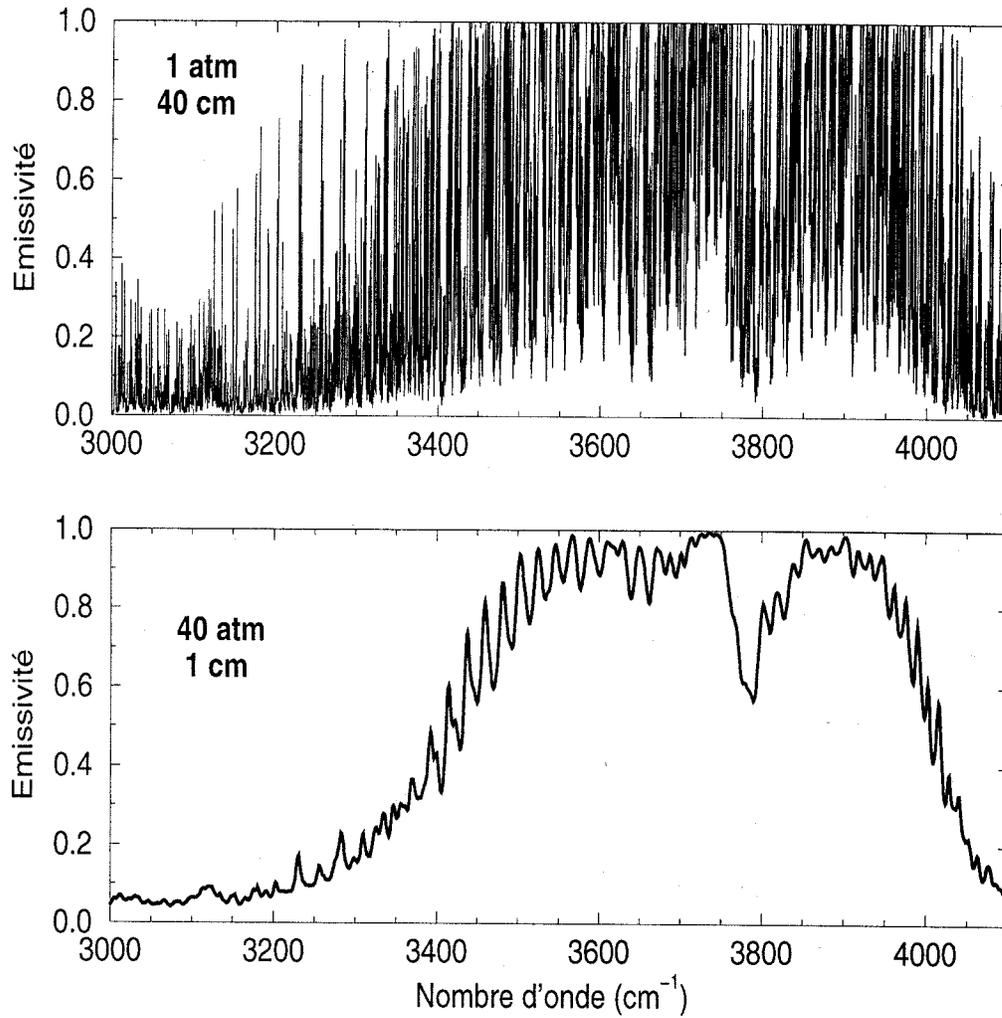


Figure 1.4: Evolution en fonction de la pression du spectre en émissivité d' H_2O pour un produit $x_{H_2O}pl$ constant : $x_{H_2O} = 0,5$; $x_{N_2} = 0,5$; $T = 800 K$ (figure issue de [28]).

1.2.3 Modèles approchés usuels de rayonnement des gaz

Une présentation détaillée et une étude comparative de ces modèles ont été menées par Taine et Soufiani [28]. D'autres comparaisons de ces modèles peuvent être trouvées dans les références [29–36].

Il y a deux types de classification des modèles de rayonnement des gaz. La première façon de les classer consiste à distinguer ceux qui utilisent une discrétisation spectrale (les modèles de bandes) de ceux qui fournissent une grandeur radiative intégrée sur tout le spectre (les modèles globaux). Dans les modèles de bandes, le spectre est divisé en bandes suffisamment étroites pour que toutes les propriétés radiatives autres que celles des gaz (luminance du rayonnement d'équilibre, propriétés radiatives des parois et des particules) puissent être considérées comme constantes sur chaque bande spectrale. La largeur des bandes varie de 5 cm^{-1} à plusieurs centaines de cm^{-1} selon les modèles et pour certains modèles selon la position sur le spectre. Les modèles de bandes sont les plus précis et, en général, les plus coûteux en temps calcul (si une méthode déterministe de résolution de l'ETR est utilisée, voir section 1.5).

La seconde classification repose sur le type de grandeur radiative que fournit le modèle. En effet, il existe des modèles formulés en coefficient d'absorption alors que certains fournissent une transmittivité. Les premiers ont l'avantage d'être compatibles avec les deux formulations de l'ETR et donc toutes les méthodes numériques de résolution de cette équation (voir section 1.5). En revanche, les seconds imposent la résolution de la formulation intégrale de l'ETR ce qui complique les calculs car le traitement des réflexions diffuses sur les parois est rendu difficile, à cause des corrélations spectrales [28, 37–41], avec la plupart des méthodes déterministes de résolution de l'ETR. La difficulté réside dans le traitement du terme $\overline{L(0, \vec{\Delta})\tau(0 \rightarrow s)^{\Delta\nu}}$ de la formulation intégrale de l'ETR moyennée sur une bande spectrale de largeur $\Delta\nu$. De la même façon, le traitement de la diffusion par des particules devient également délicat lorsque l'ETR est considérée sous sa forme intégrale (difficulté de prendre en compte les corrélations spectrales des termes de diffusion constructive supplémentaires).

1.2.3.1 Modèles de bandes

Parmi les modèles de bandes basés sur la transmittivité, les principaux sont : les modèles statistiques à bandes étroites (SNB), le modèle exponentiel à bandes larges (EWB) et le modèle CKFG (Correlated-K Fictitious Gases). Les modèles SNB sont obtenus en faisant certaines hypothèses sur la forme du spectre. Les deux principales formulations de ces modèles sont celle de Malkmus [42] (la plus précise) et celle de Goody [43, 44] et se distinguent par les hypothèses faites. Généralement, la largeur des bandes de ces modèles est constante et égale à 25 cm^{-1} . Ces modèles fournissent la transmittivité, moyennée sur une bande spectrale, d'une colonne gazeuse homogène et isotherme. Pour des milieux hétérogènes et anisothermes, l'utilisation de ces modèles nécessite le recours à une approximation, le plus souvent celle de Curtis-Godson [45]. Le modèle EWB, aussi appelé modèle d'Edwards, est une version dégradée des modèles SNB [46, 47]. Dans ce modèle, la notion de bande désigne l'ensemble des raies associées aux transitions entre les niveaux de rotation d'un ensemble de couples de niveaux de vibration. La largeur d'une bande peut alors atteindre plus de 1000 cm^{-1} . Dans le modèle CKFG [48, 49], le gaz réel est considéré comme un mélange de gaz fictifs et la méthode CK (présentée ci-dessous) est appliquée à chaque gaz fictif. La transmittivité du gaz réel est le

produit des transmittivités des gaz fictifs. Ce modèle est surtout dédié à la télédétection.

En ce qui concerne les modèles de bandes formulés en coefficient d'absorption, on peut citer : les modèles CK (Correlated-K ou parfois Cumulative-K), les modèles formulés en k -distributions et les « box models ». Le point de départ des deux premiers types de modèles est la méthode k -distribution [50], valable uniquement pour les milieux homogènes et isothermes. Elle consiste à remplacer l'intégration spectrale par une intégration sur le coefficient d'absorption en faisant intervenir sa fonction de distribution $f(k)$, comme suit :

$$\overline{\tau(l)}^{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp(-\kappa_\nu l) d\nu = \int_0^{+\infty} f(k) \exp(-kl) dk. \quad (1.22)$$

$f(k)dk$ représente la probabilité que κ_ν soit compris entre k et $k + dk$ sur la bande spectrale $\Delta\nu$. Deux méthodes sont généralement utilisées pour obtenir $f(k)$ [28, 51] : soit on applique directement sa définition mathématique à un spectre à haute résolution, soit on l'obtient par transformée de Laplace inverse de la transmittivité donnée par un modèle SNB (les hypothèses de ce modèle sont alors admises). L'extension de la méthode k -distribution à des milieux hétérogènes et anisothermes peut être envisagée de deux façons différentes : par l'utilisation de la méthode CK ou par le recours à une approximation comme celle de Curtis-Godson.

Dans la méthode CK, on définit la fonction de distribution cumulée :

$$g(k) = \int_0^k f(k') dk'. \quad (1.23)$$

Comme cette fonction est monotone croissante, elle admet une réciproque $k(g)$ en tout point s du milieu. La méthode CK est alors basée sur l'approximation suivante [28, 51, 52] :

$$\overline{\tau(l)}^{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp \left[- \int_0^l \kappa_\nu(s) ds \right] d\nu \simeq \int_0^1 \exp \left[- \int_0^l k(g, s) ds \right] dg. \quad (1.24)$$

L'intégration spectrale d'une fonction dépendant de κ_ν est donc remplacée par l'intégration, suivant un pseudo nombre d'onde adimensionné $dg = d\nu/\Delta\nu$, de cette fonction dépendant de $k(g)$. La fonction réciproque $k(g)$ étant monotone croissante (c'est simplement le coefficient d'absorption réordonné sur la bande $\Delta\nu$), l'intégration numérique peut être réalisée par une simple quadrature de Gauss. Les paramètres d'un modèle CK sont généralement obtenus, soit à partir d'un calcul raie par raie [48, 53], soit à partir des paramètres d'un modèle SNB [51, 54, 55]. La largeur des bandes d'un modèle CK varie typiquement entre 25 et 400 cm^{-1} .

Récemment, de Lataillade [5, 56] a généré la fonction $f(k)$ à partir d'un modèle SNB et a généralisé l'approximation de Curtis-Godson pour étendre l'utilisation de cette fonction à des mélanges de gaz anisothermes et hétérogènes.

Dans les « box models », on considère un coefficient d'absorption moyen sur chaque bande spectrale. Cette approche n'a aucun sens physique pour des applications à pression atmosphérique. En revanche, elle devient très intéressante (car très simple) lorsque la pression est élevée car le spectre est beaucoup plus lisse (voir figure 1.4). Pierrot [39] et Joumani [1] ont donc développé des modèles HPBM (High Pressure Box Model) pour des applications à haute pression : chambres de combustion aéronautiques et propulseurs à propergol solide. Dans ces modèles, le coefficient d'absorption d'un constituant gazeux est égal à la quantité $xp\bar{k}$ où x est

la fraction molaire de ce constituant, p la pression et \bar{k} un des paramètres intervenant dans l'expression de la transmittivité donnée par les modèles SNB.

On peut citer également les travaux récents de Song [57–59] qui développe un modèle à bandes étroites en appliquant le principe du modèle WSGG (voir paragraphe suivant) sur chaque bande. Enfin, il faut noter qu'il existe aussi des modèles hybrides comme les modèles EWB-CK [60–63].

1.2.3.2 Modèles globaux

Les deux principaux modèles globaux de rayonnement des gaz sont le modèle « somme pondérée de gaz gris » (WSGG) [25,64] et le modèle TTNH (Total Transmittance Non Homogeneous) [65]. Contrairement au modèle TTNH, le modèle WSGG est formulé en coefficient d'absorption et est très utilisé à cause de sa simplicité de mise en œuvre (en pratique, 3 à 5 gaz gris sont considérés). Cependant, ce modèle est très imprécis dans sa formulation initiale. Il a d'ailleurs été récemment reformulé par Denison et Webb [66–68] pour devenir le modèle SLW (Spectral Line based WSGG). Ces auteurs ont étendu de manière plus précise la formulation du modèle WSGG à des milieux anisothermes en corrélant des spectres à différentes températures de façon très similaire à la méthode CK. Cependant, ce modèle est très dépendant du choix de la température de référence (et ce choix est délicat dans un milieu anisotherme). Pour des mélanges de gaz absorbants, Denison et Webb se sont contentés d'utiliser comme fonction de distribution le produit des fonctions de distribution, hypothèse contestée par Pierrot et al. [69]. Le modèle ADF [39,69,70] diffère du modèle SLW uniquement par l'expression des coefficients de pondération entre différentes valeurs de k [31]. Comme pour le modèle CK, la notion de gaz fictifs a été introduite dans le modèle ADF, ce qui a conduit au modèle ADFFG [39,69], afin de diminuer l'effet de sur-corrélation entre l'émission par un milieu chaud et l'absorption par le même milieu à froid. L'avantage principal des modèles globaux par rapport aux modèles de bandes est le gain en temps de calcul. Or, pour des mélanges de gaz absorbants, ce gain devient très faible, voire inexistant, pour les modèles SLW et ADF.

1.3 Physique et modélisation du rayonnement des particules

Les particules rencontrées dans les systèmes en combustion peuvent être de natures et de tailles très différentes [34] : gouttelettes de combustible liquide et particules de suie (solides) dans les flammes d'hydrocarbures (chambres de combustion de moteurs aéronautiques et automobiles, grande majorité des flammes de laboratoire étudiées . . .), particules d'alumine liquide dans les propulseurs à propergol solide aluminisé (lanceurs spatiaux, missiles), particules de charbon dans les lits fluidisés circulants . . . Ces particules émettent, absorbent et diffusent du rayonnement, mais la diffusion n'est significative que si elles sont de taille suffisamment importante.

Dans la suite de cette section, seules les suies vont être considérées, excepté dans le premier paragraphe où les fondements théoriques et le modèle de Mie sont présentés. Pour plus d'informations sur la modélisation des propriétés radiatives des particules d'alumine liquide et des transferts radiatifs en propulsion solide, le lecteur pourra consulter les références [1, 2, 71–78].

L'influence des gouttelettes de combustible liquide sur les transferts radiatifs est en pratique toujours négligée [34, 79, 80], alors que ces particules sont certainement diffusantes (en revanche, elles sont généralement très peu absorbantes).

Pour plus d'informations concernant les points abordés dans la suite de cette section, le lecteur pourra consulter l'ouvrage de Bohren et Huffman [81] pour les fondements théoriques et le modèle de Mie. L'article de Viskanta et Mengüç [34] fournit une revue détaillée des problèmes de diffusion dans les systèmes en combustion et de leur traitement. Récemment, Baillis et Sacadura [82], dans un article de revue sur les transferts radiatifs dans les milieux dispersés, ont fait le point des avancées récentes sur la modélisation des propriétés radiatives des particules de suie et ont fourni de nombreuses références.

1.3.1 Fondements théoriques et modèle de Mie

1.3.1.1 Cas d'une particule isolée

Le processus physique élémentaire, à l'origine de la diffusion, est l'interaction entre un champ électromagnétique (une onde plane dans le cas le plus simple) et une particule. Supposons qu'une onde plane monochromatique (onde incidente) rencontre une particule. Une fraction de l'onde incidente est absorbée par la particule, le reste étant, par définition, diffusé. Ce dernier terme regroupe donc tout ce qui repart de la particule dans toutes les directions. Par conséquent, l'onde diffusée est composée de l'onde diffractée, de l'onde réfléchie et, éventuellement, de l'onde transmise si la particule est semi-transparente (onde réfractée).

Les flux absorbé et diffusé par la particule sont calculables en toute rigueur, par résolution des équations de Maxwell, si la nature (déterminée par l'indice optique complexe $\hat{n}_{\nu p}$), la taille et la forme de la particule sont connues [81]. Les phénomènes d'absorption et de diffusion sont alors caractérisés par des efficacités ($Q_{\nu a}$ et $Q_{\nu d}$) obtenues en adimensionnant les sections efficaces correspondantes par la surface apparente de la particule dans la direction d'incidence.

Dans le cas d'une particule sphérique, homogène et isotherme (modèle de Mie qui a depuis été étendu aux cas de particules cylindriques et ellipsoïdales), $Q_{\nu a}$ et $Q_{\nu d}$ ont des expressions analytiques complexes [81], fonction de l'indice optique complexe $\hat{n}_{\nu p}$ de la particule et du paramètre de taille $x_{\nu p}$ défini de la façon suivante :

$$x_{\nu p} = \frac{\pi D_p}{\lambda} = \pi \nu D_p, \quad (1.25)$$

où D_p est le diamètre de la particule sphérique. Ces expressions analytiques se simplifient pour le cas limite $x_{\nu p} \ll 1$, appelé domaine de Rayleigh, caractérisant le comportement radiatif d'une particule petite par rapport à la longueur d'onde λ du rayonnement incident (l'autre cas limite $x_{\nu p} \gg 1$ est le domaine de l'optique géométrique caractéristique d'une grosse particule). En effet, pour $x_{\nu p} \ll 1$, ces expressions sont les suivantes :

$$Q_{\nu a} = -4x_{\nu p} \operatorname{Im} \left(\frac{\hat{n}_{\nu p}^2 - 1}{\hat{n}_{\nu p}^2 + 2} \right), \quad (1.26)$$

$$Q_{\nu d} = \frac{8}{3} x_{\nu p}^4 \left| \frac{\hat{n}_{\nu p}^2 - 1}{\hat{n}_{\nu p}^2 + 2} \right|^2, \quad (1.27)$$

où Im désigne la partie imaginaire d'un nombre complexe. On constate que l'efficacité de diffusion est en $x_{\nu p}^4$. Ceci signifie que, pour les petites particules sphériques, homogènes et isothermes, la diffusion (appelée diffusion Rayleigh) est négligeable par rapport à l'absorption.

1.3.1.2 Cas d'une assemblée de particules

Ces résultats sont facilement généralisables au cas d'une assemblée de particules si on fait l'hypothèse dite de diffusion indépendante, c'est-à-dire qu'on suppose que deux particules voisines sont suffisamment éloignées pour considérer que les effets d'interférence entre les ondes diffusées (provenant de la même onde incidente) par les deux particules sont négligeables, ainsi que les effets d'écran. Les critères précis de diffusion dépendante font toujours l'objet de recherches. Cependant, d'après [83], la diffusion est toujours indépendante lorsque la fraction volumique des particules f_V est inférieure à 10^{-3} . C'est toujours le cas des fractions volumiques de suie, qui, dans les cas les plus défavorables (haute pression), peuvent atteindre 100 ppm soit 10^{-4} .

Dans ces conditions, et si le volume élémentaire qu'on cherche à caractériser est optiquement mince, les effets d'absorption et de diffusion par les différentes particules sont additifs. Par conséquent, le coefficient monochromatique d'absorption d'un volume élémentaire contenant des petites particules sphériques, homogènes et isothermes, s'écrit :

$$\kappa_{\nu p} = \int_0^{+\infty} \frac{\pi D_p^2}{4} Q_{\nu a}(D_p) \mathcal{N}(D_p) dD_p, \quad (1.28)$$

où $\mathcal{N}(D_p)dD_p$ est le nombre de particules par unité de volume ayant un diamètre compris entre D_p et $D_p + dD_p$. En combinant les équations (1.25), (1.26) et (1.28), après avoir explicité l'expression de la partie imaginaire, et en faisant apparaître la fraction volumique des particules définie par la relation :

$$f_V = \int_0^{+\infty} \frac{\pi D_p^3}{6} \mathcal{N}(D_p) dD_p, \quad (1.29)$$

on obtient l'expression finale du coefficient monochromatique d'absorption :

$$\kappa_{\nu p} = \frac{36\pi n_{\nu p} \chi_{\nu p}}{(n_{\nu p}^2 - \chi_{\nu p}^2 + 2)^2 + (2n_{\nu p} \chi_{\nu p})^2} \nu f_V = A_{\nu} \nu f_V, \quad (1.30)$$

où $n_{\nu p}$ et $\chi_{\nu p}$ sont respectivement les parties réelle et imaginaire de l'indice optique complexe $\hat{n}_{\nu p}$. On rappelle que cette formule est uniquement valable pour des particules sphériques, homogènes et isothermes dont le diamètre D_p est tel que : $\pi \nu D_p \ll 1$. De la même manière, on peut établir, à partir de l'efficacité de diffusion, les expressions analytiques du coefficient monochromatique de diffusion et de la fonction de phase monochromatique de diffusion.

1.3.2 Caractérisation des particules de suie

La présence de particules de suie dans un écoulement réactif se traduit par une flamme jaune et lumineuse. Elles sont également responsables de la fumée noire parfois présente au-dessus de la zone lumineuse (ce sont des particules de suie sorties de la zone chaude avant

d'être totalement oxydées). Les suies sont des particules solides composées essentiellement de carbone. Leur présence est donc due à la combustion imparfaite d'un combustible carboné.

L'objectif de ce paragraphe est de caractériser optiquement (indice optique complexe) et géométriquement (taille et forme) les particules de suie en s'appuyant sur des études expérimentales et théoriques récentes disponibles dans la littérature. On n'abordera ici que très succinctement le thème de la formation des suies qui a fait l'objet d'études récentes à l'ONERA [3, 4]. Cet axe est actuellement très étudié et de nombreuses références bibliographiques sont données par de Lataillade [5]. On rappelle seulement que leur mécanisme de formation est complexe et qu'il fait intervenir diverses espèces gazeuses minoritaires telles que le benzène C_6H_6 , l'acétylène C_2H_2 , le radical OH ... dépendant directement du mécanisme réactionnel utilisé pour décrire la réaction de combustion. Par conséquent, leur composition dépend du combustible considéré.

1.3.2.1 Indice optique complexe des particules de suie

Cet indice caractérise optiquement une particule. En toute rigueur, il varie à l'intérieur de la particule en fonction de la composition et de la température. Cependant, on suppose généralement que les particules de suie sont homogènes et isothermes et que toutes les particules présentes dans une flamme ont la même composition.

Smyth et Shaddix [84] ont récemment répertorié l'ensemble des valeurs de n_{vp} et χ_{vp} disponibles dans la littérature et ont présenté l'historique de la formule la plus utilisée dans le visible quel que soit le combustible : $\hat{n}_p = 1,57 - 0,56i$. Dalzell et Sarofim [85] donnent les valeurs de ces deux indices, entre 0,4 et 10 μm , pour des suies à température ambiante provenant de flammes de propane et d'acétylène. Ils mettent en évidence l'influence du rapport du nombre d'atomes d'hydrogène sur le nombre d'atomes de carbone dans les particules de suie (noté H/C par la suite) et supposent que leurs résultats sont valables à haute température. Lee et Tien [86] constatent au contraire que n_{vp} et χ_{vp} sont quasiment indépendants du rapport H/C et que leurs valeurs à haute température diffèrent de celles à température ambiante (cas du plexiglass et du polystyrène entre 0,3 et 20 μm). Batten [87] s'est intéressé aux suies d'une flamme de kérosène. Chang et Charalampopoulos [88, 89] donnent des expressions analytiques de n_{vp} et χ_{vp} en fonction de λ (valables entre 0,4 et 30 μm) pour des suies de propane. Une équipe du CORIA [90, 91] a également proposé des valeurs de ces indices entre 0,4 et 5 μm pour des flammes de méthane, propane et éthylène. Leurs données sont sensibles au rapport H/C : une baisse de ce rapport conduit à une augmentation significative des valeurs de n_{vp} et χ_{vp} . De plus, pour l'éthylène qui conduit à un rapport H/C inférieur à 0,2, le coefficient d'absorption monochromatique κ_λ est proportionnel à λ^{-1} sur tout l'intervalle de longueur d'onde considéré, alors que pour le méthane ($H/C \geq 0,2$), κ_λ est proportionnel à λ^{-2} pour $0,4 \leq \lambda < 1 \mu m$ et à $\lambda^{-0,6}$ pour $1 \leq \lambda \leq 5 \mu m$. Enfin, très récemment, des études [92–94] basées sur la théorie RDG-PFA (Rayleigh-Debye-Gans/Polydisperse-Fractal-Aggregate [95]) ont reporté de nouvelles valeurs de l'indice optique complexe, insensibles au type de combustible utilisé.

Les valeurs reportées dans ces articles varient de façon significative d'une étude à l'autre et parfois les conclusions sont même contradictoires en ce qui concerne l'influence des paramètres température et rapport H/C, comme le soulignent Köylü et Faeth [94]. Il est donc très difficile de choisir les valeurs de \hat{n}_{vp} correspondant aux applications qu'on souhaite traiter. A titre d'illustration de l'importance du choix de la valeur de \hat{n}_{vp} , certains auteurs [85, 86, 89, 91, 96]

ont montré l'influence de cette valeur sur les fractions volumiques de suie déduites de mesures d'extinction.

1.3.2.2 Aspect géométrique des particules de suie

De nombreuses études expérimentales et théoriques [97–102] ont récemment été menées sur des flammes de diffusion laminaire et turbulente, pour plusieurs combustibles (acétylène, propylène, éthylène, propane . . .) afin de déterminer les caractéristiques géométriques des particules de suie. Il a été clairement mis en évidence deux types de particules de suie : des particules quasi-sphériques précurseurs (ou primaires) de 20 à 60 nm de diamètre et des agrégats constitués de 2 à 10^4 particules précurseurs. Les agrégats ont des formes complexes (structure fractale) et leur dimension dans une direction donnée peut varier de 0,1 à 10 μm (voir figure 1.5). Les tailles de ces deux types de particules de suie varient selon les combustibles et les agrégats ont une distribution en taille très étendue dans une flamme donnée. En revanche, la structure fractale des agrégats semble quasiment indépendante du combustible.

Köylü et Faeth [98] insistent sur le fait que les suies (dans les quatre flammes étudiées) n'ont pas un comportement de diffusion Rayleigh et que des mesures basées sur cette hypothèse peuvent conduire à une surestimation de 70% de la fraction volumique de suie. Ceci n'est pas seulement dû à leur taille. En effet, la forme des particules joue également un rôle très important. Par exemple, Mackowski et al. [103] ont montré que l'extinction par des petites particules cylindriques est deux à cinq fois plus importante que celle due à des petites particules sphériques. Ils ont ensuite modélisé le comportement radiatif des agrégats comme celui d'un mélange de sphères et de petits cylindres infinis [104]. Farias et al. [105] ont récemment montré que, dans les conditions typiques d'une flamme (température comprise entre 1500 et 2000 K et produit $f_V L$ compris entre 10^{-8} et 10^{-6} m), la prise en compte du phénomène d'agrégation des particules conduit à une augmentation inférieure à 13% de l'émissivité totale et à des variations inférieures à 25% des émissivités spectrales. Il faut signaler que ces valeurs maximales ont été obtenues pour le nombre maximal de particules par agrégat qu'ils ont testé (256). Ces écarts seraient donc certainement plus importants pour des nombres plus élevés de particules par agrégat.

Afin de modéliser correctement les phénomènes d'absorption et de diffusion par les agrégats de suie, une nouvelle théorie, appelée RDG-PFA, a été développée [95]. Elle s'appuie sur l'approximation de diffusion Rayleigh-Debye-Gans et suppose que les agrégats ont une structure fractale et qu'ils sont composés de petites particules sphériques jointives ayant toutes la même diamètre. Enfin, il faut signaler que des études sur la simulation numérique de formation d'agrégats ont également été menées [101, 106, 107].

1.3.3 Modélisation du comportement radiatif des suies dans les études numériques de combustion

La prédiction des fractions volumiques de suie dans un écoulement réactif turbulent tridimensionnel est un problème complexe, difficile à résoudre numériquement et nécessitant des temps de calcul importants. Dans les modèles de formation des suies, on suppose généralement qu'une particule de suie est homogène et isotherme. Par ailleurs, on dispose souvent de peu d'informations sur la forme de ces particules car on ne fait pas intervenir leur forme réelle dans



Figure 1.5: Photographie obtenue par TEM (Transmission Electron Microscopy) d'agrégats de suie collectés dans une flamme de diffusion turbulente acétylène/air (photo issue de [97]).

ces modèles (la formation des agrégats est rarement prise en compte et il est généralement simplement possible d'obtenir le diamètre équivalent de la particule dont on connaît la masse et la masse volumique). Par conséquent, dans les études de combustion, les particules de suie sont très souvent supposées sphériques (il est alors possible de définir le paramètre de taille $x_{\nu p}$).

A 1500 K, le domaine spectral utile en transfert s'étend jusqu'à environ 10000 cm^{-1} ; pour ces nombres d'onde, $x_{\nu p}$ est inférieur à 0,3 (limite des petites particules sphériques, homogènes et isothermes pour lesquelles la diffusion est négligeable par rapport à l'absorption) pour les particules ayant un diamètre inférieur à 100 nm. Cependant, à cette température, la luminance isotrope du rayonnement d'équilibre est maximale aux environs de 3000 cm^{-1} ; à ce nombre d'onde, la diffusion est négligeable pour les particules ayant un diamètre inférieur à 300 nm. Il apparaît donc raisonnable de négliger, en première approximation, la diffusion du rayonnement par les particules de suie dans les calculs de transferts radiatifs dans les systèmes en combustion, bien que la distribution en taille des agrégats soit très mal connue et qu'ils soient non-sphériques (donc plus diffusants). Les particules de suie étant supposées homogènes, isothermes, sphériques et de petites tailles, leur coefficient d'absorption est donné par la relation (1.30). Le problème se réduit donc à choisir les valeurs des parties réelle et imaginaire de $\hat{n}_{\nu p}$. Comme ces valeurs ne sont pas connues pour tous les combustibles, sur tout le spectre, pour différentes températures, et comme les différentes études disponibles dans la littérature donnent parfois des valeurs et des évolutions spectrales différentes, le coefficient monochromatique d'absorption des suies est généralement exprimé de la façon suivante :

$$\kappa_{\nu}^{sui e} = K_s \nu f_V, \quad (1.31)$$

où K_s est une constante sans dimension.

Le choix de la constante K_s est délicat. Afin de nous guider dans cette tâche, l'évolution spectrale de la constante multiplicative A_{ν} dans l'expression (1.30) du coefficient d'absorption monochromatique a été représentée sur la figure 1.6 pour des valeurs de n_{ν} et de χ_{ν} proposées par différents auteurs.

Dans le même but, les principales valeurs de K_s utilisées dans les études de rayonnement des flammes vont être mentionnées. De Ris [108] indique que la constante K_s est comprise entre les valeurs 4 et 10 et utilise la valeur moyenne 7. Viskanta et Mengüç [34] reportent des valeurs de K_s disponibles dans la littérature comme $K_s = 4,0$ pour une flamme d'acétylène, $K_s = 4,9$ pour le propane et $K_s = 7$ pour les particules de suie rencontrées dans les chambres de combustion. Cette dernière valeur, initialement préconisée par Hottel et Sarofim [25], a été utilisée pour diverses applications : pour des flammes de diffusion d'éthylène [15, 109], pour des flammes de diffusion de méthane [7, 110], dans un four à charbon pulvérisé [111], dans un moteur diesel [80], pour des feux compartimentés [112] . . . Liu et Rogg [113] utilisent $K_s = 7,194$ pour différentes flammes laminaires (une telle précision paraît quelque peu exagérée compte tenu du fait que la même valeur est utilisée pour plusieurs combustibles). Soufiani et Taine [40, 41] utilisent généralement $K_s = 5,5$ en s'appuyant sur les travaux de Buckius et Tien [114]. Cette valeur a récemment été reprise par de Lataillade [5] pour modéliser les propriétés radiatives des particules de suie dans une flamme laminaire de méthane. Son et Brewster [115] utilisent $K_s = 5$ pour calculer les transferts radiatifs dans une flamme de propergol solide non métallisé. Sivathanu et Gore considèrent $K_s = 4,6$ pour modéliser le coefficient d'absorption des particules de suie d'une flamme laminaire de diffusion d'acétylène.

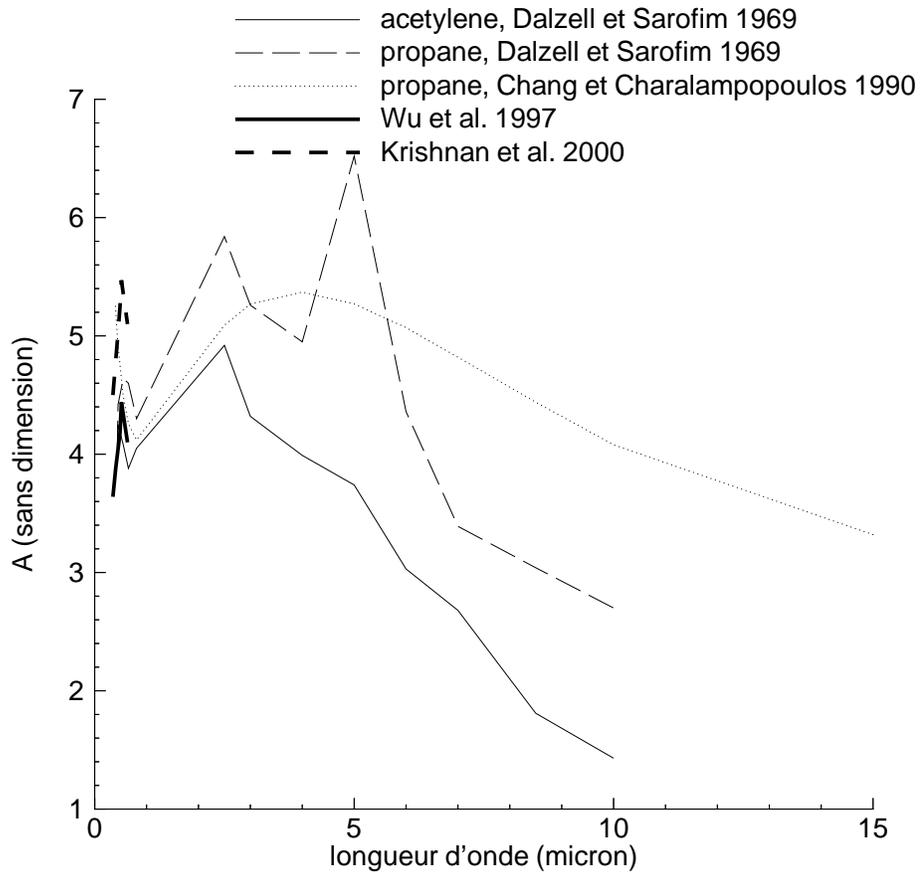


Figure 1.6: Evolution de la constante multiplicative A définie par l'équation (1.30) en fonction du nombre d'onde.

Souvent, dans les études de combustion, afin d'alléger au maximum les calculs de transferts radiatifs, la flamme est considérée comme un milieu semi-transparent gris, ce qui n'a pas de fondement physique. On considère alors pour les suies un coefficient d'absorption total (intégré sur tout le spectre) défini, dans chaque maille homogène et isotherme, par la relation :

$$\kappa^{sui\epsilon} = \frac{\pi}{\sigma_s T^4} \int_0^{+\infty} \kappa_\nu^{sui\epsilon} L_\nu^0(T) d\nu, \quad (1.32a)$$

$$= \frac{15k_B}{h_P c_0 \pi^4} (4!) \left(\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n^5} \right) K_s T f_V, \quad (1.32b)$$

$$\simeq 266 K_s T f_V, \quad (1.32c)$$

où σ_s est la constante universelle de Stefan égale à $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2/\text{K}^4$ (la constante environ égale à 266 a une dimension, elle s'exprime en $\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$). Cette expression, appelée moyenne de Planck du coefficient d'absorption, ne peut en théorie être utilisée que lorsque la flamme est optiquement mince ou lorsqu'elle est isotherme et que le milieu environnant est froid (rayonnement émis négligeable). Cette formule a été très souvent utilisée au-delà de ce domaine de validité. Said et al. [8] utilisent $\kappa^{sui\epsilon} = (aT + b)f_V$ avec $a = 666,6 \text{ m}^{-1}\text{K}^{-1}$ et $b = 5,334 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}$ (dans l'article a et b sont donnés en cm^{-1} mais il doit s'agir d'une erreur) pour des flammes de diffusion d'éthylène.

1.4 Interaction rayonnement/turbulence (IRT)

Les transferts radiatifs sont fortement couplés avec la turbulence. L'influence de la turbulence sur les transferts radiatifs se fait par l'intermédiaire des fluctuations turbulentes de température, de fraction volumique de suie, de fractions molaires des gaz absorbants (H_2O , CO_2 , $\text{CO} \dots$) et de pression. Les plus importantes sont les fluctuations de température compte tenu de la forte non-linéarité de la dépendance en température de la luminance du rayonnement d'équilibre. De nombreuses études [13, 18–22, 116–121] mettent en évidence l'influence de ces fluctuations turbulentes sur les transferts radiatifs. Par exemple, Gore et Faeth [18, 19] ont montré que les transferts radiatifs calculés en tenant compte des fluctuations turbulentes peuvent être augmentés de 50 à 300% dans une flamme de diffusion d'éthylène et de 40 à 100% dans une flamme de diffusion d'acétylène, par rapport à un calcul basé sur des grandeurs moyennes.

En revanche, dans le domaine de la combustion, l'effet des échanges radiatifs sur la turbulence est beaucoup moins étudié. Pourtant, des études ont montré que le rayonnement modifie les structures turbulentes [116, 118, 122–124]. En particulier, les transferts radiatifs ont un effet destructeur plus ou moins important sur les structures turbulentes en fonction de l'épaisseur optique de ces dernières. Cet effet est indirect : les transferts radiatifs agissent sur le champ de température, ce qui entraîne des modifications des structures turbulentes. Cet effet est dissipatif car le rayonnement a tendance à homogénéiser le champ de température moyenne et à détruire les fluctuations de température. Cet effet est d'autant plus important que la variance des fluctuations de température est élevée.

Il reste à traduire sous forme mathématique l'interaction rayonnement/turbulence (IRT). Pour cela, considérons un milieu non diffusant (uniquement par souci de simplification car

l'extension à un milieu diffusant peut se faire sans problème). Lorsque l'IRT n'est pas prise en compte, l'ETR s'écrit :

$$\frac{\partial L_\nu(s, \vec{\Delta})}{\partial s} = \kappa_\nu(\langle T \rangle, \langle p \rangle, \langle f_V \rangle, \langle x_i \rangle) \left[L_\nu^0(\langle T \rangle) - L_\nu(s, \vec{\Delta}) \right], \quad (1.33)$$

où la notation $\langle \rangle$ désigne la moyenne temporelle (prise à l'abscisse curviligne s dans cette équation), p la pression et x_i la fraction molaire du gaz absorbant i . La luminance monochromatique directionnelle incidente $L_\nu(s, \vec{\Delta})$ dépend des grandeurs moyennes de l'ensemble du domaine de calcul considéré.

Lorsqu'on souhaite prendre en compte l'IRT, l'ETR doit être écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \langle L_\nu(s, \vec{\Delta}) \rangle}{\partial s} = \langle \kappa_\nu(T, p, f_V, x_i) L_\nu^0(T) \rangle - \langle \kappa_\nu(T, p, f_V, x_i) L_\nu(s, \vec{\Delta}) \rangle. \quad (1.34)$$

Le premier terme du second membre, qui correspond à l'émission, traduit les corrélations entre les fluctuations du coefficient d'absorption et celles de la luminance du rayonnement d'équilibre. Si les fluctuations de T , p , f_V et x_i sont connues, ce terme est assez facile à calculer car il ne fait intervenir que des grandeurs locales (à l'abscisse curviligne s). La difficulté de la prise en compte de l'IRT réside dans le calcul du second terme du second membre, qui correspond à l'absorption (il faut préciser que cette difficulté n'apparaît que si une méthode déterministe de résolution de l'ETR est utilisée, elle n'apparaît pas avec les méthodes statistiques, voir section 1.5). En effet, ce terme traduit les corrélations entre les fluctuations du coefficient d'absorption local et celles de la luminance incidente qui dépendent des fluctuations de T , p , f_V et x_i des différentes mailles traversées par le rayonnement incident avant d'atteindre le point d'abscisse curviligne s .

Pour cette raison, un grand nombre d'études [13, 20–22], n'utilisant pas de méthode statistique de résolution de l'ETR, font appel à une hypothèse simplificatrice. Cette hypothèse consiste à écrire :

$$\langle \kappa_\nu(T, p, f_V, x_i) L_\nu(s, \vec{\Delta}) \rangle \simeq \langle \kappa_\nu(T, p, f_V, x_i) \rangle \langle L_\nu(s, \vec{\Delta}) \rangle, \quad (1.35)$$

c'est-à-dire à négliger les corrélations entre les fluctuations temporelles du coefficient d'absorption et celles de la luminance incidente, ce qui simplifie considérablement les calculs. Cette approximation, parfois appelée *Optically Thin Fluctuation Approximation* (OTFA, appellation initialement due à Kabashnikov [125, 126]) dans la littérature, a été discutée dans plusieurs articles [16, 121, 125, 126]. Cette hypothèse peut s'appliquer raisonnablement lorsque la taille caractéristique ℓ_t des structures turbulentes cohérentes est suffisamment petite pour qu'elles soient considérées optiquement minces, c'est-à-dire si :

$$\langle \kappa_\nu(T, p, f_V, x_i) \rangle \ell_t \ll 1. \quad (1.36)$$

L'utilisation de cette approximation peut donc entraîner des erreurs difficiles à évaluer étant donné la forte dynamique présente dans un spectre en coefficient d'absorption d'un mélange gazeux (voir figure 1.3). Il est en effet fort probable que ce critère soit respecté dans certaines zones spectrales et qu'il ne le soit pas dans d'autres.

Cependant, il est possible de prendre en compte l'IRT sans recourir à cette hypothèse simplificatrice. Faeth et ses collaborateurs [18, 19, 119, 127, 128] ont développé une méthode

stochastique (qui a ensuite été reprise [129]) consistant à découper un chemin optique en une succession de structures turbulentes cohérentes supposées homogènes et isothermes. La taille ℓ_t de ces structures turbulentes est considérée égale ou proportionnelle à l'échelle de longueur intégrale Λ de la turbulence définie par (voir section 4.2.3.1) :

$$\Lambda = C_\mu^{3/4} \frac{\langle k \rangle^{3/2}}{\langle \epsilon_k \rangle}, \quad (1.37)$$

où $\langle k \rangle$ est l'énergie cinétique turbulente moyenne, $\langle \epsilon_k \rangle$ son taux moyen de dissipation et C_μ une constante sans dimension égale à 0,09. Les propriétés thermophysiques (température, fractions molaires des gaz absorbants et fraction volumique de suie) caractérisant chaque structure turbulente sont tirées au sort en utilisant une fonction densité de probabilité (PDF) monodimensionnelle de la richesse et des relations de type flammelette reliant ces propriétés à la richesse. La PDF de richesse est obtenue en résolvant une équation de transport de la variance des fluctuations de richesse (modèle à trois équations supplémentaires, les deux autres étant celles de k et de ϵ_k).

Mignon [118] a développé un modèle à quatre équations supplémentaires (k , ϵ_k , ϑ la variance des fluctuations de température et ϵ_ϑ son taux de dissipation) analogue à celui présenté par Nagano et Kim [130]. Il a généralisé un modèle $k - \epsilon_k$ modifié (celui de Lam et Bremhorst [131]) au transport de ϑ et ϵ_ϑ , y compris dans le traitement des zones pariétales. Afin de réaliser des calculs couplés rayonnement/convection turbulente, des termes sources radiatifs sont présents dans l'équation de l'énergie et dans les équations de transport de ϑ et ϵ_ϑ (l'effet du rayonnement sur la turbulence est donc également pris en compte). Ces termes sources prennent en compte les fluctuations de température. Par la suite, ce modèle a été étendu aux milieux hétérogènes (mélanges à deux espèces) par El Ammouri [116] qui a introduit deux équations de transport supplémentaires : une pour la variance de fraction massique d'une des deux espèces et une pour son taux de dissipation.

Les fluctuations de l'ensemble des grandeurs thermophysiques intervenant dans les calculs de transferts radiatifs peuvent être obtenues également par les modèles à équation de transport de PDF. Dans le chapitre 4, une approche de ce genre, dans laquelle l'équation de transport de la PDF est résolue par une méthode de Monte Carlo, sera présentée.

1.5 Méthodes de résolution de l'ETR

La méthode optimale à utiliser pour résoudre l'ETR dépend fortement de la nature du milieu et de ses propriétés radiatives et thermophysiques. Plus précisément, pour choisir la méthode à mettre en œuvre, il faut regarder si le milieu est diffusant ou non, s'il est optiquement mince ou optiquement épais, si les parois sont absorbantes ou réfléchissantes, si les réflexions sur ces dernières sont spéculaires ou isotropes ... Enfin, il faut également tenir compte de ses objectifs (précision recherchée, traitement de géométries complexes, prise en compte des corrélations spectrales et de l'IRT ...) et des moyens informatiques disponibles.

Par conséquent, depuis le début des années 1950, de nombreuses méthodes numériques de résolution de l'ETR ont été développées [34, 132]. Ci-dessous, les principales méthodes de transfert sont présentées brièvement. Pour plus de détails concernant ces méthodes, le lecteur pourra consulter des ouvrages généraux de transferts radiatifs comme ceux de Siegel

et Howell [24], de Modest [26] ou de Brewster [27]. Il existe plusieurs façons de classifier ces méthodes ; ici, on présente d'abord les méthodes déterministes puis on aborde les méthodes statistiques.

1.5.1 Méthodes déterministes

Les méthodes déterministes les plus générales et les plus rigoureuses sont les méthodes de tracés de rayons. L'espace angulaire entourant un point de calcul est découpé en angles solides élémentaires. Ces angles solides sont construits depuis un point du volume ou des frontières jusqu'à la première frontière rencontrée, puis sont découpés en colonnes homogènes isothermes. L'ETR est alors résolue sous sa forme intégrale le long des axes de ces angles solides. On effectue cette opération pour chaque bande spectrale et pour tous les points du volume et des frontières. On réitère cette démarche jusqu'à la convergence si les parois sont réfléchissantes (une seule itération suffit si toutes les frontières du domaine sont noires). Ces méthodes sont précises mais requièrent des temps de calcul importants si des discrétisations fines sont utilisées. De plus, ces méthodes convergent très lentement si les parois sont très réfléchissantes [133] et leur extension à des milieux diffusants nécessite un important volume de calculs supplémentaires. Enfin, dans les géométries 3D complexes (par exemple avec des obstacles internes), la gestion des ombres portées complique sérieusement les calculs géométriques. La méthode des transferts discrets [134–136] (Discrete Transfer Method dans la littérature) est la méthode de tracés de rayons la plus connue et la plus utilisée dans le domaine de la combustion [18, 19, 113, 128, 137, 138]. Elle est par conception plus précise pour le calcul des flux que pour celui des puissances.

La méthode des zones [25, 139] consiste à calculer, préliminairement, tous les facteurs de forme (appelés aussi facteurs d'échange ou surfaces efficaces) entre chaque zone (maille volumique et surfacique) du domaine, avant de les introduire dans les équations reliant les luminances partantes et incidentes. La méthode des zones est impraticable dans les situations qui nous intéressent. D'une part, le calcul des facteurs d'échange est rendu très délicat lorsque la géométrie est complexe et qu'elle contient un milieu semi-transparent hétérogène et diffusant. D'autre part, cette méthode perd tout son intérêt quand on considère une discrétisation spectrale car il faut calculer ces facteurs pour chaque bande spectrale.

Les méthodes d'approximation différentielle consistent à décomposer la luminance, qui dépend du nombre d'onde, de la position et de la direction, sur une base complète de fonctions ne dépendant que de la direction. Les méthodes des harmoniques sphériques ou méthodes P_N [140, 141] sont des cas particuliers de ces méthodes d'approximation différentielle. Dans les méthodes P_N , la base utilisée est la base des harmoniques sphériques. Ces méthodes sont, en pratique, mises en œuvre pour des ordres faibles (P_1 ou P_3), mais ces troncatures sont très grossières dans de nombreuses applications. En particulier, ces méthodes ne peuvent pas traiter les cas de parois ayant des propriétés radiatives directionnelles et donnent de très mauvais résultats dans le cas d'une paroi noire et froide. D'autre part, les méthodes P_N sont difficilement compatibles avec la prise en compte des corrélations spectrales dans un modèle de rayonnement des gaz formulé en transmittivité.

Dans les méthodes des ordonnées discrètes (MOD) [1, 142–148], l'intégrale angulaire de diffusion est approximée par une technique de quadrature de degré N , qui définit $N(N+2)$ directions privilégiées auxquelles sont affectés des poids. Ainsi l'ETR sous forme locale (équation intégro-différentielle) est remplacée par un système de $N(N+2)$ équations différentielles

linéaires couplées. Les quadratures les plus souvent utilisées sont les quadratures S_N (d'où le nom de méthodes S_N). Les méthodes des ordonnées discrètes sont adaptées aux milieux fortement diffusants mais donnent de moins bons résultats dans les milieux où l'absorption est prépondérante devant la diffusion. Comme les MOD, les méthodes d'interpolation reposent sur le calcul des champs de luminance dans des directions privilégiées. Le schéma d'ensemble du calcul est très proche de celui des MOD. Cependant, alors que dans les MOD les luminances sont obtenues de proche en proche en faisant un bilan sur une maille, dans les méthodes d'interpolation les luminances sont calculées de proche en proche par interpolation locale. Une variante précise des méthodes d'interpolation [40, 41] consiste à ne pas utiliser de quadrature directionnelle, donnant des résultats très imprécis lorsque le champ de luminance est anisotrope, mais à utiliser une discrétisation directionnelle fine. Les MOD et les méthodes d'interpolation fournissent des résultats précis sur les flux pariétaux mais moins précis sur les puissances volumiques. Elles sont difficilement compatibles avec des modèles de rayonnement des gaz formulés en transmittivité. Enfin, ces méthodes, tout comme les méthodes des volumes finis, sont difficilement utilisables dans des géométries complexes avec des maillages non structurés.

Dans les méthodes des volumes finis [149–153], l'ETR sous forme locale est intégrée sur un volume et un angle solide élémentaires de contrôle. L'intégration sur un volume de la divergence de la luminance (membre de gauche de l'ETR) est remplacée par une intégrale de surface en utilisant le théorème de Green-Ostrogradski. Il faut ensuite choisir un schéma de discrétisation spatiale, discrétiser l'équation obtenue et effectuer le bilan des flux entrants et sortants sur chaque maille (ces méthodes s'apparentent aux méthodes des volumes finis utilisées en mécanique des fluides).

Cette liste n'est pas exhaustive. Seules les méthodes les plus courantes ont été citées, mais il existe bien d'autres méthodes comme par exemple, la méthode YIX [154, 155], la méthode des éléments finis [156, 157] ...

1.5.2 Méthodes statistiques

Les méthodes de Monte Carlo [158–165] sont, à l'origine, des méthodes mathématiques de résolution d'intégrales multiples. On peut les définir comme les variantes statistiques des méthodes de tracés de rayons car elles consistent à simuler un très grand nombre de chemins optiques caractérisés par une bande spectrale, un point de départ et une direction. Ces trois grandeurs sont tirées au sort selon des PDF correctement choisies. La trajectoire du chemin optique est également déterminée aléatoirement : par exemple, les changements de direction des chemins optiques liés à la diffusion sont déterminés par tirage au sort. Lorsque tous les chemins optiques ont été construits, les puissances volumiques et les flux pariétaux sont obtenus en sommant les différentes contributions radiatives de chaque chemin optique.

Le principal avantage de ces méthodes est leur extrême flexibilité. En effet, elles peuvent traiter les problèmes de transferts radiatifs dans toute leur complexité en prenant en compte tous les phénomènes physiques importants sans aucune approximation et sans aucune difficulté de mise en œuvre. De plus, le temps de calcul requis par ces méthodes croît peu lorsque la complexité augmente. D'autre part, les erreurs introduites dans ces méthodes sont uniquement statistiques, ce qui signifie qu'on peut les déterminer à l'avance et qu'on peut les diminuer autant qu'on le souhaite, en simulant un nombre de chemins optiques suffisamment important. Ces méthodes sont donc précises. Ainsi, on considère souvent que les méthodes de Monte

Carlo donnent la solution quasi-exacte d'un problème. C'est pourquoi elles sont fréquemment utilisées comme méthodes de référence pour valider les autres méthodes. En revanche, ces méthodes ont la réputation de requérir un temps de calcul important. En effet, la loi des grands nombres indique que l'écart type d'une série statistique composée de N événements aléatoires indépendants est proportionnel à $1/\sqrt{N}$, ce qui se traduit par une convergence assez lente lorsque le nombre N croît.

Les méthodes de Monte Carlo constituent une vaste famille de méthodes qui diffèrent suivant les stratégies adoptées pour leur mise en œuvre. Certaines font appel au principe de réciprocité [5, 56, 166–169], d'autres utilisent des techniques de réduction de variance particulières [170–175]. De plus, des algorithmes relatifs aux méthodes de Monte Carlo ont également été développés comme les méthodes READ [176], REM² [177] et DPF [9, 178]. Enfin, des méthodes hybrides ont été proposées avec l'approximation diffusive pour traiter des milieux optiquement épais [179, 180], avec la méthode des zones [181] et avec une méthode des volumes finis [182].

1.6 Choix méthodologique et étude bibliographique

Dans un premier temps, notre choix méthodologique (méthode de résolution de l'ETR, modèles de rayonnement des gaz et des particules de suie . . .) est présenté et justifié. Puis, afin de situer ce choix par rapport au contexte scientifique, les principales études de rayonnement des flammes disponibles dans la littérature sont présentées. On insiste en particulier sur les études de couplages rayonnement/formation des suies et rayonnement/turbulence.

1.6.1 Choix méthodologique

Notre choix s'est porté vers les méthodes de Monte Carlo pour de multiples raisons. Une des raisons qui nous a conduits à choisir ce type de méthode est qu'une expérience importante sur ces méthodes avait été acquise à l'ONERA dans le cadre du traitement du couplage turbulence/cinétique chimique détaillée/formation des suies et il paraissait judicieux de profiter de cette expérience. Une raison plus scientifique de notre choix est que ces méthodes permettent de simuler des chemins optiques se propageant à travers des champs thermophysiques instantanés différents pour chaque chemin optique, ce qui permet un traitement rigoureux et complet de l'IRT (voir chapitre 4). De plus, elles permettent de considérer une discrétisation spectrale fine sans augmenter le temps de calcul proportionnellement au nombre d'intervalles spectraux (voir chapitre 2), de traiter très facilement des géométries complexes et de prendre en compte la diffusion par des particules très simplement et sans modifier considérablement l'algorithme (voir chapitre 3). Par ailleurs, ces méthodes peuvent utiliser indifféremment des maillages structurés ou non. Ainsi, le code de calcul de transferts radiatifs pourra être couplé à n'importe quel code avancé d'aérothermochimie ou de mécanique des fluides. Enfin, du point de vue informatique, ces méthodes sont facilement parallélisables et on pense que les temps de calcul ne seront pas prohibitifs car d'une part, les puissances des calculateurs ont considérablement augmenté et d'autre part, il existe de nombreuses techniques d'accélération de la convergence pour ce genre de méthode.

D'ailleurs, afin d'accélérer la convergence, le principe de réciprocité sera utilisé et l'absorption ne sera pas traitée stochastiquement mais de façon déterministe et continue le long du chemin optique. Le principe détaillé de la méthode de Monte Carlo mise en œuvre dans cette étude est décrit dans le chapitre 2. En ce qui concerne le modèle de rayonnement des gaz, un modèle précis à bandes étroites et formulé en coefficient d'absorption a été choisi. Il s'agit d'un modèle CK. Les paramètres de ce modèle ont été fournis par Soufiani et Taine [183]. Ce modèle est valable à la pression atmosphérique et pour des températures comprises entre 300 et 2500 K. Faute d'informations concernant la taille et la forme des particules de suie, elles seront supposées petites et sphériques afin de pouvoir utiliser l'expression (1.30) du coefficient d'absorption valable dans le domaine de Rayleigh. Ne connaissant pas non plus la nature des particules de suie et donc l'indice optique complexe, il a été choisi d'exprimer le coefficient d'absorption des particules de suie de la façon suivante :

$$\kappa_\nu^{suie} = 5,5\nu f_V. \quad (1.38)$$

Cette modélisation du rayonnement des particules de suie est certainement le point faible de notre méthodologie, mais étant donné l'état actuel des connaissances dans ce domaine, il est difficile de faire mieux. On verra au chapitre 4 que les résultats sont sensibles à la valeur choisie pour la constante K_s . Dans les années à venir, des études de caractérisation des particules de suie seront nécessaires pour améliorer la modélisation des propriétés radiatives de ces particules. Cependant, il ne faut pas oublier que la prédiction numérique de la fraction volumique de suie f_V reste encore délicate et que, par conséquent, les valeurs de f_V obtenues sont imprécises.

On a choisi de traiter l'IRT en utilisant le principe de la méthode stochastique décrite dans la section 1.4 (aucune hypothèse simplificatrice de type OTFA n'est mise en œuvre). Les chemins optiques, générés aléatoirement dans l'algorithme Monte Carlo, seront découpés en une succession de structures turbulentes cohérentes, de longueur ℓ_t , supposées homogènes et isothermes. Les propriétés thermophysiques de ces structures turbulentes seront tirées au sort suivant une PDF multidimensionnelle dépendant de la fraction volumique de suie (il est en effet incorrect de relier la fraction volumique de suie à une grandeur telle que la richesse, voir chapitre 4). Cette PDF sera obtenue en utilisant un modèle de combustion turbulente à équation de transport de PDF. La résolution de cette équation se fera également par une méthode de Monte Carlo.

1.6.2 Etude bibliographique

1.6.2.1 Etudes prenant en compte l'IRT

Faeth et ses collaborateurs ont mené des études expérimentales et théoriques sur des flammes turbulentes de diffusion de méthane [127], d'éthylène [19], de monoxyde de carbone [128], d'acétylène [18] et d'hydrogène [119]. Dans ces études il n'y a pas de couplage entre le calcul de l'écoulement en combustion et celui des grandeurs radiatives. La structure de la flamme est d'abord calculée en négligeant les pertes radiatives et en utilisant un modèle $k - \epsilon_k - g$ où g est défini comme le carré des fluctuations de richesse. Ce modèle permet de construire la PDF de richesse en supposant que celle-ci est une gaussienne. Ensuite, les luminances monochromatiques directionnelles sortant d'une colonne traversant la flamme turbulente sont calculées

et comparées à des résultats expérimentaux. Le long de cette colonne, l'ETR est résolue, en prenant en compte de façon rigoureuse l'IRT, par la méthode stochastique décrite dans la section 1.4. Les suies ne sont prises en compte que dans les flammes d'éthylène et d'acétylène et la diffusion du rayonnement par ces dernières est toujours négligée. Les propriétés radiatives du milieu sont obtenues à l'aide du code RADCAL [65]. Ces chercheurs ont montré que l'effet de l'IRT est modéré (environ 20%) dans les flammes de méthane et de monoxyde de carbone, mais que cet effet est très important (50 à 300%) dans les autres flammes. Il faut également noter que dans le cas de la flamme d'hydrogène, l'accord entre valeurs expérimentales et théoriques a été obtenu en considérant une taille de structures turbulentes ℓ_t égale à $6,6\Lambda$ où Λ est donnée par l'équation (1.37). Syed et al. [129] ont ensuite repris cette approche en améliorant l'obtention de la fraction volumique de suie et l'ont appliquée à une flamme de méthane.

Adams et Smith [22] ont étudié les couplages rayonnement/turbulence/formation des suies dans un four industriel à échelle réelle contenant une flamme de gaz naturel. L'ETR est résolue par une méthode des ordonnées discrètes en considérant comme gris le milieu contenant H_2O , CO_2 et les suies, ce qui n'a pas de fondement physique. Les coefficients d'absorption totaux sont déduits d'émissivités totales obtenues à partir de formules empiriques en faisant intervenir une longueur caractéristique de la géométrie considérée. La diffusion de rayonnement par les particules de suie est négligée. La fraction volumique de suie est obtenue par une formule empirique très simple (ni une cinétique chimique détaillée pour les gaz, ni un modèle de formation/destruction des suies ne sont utilisés). L'IRT est prise en compte de façon incomplète en utilisant l'approximation (1.35). Les fluctuations de température, de fractions molaires de H_2O , CO_2 et de fraction volumique de suie sont déduites d'une PDF bidimensionnelle de la richesse et de l'enthalpie et de relations reliant ces grandeurs aux variables précédentes. Les modélisations intervenant dans cette étude sont très simplistes et la méthodologie complète peut être remise en cause car les résultats obtenus sont curieux : les flux radiatifs pariétaux diminuent lorsque l'IRT est prise en compte !

Hartick et al. [13] ont étudié l'IRT dans une chambre de combustion cylindrique contenant une flamme turbulente de diffusion à swirl. L'ETR est résolue par une méthode 4-flux et le milieu est supposé gris, ce qui est peu réaliste. L'IRT est modélisée à l'aide d'une PDF bidimensionnelle de la richesse r et du taux de dégagement de chaleur g , en utilisant l'approximation (1.35). Cette PDF est obtenue en faisant des hypothèses sur sa forme après résolution d'équations de bilan pour \tilde{r} , \tilde{g} , $\widetilde{r''r''}$, $\widetilde{g''g''}$ et $\widetilde{r''g''}$. On ne sait pas quelles espèces émettrices et absorbantes sont prises en compte car le coefficient d'absorption est une fonction de r et g . Les résultats numériques sont comparés à des résultats expérimentaux. Les auteurs montrent que la forme présumée de la PDF a une très forte influence sur la production de NO.

Récemment, Mazumder et Modest [20] ont mis en évidence l'importance de l'IRT dans une flamme turbulente 2D de diffusion méthane/air. Ils ont modélisé la combustion turbulente par une méthode lagrangienne stochastique couplée à une méthode P_1 pour la résolution de l'ETR. Le modèle de cinétique chimique est très simple puisqu'il ne fait intervenir qu'une seule réaction. Les suies ne sont pas prises en compte. Les propriétés radiatives des gaz (H_2O , CO_2 et CH_4) sont modélisées par un « box model » à 10 bandes larges, ce qui est physiquement non fondé à la pression atmosphérique. Pour modéliser l'IRT, ils utilisent l'approximation (1.35) et leur méthode lagrangienne stochastique, appelée « velocity-composition joint PDF method », fournit les corrélations entre les fluctuations de température et de fractions molaires

des gaz. Malgré la non-prise en compte des suies, ils indiquent que l'IRT abaisse de 350 K la température de la flamme et que les flux radiatifs pariétaux augmentent en moyenne de 40-45%. D'un point de vue informatique, les auteurs indiquent que la résolution de l'ETR à chaque pas de temps du calcul de l'écoulement ne requiert qu'environ 10% du temps CPU total.

1.6.2.2 Etudes ne prenant pas en compte l'IRT

Kent et Honnery [109] ont étudié la formation des suies dans une flamme laminaire de diffusion d'éthylène en prenant en compte les transferts radiatifs. Une méthode des ordonnées discrètes S_2 est mise en œuvre en supposant le milieu gris, ce qui est peu réaliste. Le rayonnement des gaz est négligé, ainsi que la diffusion par les particules de suie. Le calcul des transferts radiatifs est couplé à celui de l'écoulement. Les fractions volumiques de suie ne sont pas prédites numériquement mais mesurées. Des corrélations entre leur taux de formation, la température et la richesse sont mises en évidence.

Kaplan et al. [15] ont couplé la résolution des équations de Navier-Stokes à des modèles de combustion, de formation des suies et de rayonnement pour simuler des flammes de diffusion éthylène/air. La cinétique chimique est très simple (une seule réaction). L'ETR est résolue par une méthode des ordonnées discrètes S_4 en supposant le milieu gris. Les particules de suie, ainsi que les espèces H_2O et CO_2 sont prises en compte mais la diffusion du rayonnement par les particules est négligée. La prise en compte des pertes radiatives modifie considérablement les champs de température, de concentrations en espèces gazeuses et de fraction volumique de suie car ces pertes représentent 35-40% de la puissance dégagée par la réaction chimique. Ces pertes sont essentiellement dues aux particules de suie dont la contribution radiative domine largement celle des gaz. D'un point de vue informatique, l'inclusion du calcul des transferts radiatifs à chaque pas de temps du calcul de l'écoulement multiplie le temps de calcul total par 2. Ce même auteur [110] a ensuite étudié la production des suies dans une flamme de diffusion méthane/air mais en considérant celle-ci optiquement mince (hypothèse OTL pour *Optically Thin Limit* dans laquelle l'absorption par le milieu est négligée).

Sivathanu et Gore [10] ont mis en évidence le fort couplage entre formation des suies et rayonnement dans des flammes laminaires de diffusion d'acétylène. Des comparaisons entre mesures, calculs couplés et calculs découplés utilisant des pertes radiatives constantes montrent la nécessité d'effectuer des calculs couplés. Une méthode de tracés de rayons, utilisant 22 rayons, est mise en œuvre pour résoudre l'ETR en milieu gris non diffusant. Le rayonnement des gaz est négligé. Un premier calcul de l'écoulement est réalisé sans tenir compte des transferts radiatifs. Les champs de température et de concentrations obtenus servent de base au calcul des termes sources radiatifs qui sont ensuite réinjectés dans le modèle de combustion. Cette procédure est répétée jusqu'à ce que les nouveaux termes sources radiatifs diffèrent de moins de 2% des précédents. Cette stratégie a également été adoptée par les deux mêmes auteurs pour traiter une flamme laminaire de diffusion méthane/air [9]. En revanche, le rayonnement des gaz est cette fois pris en compte car dans ce type de flamme la contribution radiative des gaz est prépondérante par rapport à celle des suies. Malgré les faibles pertes radiatives de cette flamme, les phénomènes de nucléation, de formation et d'oxydation des suies sont fortement influencés par les transferts radiatifs.

Bressloff et al. [138] ont couplé des modèles de combustion turbulente, de formation des

suies et de transfert radiatif pour simuler une flamme turbulente de diffusion méthane/air. Le modèle de combustion turbulente est un modèle « eddy break-up » associé à un modèle $k - \epsilon_k$. Le modèle de transfert radiatif utilise la méthode des transferts discrets associée à un modèle « somme pondérée de gaz gris ». La diffusion du rayonnement par les particules de suie est négligée. Le couplage avec les transferts radiatifs est effectué en faisant un calcul de rayonnement toutes les 20 itérations du calcul de l'écoulement réactif turbulent. Le calcul des transferts radiatifs requiert 30 fois plus de temps de calcul qu'une itération du calcul de l'écoulement.

La modélisation de la formation des suies dans les flammes turbulentes de diffusion a été abordée par Said et al. [8]. Le calcul de l'écoulement réactif turbulent est assuré par une approche Probabiliste EULérienne-Lagrangienne (PEUL, c'est ce type d'approche qui sera utilisé dans le cadre de cette thèse, voir chapitre 4). Les transferts radiatifs sont pris en compte de façon approchée en faisant appel à l'hypothèse OTL et en ne considérant que l'émission par les particules de suie. Cette étude montre que les transferts radiatifs ont une influence très importante sur la température (et la formation des suies) et qu'il est nécessaire de les inclure dans ce type de modélisation. Ce travail met également en évidence l'importance du couplage entre turbulence et formation des suies : la non prise en compte des fluctuations de température sur la formation et l'oxydation des suies peut conduire à des erreurs de plus de 200% sur la fraction volumique de suie.

Zhang et Ezekoye [184] ont étudié la formation des suies en fonction de la pression dans une flamme de diffusion 2D axisymétrique méthane/air. La cinétique chimique gazeuse fait intervenir 8 réactions et 12 espèces. Le modèle de formation des suies est à 4 étapes. L'ETR est résolue par une méthode des ordonnées discrètes S_6 en supposant le milieu constitué de particules de suie et de gaz, gris et non diffusant. Les pertes radiatives augmentent avec la pression par l'intermédiaire de la fraction volumique de suie qui augmente également lorsque la pression augmente.

Dembele et Wen [185] ont développé un modèle de transfert radiatif valable pour des systèmes en combustion monodimensionnels contenant des particules de suie. Cette étude ne présente aucun couplage rayonnement/combustion. Une méthode des ordonnées discrètes associée à un modèle CK, pour les espèces gazeuses H_2O , CO_2 et CO , permet de résoudre l'ETR spectralement dans un milieu diffusant. Pour les particules de suie, les formules analytiques des coefficients d'absorption, de diffusion et de la fonction de phase en fonction de l'indice optique complexe, valables dans le domaine de Rayleigh, sont utilisées. Les valeurs de l'indice complexe, en fonction de la longueur d'onde, reportées par Lee et Tien [86], sont utilisées.

Récemment, de Lataillade [5] a développé une méthode de couplage rayonnement/combustion qu'il a appliquée à une flamme laminaire 1D à jets opposés méthane/air. Le modèle de combustion fait intervenir une cinétique chimique détaillée (48 espèces et 279 réactions) et un modèle de formation des suies. L'ETR est résolue par une méthode de Monte Carlo utilisant le principe de réciprocité. Les propriétés radiatives des gaz (H_2O , CO_2 et CO) sont modélisées par un modèle à bandes étroites formulé en k-distribution et l'approximation de Curtis-Godson. L'émission et l'absorption du rayonnement par les particules de suie sont prises en compte mais la diffusion est négligée. A partir de champs initiaux de température et de concentrations, les termes sources radiatifs et leurs matrices de sensibilité à l'ensemble des variables du problème (température et concentrations) sont calculés par la méthode de Monte Carlo. Le couplage avec la combustion peut ensuite se faire en exprimant les termes

sources radiatifs par un développement de Taylor au premier ordre par rapport aux variables température et concentrations. Cette technique évite un calcul complet Monte Carlo à chaque itération du calcul de l'écoulement. A la fin du calcul couplé, un calcul détaillé Monte Carlo est effectué afin de vérifier que le calcul est resté dans le domaine de linéarité du développement de Taylor.

1.6.3 Conclusion

Les originalités de la démarche proposée dans cette thèse sont :

- de développer une méthode tridimensionnelle de calcul des transferts radiatifs utilisant le principe de réciprocité et une discrétisation spectrale fine des propriétés radiatives des gaz et des particules et prenant en compte l'IRT et la diffusion du rayonnement par les particules ;
- de traiter l'IRT, sans recourir à des hypothèses simplificatrices de type OTFA, en étendant la méthode stochastique, développée par Faeth et ses collègues [18, 19, 119, 127, 128] pour calculer des luminances monochromatiques directionnelles sortant d'une colonne traversant une flamme turbulente, au calcul des puissances radiatives (des flux radiatifs) en tout point du volume (de la frontière) ;
- d'utiliser, pour traiter l'IRT, une PDF multidimensionnelle dépendant de la fraction volumique de suie car les approches consistant à relier la fraction volumique de suie à la richesse [18, 19, 22] ne sont pas satisfaisantes (voir chapitre 4).

Chapitre 2

Méthodes de Monte Carlo directe et réciproques

Le corps principal de ce chapitre est constitué d'un article qui sera prochainement publié dans la revue *International Journal of Heat and Mass Transfer* (publication acceptée après examen par les reviewers). Le titre de cet article est « Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward Monte Carlo methods and a correlated-k approach » et les auteurs sont : Lionel Tessé, Francis Dupoirieux, Bernard Zamuner et Jean Taine.

Dans cette étude, on appelle méthodes de Monte Carlo réciproques toutes les méthodes de Monte Carlo utilisant explicitement le principe de réciprocité. Les formulations classiques des méthodes de Monte Carlo ne faisant pas intervenir le principe de réciprocité sont regroupées sous le terme de méthodes directes. Chacune de ces deux classes de méthodes contient de nombreuses variantes utilisant par exemple différentes techniques de réduction de la variance.

Le principe de réciprocité peut être énoncé simplement de la façon suivante : « si un rayonnement peut se propager d'un point B à un point G , alors un autre rayonnement peut aller du point G au point B suivant le même chemin (même si le milieu séparant ces deux points est diffusant), et le rapport de la puissance monochromatique émise en B et absorbée en G sur celle émise en G et absorbée en B est égal au rapport de la luminance monochromatique du rayonnement d'équilibre en B sur celle en G ». Ce principe a donc deux conséquences : une géométrique et une énergétique. Les méthodes réciproques décrites dans ce chapitre utilisent ces deux conséquences du principe de réciprocité, contrairement à « the reverse method » [163, 166], qui ne tient compte que de la conséquence géométrique de ce principe.

Dans le cadre de cette thèse, trois méthodes de Monte Carlo ont été développées : une méthode directe (notée FM) et deux méthodes réciproques (ERM et ARM). Ces trois formulations sont décrites dans la section 2.2. Leur mise en œuvre numérique est présentée dans la section 2.3. Dans la section 2.4, les résultats obtenus à partir de ces trois méthodes sont comparés dans différents cas de validation pour lesquels il existe une solution de référence. Le comportement de chaque méthode a ainsi pu être analysé pour différentes conditions thermiques et optiques. Ces analyses ont permis de déduire la méthode la plus adaptée en fonction des conditions physiques et des grandeurs recherchées (flux pariétaux ou puissances volumiques).

Des informations complémentaires de celles contenues dans cet article, peuvent être trouvées dans les annexes placées à la fin de ce mémoire. Le générateur de nombres aléatoires

utilisé pour effectuer les calculs de validation est décrit dans l'annexe A. L'établissement des lois de tirage au sort des directions est détaillé dans l'annexe B. Les expressions analytiques du flux pariétal et des puissances volumiques dans le cas de validation ainsi que la justification du choix de la configuration tridimensionnelle choisie sont données dans l'annexe C.

2.1 Introduction

Many methods have been developed to calculate radiative transfer for laboratory or engineering applications [34, 132], such as the Monte Carlo method, the ray-tracing method, e.g., [134], the zone method, e.g., [25], the discrete ordinates or interpolation method, e.g., [40, 41, 142–146], the finite volume method, e.g., [149, 150, 152, 186], the P_n method, e.g., [140, 141], etc. However, as radiative transfer modeling requires accounting for some complex phenomena, such as spectral effects due to gases, wall bidirectional and bipolarized reflectivities, nonisotropic scattering, complex three-dimensional geometries including islands, couplings with turbulent temperature and concentration fields, the Monte Carlo approach appears today to be the most suitable method because it allows all these phenomena to be taken into account without approximation and huge CPU time. The flexibility of this approach greatly offsets its reputation of slow convergence.

The Monte Carlo method has been widely used in radiative transfer since the first works in this domain [158, 159, 187], as mentioned in detailed reviews by Howell [164] and Farmer and Howell [165]. Many variance reduction procedures have been employed in particular cases [160, 170–175]. Walters and Buckius [163, 166] have developed a reverse approach, called the emission path method, based on the reciprocity principle, but using only its geometrical features to calculate the radiative flux at a given boundary point of a complex system. The optical path is then considered in a reverse manner. To our knowledge, Fournier [167], Cherkaoui et al. [168, 169] and de Lataillade et al. [56] are the first authors to use the reciprocity principle from the point of view of the exchanged power. They have applied this Monte Carlo method in nearly isothermal conditions for one-dimensional systems and have shown that, for these particular conditions, the computation time is much smaller than with a formulation of the conventional Monte Carlo approach. Hybrid methods have also been developed, i.e. with the zone method [181], with the diffusion approximation to treat optically thick media [165, 179, 180] or with the finite volume method [182].

The most accurate models of gas radiative properties are the line-by-line approach, considered as a reference, and, in practice, narrow band models of which advantages and limitations have been widely discussed by Taine and Soufiani [28]. Liu and Tiwari [188] have explicitly used a statistical narrow-band model and have pointed out the importance of the spectral correlations effects, easily introduced in a Monte Carlo approach. Fournier [167], Cherkaoui et al. [168, 169] and de Lataillade et al. [56] have deduced the probability distribution functions of the absorption coefficient from the parameters of this model.

The aim of the present paper is to compare three formulations of the Monte Carlo method. One is a formulation of the conventional forward Monte Carlo approach often cited in the literature; the two others are based on the reciprocity principle, from the points of view of the power exchanged between two cells and of the forward and reverse ways to describe an optical path. In all cases involving actual gas-mixtures, gas radiative properties are treated in

a correlated manner by a CK model [48, 49, 51, 52] based on the parameters of Soufiani and Taine [183].

The three considered formulations of the Monte Carlo method are detailed in Sec. 2.2, in which their physical bases are also discussed. The implementation techniques of these three approaches are given in Sec. 2.3. In Sec. 2.4, the results obtained from the different formulations are compared in several benchmark cases, for which reference solutions exist. The behaviors of these three Monte Carlo formulations in many different conditions are then analyzed and a methodology for the best use of them is deduced.

2.2 Reciprocal and forward Monte Carlo formulations

In this paper, three different formulations of the Monte Carlo method are presented and compared. Two of them, called here the reciprocal methods, are based on the exchange formulation of radiative transfer which fulfills systematically the reciprocity principle. The other one is a conventional Forward Method (FM). In this approach, an optical path, which is stochastically generated from a point B to a point G , is used only for the transport of radiative energy from the point B to the point G , i.e. in the forward direction. In the reciprocal approaches, the same optical path is used to calculate directly the power exchanged between the points B and G , i.e. the transport of radiative energy in both forward and reverse directions. In Sec. 2.2.1, the exchange formulation of radiative transfer which gives rise to the reciprocal approaches is presented in terms of Probability Density Functions (PDF) which allow a statistical resolution, detailed in Sec. 2.2.2. The behaviors of the three approaches are discussed in Sec. 2.2.3.

2.2.1 Exchange formulation of radiative transfer

Let us consider an enclosure with nonisothermal opaque walls, containing a nonisothermal, heterogeneous, absorbing and emitting medium. The medium and the walls are divided into N_V elementary volumes and N_S elementary surfaces respectively, both of which are called cells in the following. Each cell is assumed to be isothermal, homogeneous and characterized by uniform radiative properties.

The main idea of the exchange formulation of radiative transfer is that the radiative power (or radiative flux) in the cell i can be written as a sum of exchange terms with all the other cells j , i.e.

$$P_i = \sum_{j=1}^{N_V + N_S} P_{ij}^{exch} = \sum_{j=1}^{N_V + N_S} -P_{ji}^{exch}, \quad (2.1)$$

where P_{ij}^{exch} is the radiative power exchanged between the cells i and j , i.e. the difference between the power emitted by the cell j and absorbed by the cell i and the power emitted by the cell i and absorbed by the cell j . If both cells i and j are volumes (see Fig. 2.1), P_{ij}^{exch} is

given by

$$P_{ij}^{exch} = \int_0^{+\infty} \kappa_{i\nu} [I_\nu^0(T_j) - I_\nu^0(T_i)] \int_{V_i} \int_{4\pi} \sum_{c=1}^{N_p} \tau_\nu(BF_c) \left[\int_0^{l_{jc}} \kappa_{j\nu} \exp(-\kappa_{j\nu} s_{jc}) ds_{jc} \right] d\Omega_i dV_i d\nu, \quad (2.2)$$

where $I_\nu^0(T)$ is the equilibrium spectral intensity and $\kappa_{i\nu}$ the spectral absorption coefficient relative to the cell i . N_p represents the total number of crossings of the cell j by a given optical path issued from the cell i . $\tau_\nu(BF_c)$ is the spectral transmissivity between the source point B associated with dV_i and F_c the c^{th} inlet point in the cell j of a given optical path. s_{jc} is the abscissa, taken from F_c , of the current point G_c in the cell j for the c^{th} crossing. l_{jc} represents the length of the c^{th} crossing of the cell j by a given optical path. $d\Omega_i$ is an elementary solid angle issued from the source point B and centered around a direction Δ . The spectral transmissivity is given by

$$\tau_\nu(BF_c) = \exp\left(-\sum_{m=1}^{M_c-1} \kappa_{m\nu} l_m\right) \prod_{h=1}^{N_{rc}} (1 - \varepsilon_{wh\nu}), \quad (2.3)$$

where l_m is the distance traveled through the cell m ; $m = 1$ and $m = M_c$ correspond respectively to the first cell crossed by an optical path (the cell i) and the last one for the c^{th} crossing (the cell j). N_{rc} is the number of wall reflections along an optical path between the points B and F_c , h the index of wall reflections along this optical path and $\varepsilon_{wh\nu}$ the local wall spectral emissivity.

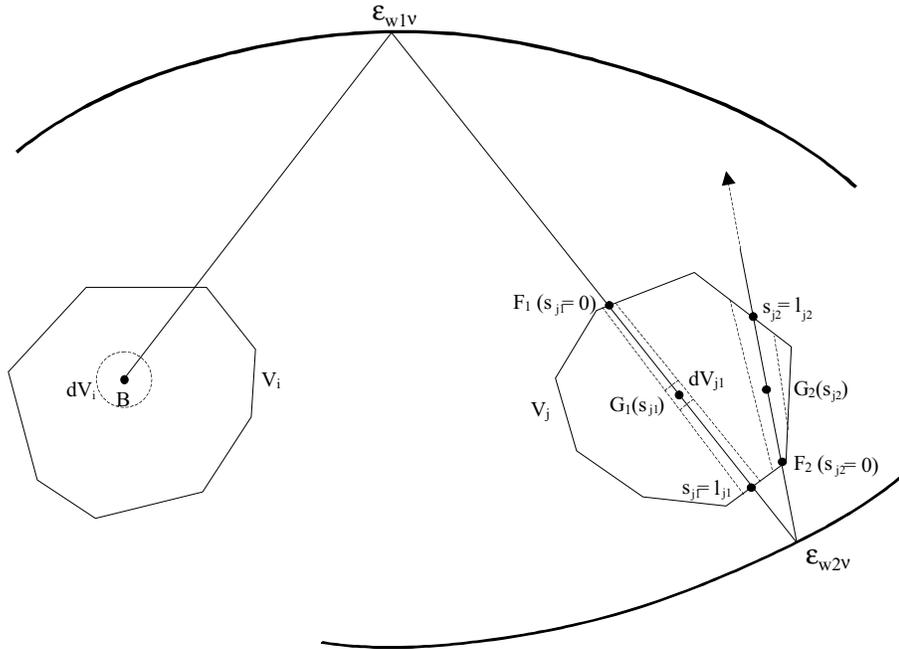


Figure 2.1: *Coupled elementary cells.*

In Eq. (2.2) the integration over the volume V_j has been replaced by integrations over the solid angle 4π and the length l_{jc} , i.e.

$$\frac{dV_{jc}}{l_{BG_c}^2} = ds_{jc}d\Omega_i, \quad (2.4)$$

where l_{BG_c} is the length of an optical path between the source point B and the current point G_c . After analytical integration over the length l_{jc} , the radiative power exchanged between the cells i and j becomes

$$P_{ij}^{exch} = \int_0^{+\infty} \kappa_{i\nu} I_\nu^0(T_i) \left(\frac{I_\nu^0(T_j)}{I_\nu^0(T_i)} - 1 \right) \int_{V_i} \int_{4\pi} \sum_{c=1}^{N_p} \tau_\nu(BF_c) \alpha_{jc\nu} d\Omega_i dV_i d\nu, \quad (2.5)$$

where $\alpha_{jc\nu}$ is the spectral absorptivity associated with the column of length l_{jc} and defined by

$$\alpha_{jc\nu} = 1 - \exp(-\kappa_{j\nu} l_{jc}). \quad (2.6)$$

In this formulation, an elementary exchange is an exchange between an elementary volume dV_i of the cell i and an elementary column of length l_{jc} crossing the cell j . The reciprocity principle is clearly fulfilled by Eq. (2.5): the ratio of the spectral power emitted by a cell i and absorbed by a cell j to the spectral power emitted by j and absorbed by i is equal to the ratio of the equilibrium spectral intensities $I_\nu^0(T_i)/I_\nu^0(T_j)$.

Since the point B , the direction Δ and the wavenumber ν are statistically independent, the corresponding joint PDF $f_i(B, \Delta, \nu)$ is equal to the product of the PDF, f_{1i} , f_{2i} and f_{3i} , associated with B , Δ and ν , i.e.

$$f_i(B, \Delta, \nu) dV_i d\Omega_i d\nu = f_{1i}(B) dV_i f_{2i}(\Delta) d\Omega_i f_{3i}(\nu) d\nu, \quad (2.7a)$$

$$= \frac{1}{V_i} dV_i \frac{1}{4\pi} d\Omega_i \frac{\kappa_{i\nu} I_\nu^0(T_i)}{\int_0^{+\infty} \kappa_{i\nu} I_\nu^0(T_i) d\nu} d\nu, \quad (2.7b)$$

$$= \frac{\kappa_{i\nu} I_\nu^0(T_i) d\Omega_i dV_i d\nu}{P_i^e}, \quad (2.7c)$$

where P_i^e is the total power emitted by the whole volume V_i , over the whole spectrum for all directions, without taking into account self-absorption by this volume. By combining Eqs. (2.5) and (2.7c), we obtain

$$P_{ij}^{exch} = P_i^e \int_0^{+\infty} \left(\frac{I_\nu^0(T_j)}{I_\nu^0(T_i)} - 1 \right) \int_{V_i} \int_{4\pi} \sum_{c=1}^{N_p} \tau_\nu(BF_c) \alpha_{jc\nu} f_i(B, \Delta, \nu) d\Omega_i dV_i d\nu. \quad (2.8)$$

Equations (2.6), (2.7) and (2.8) have been established for a volume-volume exchange, but similar relations can be easily deduced for volume-surface, surface-volume or surface-surface exchanges. If the cell j is a surface, the medium spectral absorptivity $\alpha_{jc\nu}$ is changed to the wall spectral emissivity $\varepsilon_{wj\nu}$. If the cell i is a surface, integrations over the volume V_i and the

solid angle 4π are replaced by integrations over the surface S_i and the solid angle 2π in Eq. (2.8) and the PDF becomes

$$f_i(B, \Delta, \nu) dS_i d\Omega_i d\nu = f_{1i}(B) dS_i f_{2i}(\Delta) d\Omega_i f_{3i}(\nu) d\nu, \quad (2.9a)$$

$$= \frac{1}{S_i} dS_i \frac{\cos(\theta_i)}{\pi} d\Omega_i \frac{\varepsilon_{wiv} I_\nu^0(T_i)}{\int_0^{+\infty} \varepsilon_{wiv} I_\nu^0(T_i) d\nu} d\nu, \quad (2.9b)$$

$$= \frac{\varepsilon_{wiv} I_\nu^0(T_i) \cos(\theta_i) d\Omega_i dS_i d\nu}{P_i^e}, \quad (2.9c)$$

where P_i^e is now the total power emitted by the surface S_i .

2.2.2 Monte Carlo method approximation

A Monte Carlo method is a statistical method based on the simulation of a large number of stochastic events. Each stochastic event represents a possible realization of the considered physical phenomenon. The solution of the problem is obtained by averaging the contributions of all the stochastic events. In radiative transfer, a stochastic event is an optical path. In the FM, some power associated with an optical path is emitted by a cell and partially absorbed by each cell crossed by the optical path. In the reciprocal Monte Carlo approaches, the power exchanged between a source cell (cell from which an optical path is built) and each cell crossed by the optical path is directly calculated, as explained previously, along each optical path.

According to Eq. (2.8), each optical path is characterized by a source point associated with the source cell dV_i or dS_i , a direction Δ and a wavenumber ν . That means that the stochastic generation of an optical path requires the independent stochastic generations of a source point, a direction and a wavenumber according to the three PDF defined in Eqs. (2.7a) and (2.7b) or (2.9a) and (2.9b). Details about these generations are given in Sec. 2.3.

If a large number N_i of optical paths are stochastically generated from the cell i using the PDF given by Eqs. (2.7a) and (2.7b) or (2.9a) and (2.9b), a large number of them, called N_{ij} , cross or encounter the cell j and each of these N_{ij} optical paths provides one value for :

- i) P_{ij}^{ea} , the power emitted by the cell i and absorbed by the cell j in the FM;
- ii) P_{ij}^{exch} , the power exchanged between the cells i and j in the reciprocal approaches.

Statistical estimations of P_{ij}^{ea} and P_{ij}^{exch} , noted \tilde{P}_{ij}^{ea} and \tilde{P}_{ij}^{exch} in the following, are obtained by averaging the contributions of all the N_i optical paths (but only N_{ij} optical paths give rise to a non zero contribution). Obviously, the standard deviations of these quantities decrease as the number N_i of optical paths increases. \tilde{P}_{ij}^{ea} is simply given by

$$\tilde{P}_{ij}^{ea} = \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{n=1}^{N_{ij}} \sum_{c=1}^{N_{pn}} \tau_{\nu_n}(B_{in} F_{jc}) \alpha_{jcv_n}. \quad (2.10)$$

According to Eq. (2.8), \tilde{P}_{ij}^{exch} is expressed as

$$\tilde{P}_{ij}^{exch} = \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{n=1}^{N_{ij}} \left[\frac{I_{\nu_n}^0(T_j)}{I_{\nu_n}^0(T_i)} - 1 \right] \sum_{c=1}^{N_{pn}} \tau_{\nu_n}(B_{in} F_{jc}) \alpha_{jcv_n}. \quad (2.11)$$

In Eqs. (2.10) and (2.11), the absorption is treated as a continuous phenomenon in a deterministic manner (Beer law). In this hybrid Monte Carlo approach the factor $\tau_{\nu_n}(B_{in}F_{jc})\alpha_{jcv_n}$ is deduced from Eqs. (2.3) and (2.6). In a pure Monte Carlo approach, the absorption would be stochastically treated. That means that the absorption would be total in only one cell j which would be randomly chosen using an appropriate PDF not defined here. Therefore, the product $\tau_{\nu_n}(B_{in}F_{jc})\alpha_{jcv_n}$ would be equal to 1 in this only cell j and equal to 0 in all the other cells crossed by an optical path. The analytical treatment used here in this hybrid approach gives rise to lower standard deviations in the results, since it decreases the number of stochastic variables [165].

In Eq. (2.11), the term including the ratio of the equilibrium spectral intensities corresponds to the reverse direction of an optical path, with which emission from the cell j and absorption by the cell i are associated. The other term corresponds to the forward direction of an optical path, with which emission from the cell i and absorption by the cell j are associated.

At this stage, the FM and two reciprocal Monte Carlo formulations based on Eq. (2.2) can be implemented in order to calculate the radiative power (or the radiative flux) in the cell q . In the FM, only the power transported in the forward direction of an optical path is taken into account (see Fig. 2.2). The radiative power in the cell q , which is crossed or encountered by optical paths originating from all the system cells i , including the cell q , is obtained by making the balance between absorption and emission in this cell after all the optical paths have been generated from all the cells i . A statistical estimation of the radiative power in the cell q is then expressed as

$$\tilde{P}_q^{FM} = \sum_{i=1}^{N_V+N_S} \tilde{P}_{iq}^{ea} - P_q^e. \quad (2.12)$$

In the first reciprocal approach, called the Emission Reciprocity Method (ERM), the radiative power is calculated in the cell q , which is the source of the optical paths (see Fig. 2.3). In other terms, only the powers exchanged between the cell q and all the cells, crossed or encountered by the optical paths originating from the cell q , are considered. A statistical estimation of the radiative power in the cell q is then given by

$$\tilde{P}_q^{ERM} = \sum_{j=1}^{N_V+N_S} \tilde{P}_{qj}^{exch}. \quad (2.13)$$

Substituting Eq. (2.11) into Eq. (2.13) yields

$$\tilde{P}_q^{ERM} = \frac{P_q^e}{N_q} \sum_{n=1}^{N_q} \sum_{m=1}^{M_n} \left[\frac{I_{\nu_n}^0(T_m)}{I_{\nu_n}^0(T_q)} - 1 \right] \tau_{\nu_n}(B_{qn}F_m)\alpha_{m\nu_n}, \quad (2.14)$$

where $m = 1$ designates the cell q and $m = M_n$ the last cell crossed by the n^{th} optical path originating from the cell q . Equation (2.14) shows that the statistical estimation of the radiative power (or radiative flux) in the cell q can be calculated as soon as all the optical paths originating from the cell q have been generated. Thus, the ERM allows accurate calculation of the radiative power (or radiative flux) in only one cell by simply allocating a large number of optical paths starting from this cell. This property has been used in the reverse method

developed by Walters and Buckius [163,166]. However, these authors do not use the reciprocity principle in terms of exchanged power ; they only describe the optical path in a reverse manner. It is worth noting that, in the ERM, the expression of the power emitted by the cell q is exactly P_q^e ; indeed, as the energy is conserved along an optical path the sum $\sum_{m=1}^{M_n} \tau_{\nu_n} (B_{qn} F_m) \alpha_{m\nu_n}$ in the negative term of Eq. (2.14) is equal to 1. Therefore, the error in the ERM is only due to the statistical calculation of the absorption term, like in the FM.

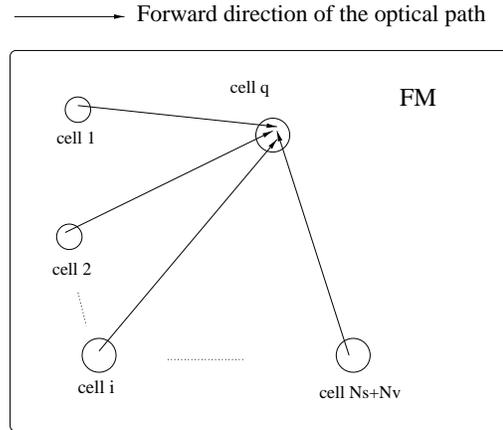


Figure 2.2: Principle of the calculation of the radiative power in the cell q in the FM (the emitted power is calculated analytically).

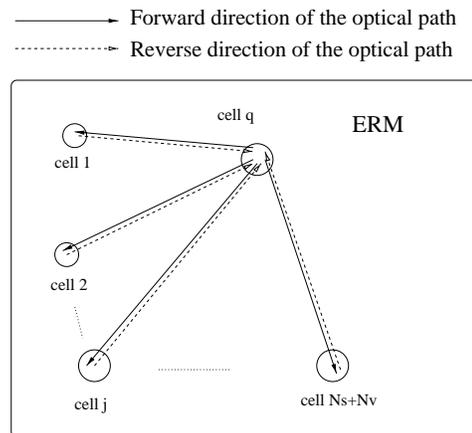


Figure 2.3: Principle of the calculation of the radiative power in the cell q in the ERM.

In the second reciprocal formulation, called the Absorption Reciprocity Method (ARM), the radiative power is calculated in the cell q which is crossed or encountered by optical paths issued from all the system cells i including the cell q (see Fig. 2.4). In other words, the optical paths along which the exchanged powers are considered cross or encounter the cell where the radiative power is calculated. Therefore, a statistical estimation of the radiative power in the

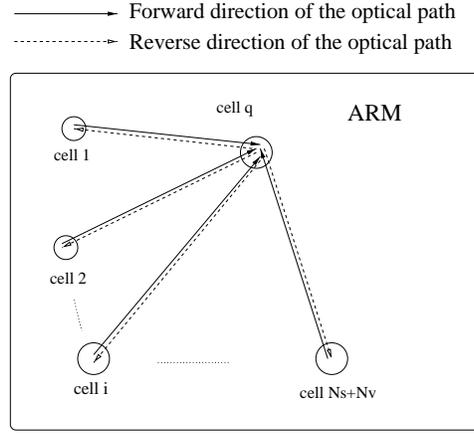


Figure 2.4: Principle of the calculation of the radiative power in the cell q in the ARM.

cell q is given by

$$\tilde{P}_q^{ARM} = \sum_{i=1}^{N_V+N_S} -\tilde{P}_{iq}^{exch}. \quad (2.15)$$

It is worth noting that \tilde{P}_{ij}^{exch} used in the ERM becomes strictly equal to $-\tilde{P}_{ji}^{exch}$ used in the ARM only when the total number N of optical paths tends to infinity. Moreover, in the ARM like in the FM, the statistical estimation of the radiative power (or radiative flux) in the cell q can only be calculated when all the optical paths originating from all the system cells i including the cell q have been generated. The expression obtained by substituting Eq. (2.11) into Eq. (2.15) can be derived from Eq. (2.12) corresponding to the FM, if we consider the following relation, arising from the reciprocity principle

$$P_q^e = \sum_{i=1}^{N_V+N_S} \lim_{N_i \rightarrow +\infty} \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{n=1}^{N_{iq}} \frac{I_{\nu_n}^0(T_q)}{I_{\nu_n}^0(T_i)} \sum_{c=1}^{N_{pn}} \tau_{\nu_n} (B_{in} F_{qc}) \alpha_{qc\nu_n}. \quad (2.16)$$

In the ARM, the power emitted by the cell q is statistically reconstructed, by using the reciprocity principle, from the power carried in the forward direction and absorbed by the cell q . The paradoxical advantage of this formulation lies in the following : although the emitted power is approximated, the exchanged power is correctly evaluated since the reciprocity principle is used and therefore the ratio of the emitted and absorbed powers is exact.

In conclusion, the main interest of a reciprocal approach (ERM or ARM) is that the power exchanged between two cells at the same temperature is rigorously null, as shown in Eqs. (2.11) and (2.13)-(2.15). This property is only statistically verified by the FM. On the other hand, it will be established in Sec. 2.2.3 that the energy conservation principle, rigorously fulfilled by the FM, is only statistically verified by the reciprocal approaches developed here. However, it will be also established that the approaches developed here based on the reciprocity principle lead in many cases to more accurate results than those of the FM.

2.2.3 Behaviors of the three Monte Carlo formulations

A simple fictitious case displays how the errors in the three formulations depend on physical conditions. Let us consider an isolated system consisting of two homogeneous gray zones exchanging radiative energy, the zone 1 being included inside the zone 2 of which the size is large. We assume that the external boundary of the zone 2 is perfectly reflecting.

The total power emitted by the zone i ($i = 1, 2$) is noted P_i^e . A reciprocity factor r is defined as the ratio of the total equilibrium intensities I_2^0/I_1^0 . We also introduce α_i which is the fraction of the power emitted by the zone i and absorbed by the zone i itself. As soon as the parameters α_i are known, the problem is solved. In fact, $\tilde{\alpha}_i$ results directly from the stochastic generations of the source point and of the direction. Our purpose is to understand how the error on the radiative power is influenced by the statistics, in other words, to determine how this error depends on the statistical error on $\tilde{\alpha}_i$.

The radiative powers in the zones 1 and 2 are defined in the three previous methods (FM, ERM and ARM) by the expressions

$$\tilde{P}_1^{FM} = P_2^e (1 - \tilde{\alpha}_2) - P_1^e (1 - \tilde{\alpha}_1), \quad \tilde{P}_2^{FM} = -\tilde{P}_1^{FM}, \quad (2.17)$$

$$\tilde{P}_1^{ERM} = P_1^e (1 - \tilde{\alpha}_1) (r - 1), \quad \tilde{P}_2^{ERM} = -\tilde{P}_1^{ARM}, \quad (2.18)$$

$$\tilde{P}_1^{ARM} = P_2^e (1 - \tilde{\alpha}_2) \left(1 - \frac{1}{r}\right), \quad \tilde{P}_2^{ARM} = -\tilde{P}_1^{ERM}. \quad (2.19)$$

According to these equations, the energy of the system is rigorously conserved in the FM ($\tilde{P}_1^{FM} + \tilde{P}_2^{FM} = 0$). But, in the ERM and the ARM, the sum $\tilde{P}_1 + \tilde{P}_2$ depends on the stochastic values of $\tilde{\alpha}_1$ and $\tilde{\alpha}_2$. In these two reciprocal approaches, the energy is statistically conserved. In the same manner, the reciprocity principle is only statistically fulfilled in the FM, i.e. $P_2^e (1 - \tilde{\alpha}_2)$ becomes strictly equal to $rP_1^e (1 - \tilde{\alpha}_1)$ only when the total number N of stochastic optical paths tends to infinity (obviously, when the total number of optical paths tends to infinity, the three methods become equivalent). The reciprocity principle is obviously fulfilled by ARM and ERM, which are derived from Eq. (2.5). It can be verified in Eqs. (2.18) and (2.19) that the ratio of the power emitted by the zone 2 and absorbed by the zone 1 to the power emitted by the zone 1 and absorbed by the zone 2 is rigorously equal to r .

The standard deviations, noted σ , are straightforwardly deduced from the previous equations

$$\sigma \left(\tilde{P}_1^{FM} \right) = \sqrt{[P_2^e \sigma(\tilde{\alpha}_2)]^2 + [P_1^e \sigma(\tilde{\alpha}_1)]^2}, \quad \sigma \left(\tilde{P}_2^{FM} \right) = \sigma \left(\tilde{P}_1^{FM} \right), \quad (2.20)$$

$$\sigma \left(\tilde{P}_1^{ERM} \right) = P_1^e |r - 1| \sigma(\tilde{\alpha}_1), \quad \sigma \left(\tilde{P}_2^{ERM} \right) = \sigma \left(\tilde{P}_1^{ARM} \right), \quad (2.21)$$

$$\sigma \left(\tilde{P}_1^{ARM} \right) = P_2^e \left| 1 - \frac{1}{r} \right| \sigma(\tilde{\alpha}_2), \quad \sigma \left(\tilde{P}_2^{ARM} \right) = \sigma \left(\tilde{P}_1^{ERM} \right). \quad (2.22)$$

If r is close to 1 (nearly isothermal configurations) the ARM and the ERM give the smallest error. Since the radiative power is close to zero, application of the reciprocity principle ensures that the numerical values of \tilde{P}_1 and \tilde{P}_2 will be close to zero no matter what the values of $\tilde{\alpha}_1$ and $\tilde{\alpha}_2$ are. That corroborates the results obtained by Fournier [167] and Cherkaoui et al. [168, 169], who also use a reciprocal approach.

If r is far from 1, for instance $r \ll 1$ when zone 1 is a flame surrounded by zone 2 filled with air at room temperature, the error of the FM can become lower than the error of the ARM and the ERM in one of the two zones. Of course, the best result is obtained by combining the ARM with the ERM, i.e. by considering the result given by the ARM in one zone and the result given by the ERM in the other one. However, the analysis is much more complex when dealing with a large number of zones. For instance, the ARM can be recommended if we consider the exchange of a given cell with a given zone, but the ERM can be better for the exchange with another zone. If we consider all the exchanges, the FM may also be the most accurate formulation. The standard deviations of the three methods have to be compared in each cell.

It is worth noting at this point that many other formulations combining FM, ARM, ERM do exist. Some of them, though entirely based on the reciprocity principle, fulfill rigorously the energy conservation principle [167–169]. These methods deal with a huge $(N_V + N_S) \times (N_V + N_S)$ matrix of which the coefficients are the local exchanged powers \tilde{P}_{ij}^{exch} . Therefore they cannot be applied to 3D systems containing typically 10^4 cells.

2.3 Implementation of the methods

The Monte Carlo method is based on the simulation of a large number N of optical paths. In the three formulations developed in this paper, the cell from which an optical path is built is not generated stochastically. The number of optical paths originating from each cell are calculated in a deterministic manner. Two spatial distribution techniques have been developed. One is characterized by a Non-Uniform spatial Distribution (NUD) of the optical path source points in the calculation domain; the number N_i of optical paths originating from the cell i is proportional to P_i^e . The other technique uses a Uniform spatial Distribution (UD) of the optical path source points, which leads to the same number of optical paths originating from all the cells. The three Monte Carlo formulations, described in Sec. 2.2, can be associated with either the NUD or the UD technique.

To build each optical path, the wavenumber, the source point and the direction, characterizing each optical path, have to be generated stochastically. The wavenumber ν_n is deduced from R , a uniform random number in $[0 - 1]$, following the implicit expression

$$R = \int_0^{\nu_n} f_{3i}(\nu) d\nu = \frac{\int_0^{\nu_n} \kappa_{i\nu} I_\nu^0(T_i) d\nu}{\int_0^{+\infty} \kappa_{i\nu} I_\nu^0(T_i) d\nu}. \quad (2.23)$$

Details are given in the appendix about the implementation of the CK model for absorbing-emitting gases. To stochastically generate a source point B in a cell of any shape, some points are randomly picked in the smallest parallelepiped containing the cell, assuming that all the points of the parallelepiped have the same probability to be picked, until one is located inside the cell. This point is then taken as the source point. Two angles θ and φ are randomly generated to define the initial direction of the optical path. These angles are expressed as functions of two independent uniform $[0 - 1]$ random numbers R_θ and R_φ . For a volume

element, these functions are

$$\theta = \arccos(1 - 2R_\theta), \quad (2.24a)$$

$$\varphi = 2\pi R_\varphi, \quad (2.24b)$$

and, for an opaque surface element with diffuse emissivity, they become

$$\theta = \arccos\left(\sqrt{R_\theta}\right), \quad (2.25a)$$

$$\varphi = 2\pi R_\varphi. \quad (2.25b)$$

The optical path is then completely defined. All the stochastic generations detailed here are common to the three methods.

In the same way, the same optical paths are used in the three approaches, but differently. In the three methods, an optical path is always built step by step in the forward direction until the power carried in this direction becomes less than a cutoff level, expressed as a transmissivity τ_l (the choice of this cutoff level is discussed in Sec. 2.4). Indeed, in order to decrease the number of stochastic variables and thus the global standard deviation of the numerical solution [165], the absorption is treated as a continuous phenomenon in a deterministic manner. Therefore, each volumic cell j crossed N_{pn} times by the n^{th} optical path absorbs a part of the power, transported in the forward direction, equal to

$$P_{ijn}^{ea} = \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{c=1}^{N_{pn}} \tau_{\nu_n} (B_{in} F_{jc}) \alpha_{jcv_n}. \quad (2.26)$$

In the FM, this amount of power is the contribution of this optical path to the power absorbed by the cell j . When the optical path encounters a wall, a fraction, equal to the wall spectral emissivity, of the power carried in the forward direction is absorbed by the wall, i.e. the medium spectral absorptivity α_{jcv_n} is changed to the wall spectral emissivity $\varepsilon_{wj\nu_n}$ in Eq. (2.26). The remaining power leaves the wall in a direction which is randomly generated according to Eqs. (2.25). When the power carried in the forward direction reaches the value of the cutoff level, the remaining power is then totally absorbed by the cell following, in the forward direction, the one where the cutoff level has been reached.

In each cell j where power transported in the forward direction is absorbed, the power exchanged between the source cell i and this absorbing cell is easily calculated. In the ERM, the contribution of this optical path to the radiative power in the cell i is equal to

$$P_{ijn}^{exch} = P_{ijn}^{ea} \left[\frac{I_{\nu_n}^0(T_j)}{I_{\nu_n}^0(T_i)} - 1 \right]. \quad (2.27)$$

In the same way, in the ARM, the contribution of this optical path to the radiative power in the cell j is equal to $-P_{ijn}^{exch}$. When all the optical paths have been built from all the cells, the final step consists in summing, in each cell, all the contributions taken into account in the different methods.

It is worth noting that the results given by the three methods are obtained simultaneously with only one calculation. Another important point to note is that it is not more expensive,

in terms of computation time, to obtain the results from the three methods than from only one. Indeed, the initialization steps (calculation of the total emitted power in each cell, stochastic generations of source points, initial directions and wavenumbers) and the geometrical construction of the optical paths, which are common to the three methods, take most of the calculation time. In other words, these methods differ only by the final step for which the CPU time is negligible.

2.4 Results and discussion

A nonisothermal, emitting and absorbing medium between two parallel infinite isothermal semi-reflecting opaque walls, perpendicular to the x direction and characterized by diffuse emissivities, defines a benchmark case since the radiative power profile and the fluxes on the walls are given by well-known expressions (see Eq. (VII.110) of [23] or see [24]), called here reference solution. Although this system is one-dimensional, all the calculations here have been carried out with three-dimensional calculation grids in order to check the capacity of the methods for dealing with actual 3D systems. The chosen computation system is a cube of edge length L . To simulate the infinite transverse dimensions of the 1D benchmark case along the y and z directions, total specular reflection conditions (i.e. symmetry conditions) are considered for the four lateral faces of the cube. If N_y and N_z are the numbers of meshes in the y and z directions, the radiative powers and the wall fluxes are calculated in $N_y N_z$ cells at a given x location. All these calculations lead, at a given x location, not only to a mean result for each quantity, but also to the corresponding standard deviation σ .

In all the calculations, the temperature profile $T(x)$ always has a symmetric parabolic shape, but different values of the temperature T_{c_s} of the medium center and of the wall temperature T_w have been considered.

Several random number generators have been tested, and insensitivity of the results to the generator used has been observed. All the calculations presented in this paper have been performed with a combined multiple recursive generator developed by L'Ecuyer [189] and called MRG32k3a.

2.4.1 Case of a gray medium

Although no actual medium is gray, the gray assumption is useful since it allows the optical thickness of a medium to be controlled.

First, the influence of the total number N of optical paths has been studied. For a given case, the product of the result variance σ^2 and the computation time t is independent of N , as shown for instance in Fig. 2.5. In practice, the computation time t is proportional to the total number of cells crossed by all the optical paths, i.e. t is proportional to N , to the mean length of the optical paths and to the number of spatial discretizations per unit distance averaged over the three directions. Then, for all the considered conditions (optical thickness, temperature profile and wall emissivity) the influences of the total number N of optical paths, the value of the cutoff level τ_l and the numbers of spatial discretizations N_x , N_y and N_z have been studied in order to choose suitable values for these parameters.

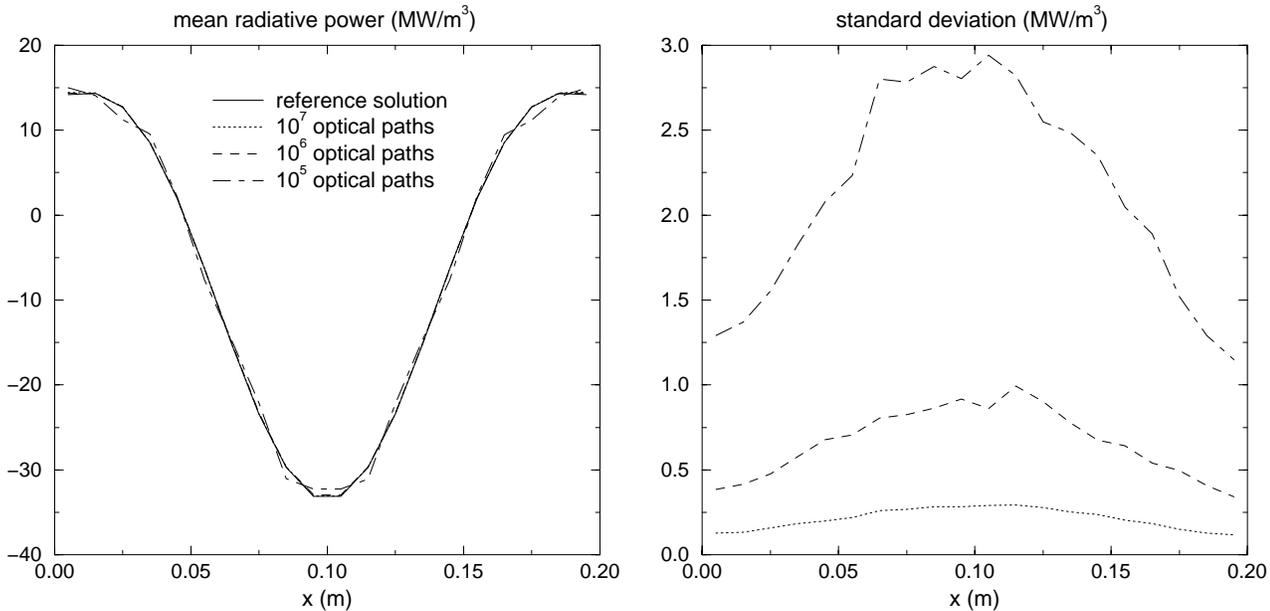


Figure 2.5: Influence of the total number N of optical paths on mean power and on standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 1, FM-NUD).

The three Monte Carlo formulations studied in Sec. 2.2 are applied to the first five cases defined in Table 2.1. The wall emissivity ε_w is equal to 0.8 and the cube edge length L to 0.2 m. The total number N of optical paths has been adjusted in each case in order to use the same computation time, about 600 s on a single NEC SX5 processor. The comparison of standard deviations σ obtained from the different approaches is then significant since the performance of a Monte Carlo method is defined as the product of the computation time t and the variance σ^2 [165]. It is worth noting that the computation time would be shorter if a simpler and faster locating procedure, allowed by the actual one-dimensional geometry, were used. Indeed, calculations have been carried out with a complex locating procedure developed in order to deal with three-dimensional grid made up of irregular meshes closed by twelve faces.

Results relative to case 1, which corresponds to a semi-transparent medium of optical thick-

	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5	case 6	case 7
κL	2	0.1	40	2		actual gases	
L (m)	0.2						4
ε_w	0.8						1
T_{c_s} (K)	2500			500	300	2500	
T_w (K)	500			2500	290	500	
$N_x \times N_y \times N_z$	$20 \times 20 \times 20$		$400 \times 5 \times 4$	$20 \times 20 \times 20$			
$N \times 10^{-6}$	1	0.2	1.35	1	1	1	1.8
$\tau_l \times 100$	1	0.1	0.1	1	1	1	0.1
t (s)	≈ 600						

Tableau 2.1: Benchmark cases.

ness equal to 2, and obtained from the ERM, ARM and FM formulations, associated with the uniform (UD) and non-uniform (NUD) spatial distributions of the optical path source points, are shown in Figs. 2.6-2.7 and Table 2.2. Calculated mean radiative powers agree with the reference solution. Differences appear only in the obtained standard deviation values. FM results depend slightly on the spatial distribution of the optical path source points. Nevertheless, with this formulation, a non-uniform spatial distribution based on the powers emitted by the cells leads to the smallest standard deviations, which was expected in particular in the hot region. On the contrary, both ARM and ERM results are very sensitive to the spatial distribution of the optical path source points. In particular, as the number of optical paths originating from a cold region is small, large standard deviation values are observed for ERM in Fig. 2.6 in this type of region. Reciprocally, rather good results are obtained from this approach in the hot region. The same explanation can be given in the hot region for the ARM formulation associated with a non-uniform spatial distribution of the optical path source points. Most of the optical paths which cross the hot zone originate from the cold and warm regions and their numbers are too small to accurately treat the hot region. To summarize, it is better, in general, to use a uniform spatial distribution with the ARM and ERM formulations and a non-uniform spatial distribution with the FM formulation.

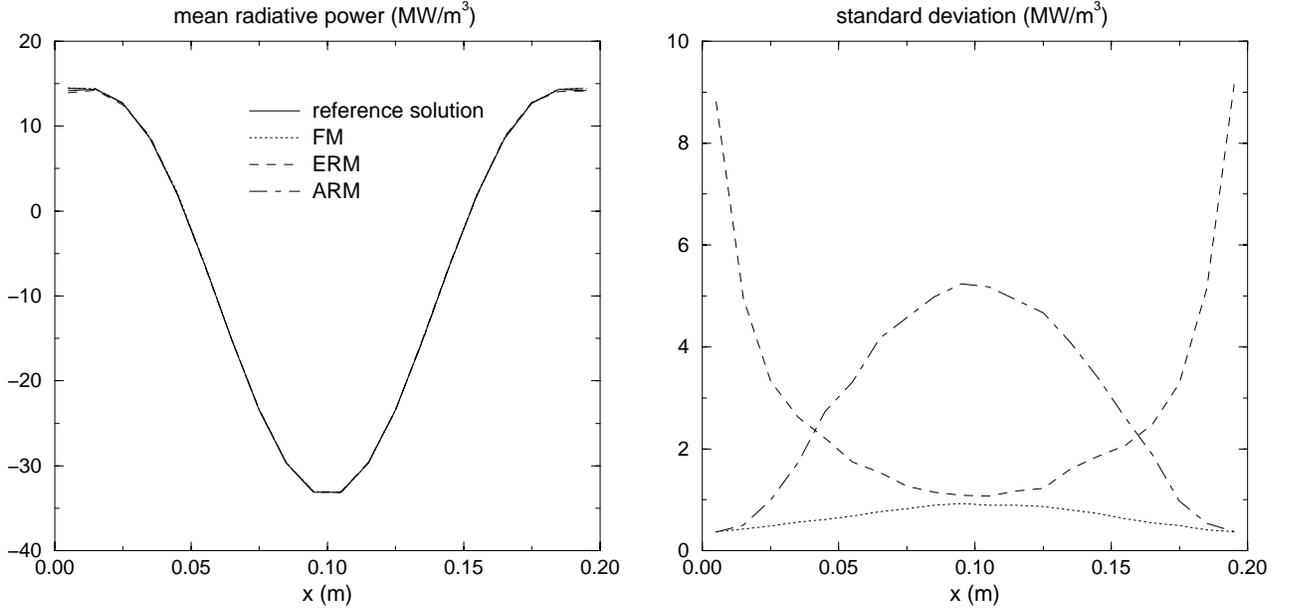


Figure 2.6: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 1, NUD).

Case 2 corresponds to an optically thin medium between very absorbing walls. The required cutoff level is then smaller than the one previously used (10^{-3} instead of 10^{-2}). Indeed, if the cutoff criterion is too large, for many optical paths the cumulative transmissivity along the path reaches the cutoff level value just after encountering a wall, and the remaining power is then placed in cells close to the walls. The accumulation of the remaining power in a cell leads to a large error in the calculation of the absorption in this cell. With a wall emissivity equal to 0 or 1, this problem disappears. As a consequence, to obtain the same computation time in case 2 than in case 1, the total number N of optical paths must then be lower in case 2 than

	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5	case 6	case 7	
reference solution	560.5 kW/m ²	159.9 kW/m ²	7.057 kW/m ²	-1306 kW/m ²	24.26 W/m ²	54.04 kW/m ²	195.9 kW/m ²	
FM	NUD	159.5 (8.8)	6.399 (1.760)	-1312 (23)	20.15 (14.28)	54.03 (2.67)	195.7 (15.0)	
	UD	553.8 (25.2)	159.7 (11.7)	6.884 (0.204)	-1312 (34)	20.54 (14.01)	53.98 (3.02)	194.7 (17.7)
ERM	NUD	562.6 (87.9)	161.0 (38.3)	6.805 (2.722)	-1306 (4)	24.21 (0.25)	53.41 (83.43)	134.1 (420.9)
	UD	558.5 (12.4)	160.2 (15.1)	6.989 (0.267)	-1306 (10)	24.21 (0.33)	52.46 (39.93)	182.5 (283.7)
ARM	NUD	553.1 (22.7)	159.6 (8.6)	6.601 (1.078)	-1292 (292)	23.97 (1.01)	54.03 (2.62)	195.7 (14.8)
	UD	553.8 (25.2)	159.7 (11.7)	6.888 (0.159)	-1293 (52)	24.00 (0.96)	53.98 (2.98)	194.8 (17.6)

Tableau 2.2: Flux averaged over the two walls and, in parentheses, corresponding standard deviation.

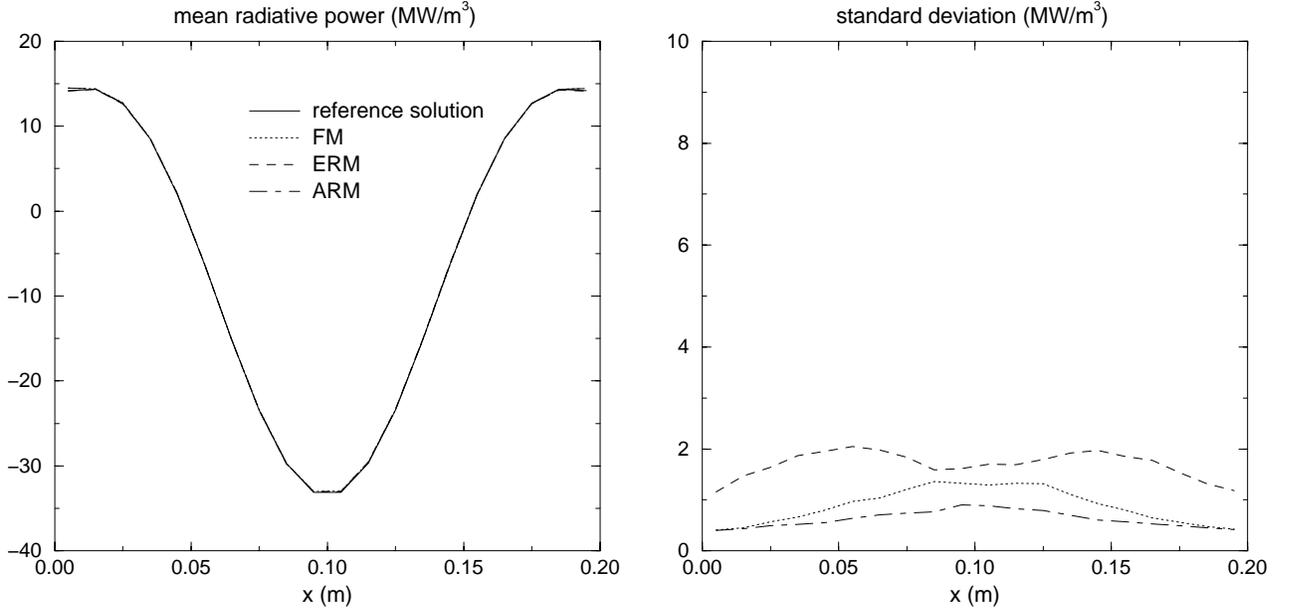


Figure 2.7: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 1, UD).

in case 1, as shown in Table 2.1, since the mean length of the optical paths is enhanced, due to both the lower medium optical thickness and the lower cutoff level value. As in case 1, the power is emitted by the medium, mainly by its hot central zone. But unlike case 1, in which absorption is mainly due to the whole medium, the power is mainly absorbed by the cold walls in case 2. Therefore, the reciprocal approaches are not suitable in case 2 characterized by an exchange between two strongly nonisothermal zones. The best results are then obtained from the FM-NUD formulation in the whole medium and on the walls, as illustrated by Fig. 2.8 and Table 2.2. The ARM formulation leads to the worst results in the medium center where absorption is negligible. ARM-UD is practically as accurate as FM-NUD in the vicinity of the walls, where the ratio absorption/emission is much larger than in the hot region. The ERM approach is always unsatisfactory in case 2.

For case 3, in which the medium is optically thick, a calculation grid with a refined spatial discretization in direction x is required in order to have a better description of the temperature profile since a cell is assumed to be isothermal. Moreover, a low value of the cutoff level must be used in order to increase the mean length of the optical paths. A cutoff level equal to 0.01 leads to an overestimation of the absorption in the hot zone and to an underestimation in the cold zones, because the optical paths mainly originating from the hot zone do not reach the cold ones. Furthermore, a small increase of the total number N of optical paths is required since the mean length of the optical paths is shorter than in the previous cases, although the cutoff criterion is smaller. In these optical and thermal conditions, all the calculated mean radiative power fields do not agree with the reference solution, as shown in Fig. 2.9. The fluctuations of the three results are due to the required large number of spatial discretizations between the walls. The medium is so optically thick that exchanges are restricted to neighboring cells, which are nearly isothermal. That is the reason why the two reciprocal formulations are better than FM. As the whole medium and the walls are very absorbing, ARM is better

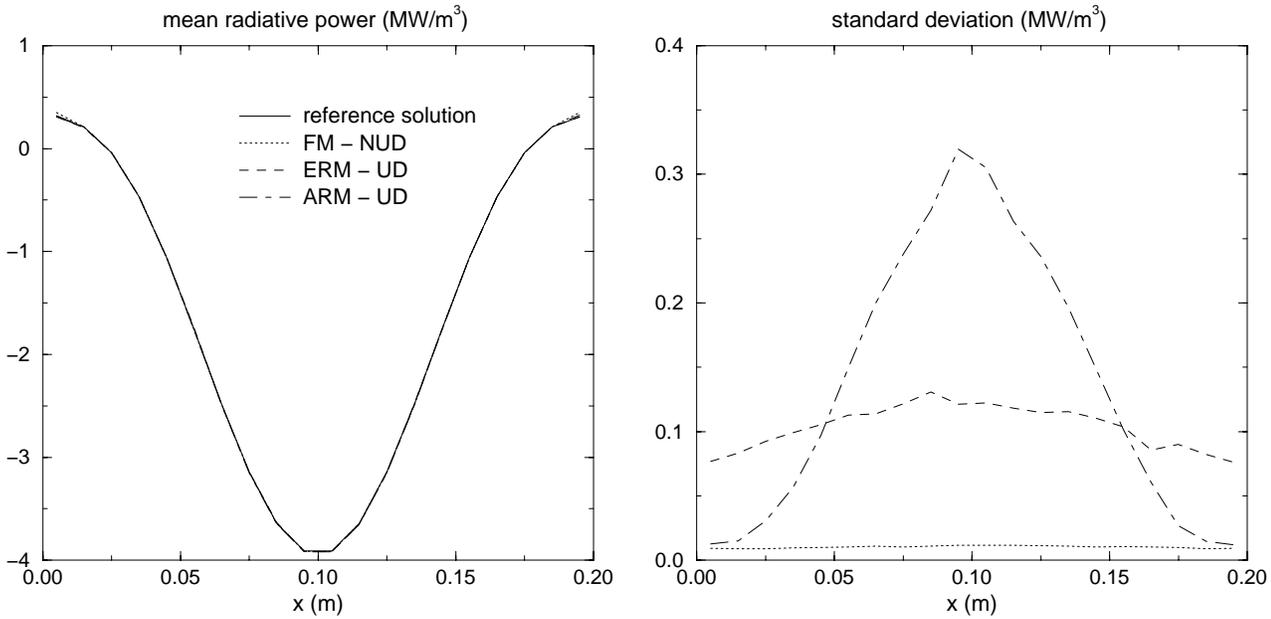


Figure 2.8: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 2).

than ERM everywhere. However, in the center of the medium, where emission is an important phenomenon, ERM provides good results as well. In the center of the medium, ARM standard deviation is 200 times smaller than the FM one, i.e. to obtain the same standard deviation, the FM requires a computation time 40000 times larger than the ARM one.

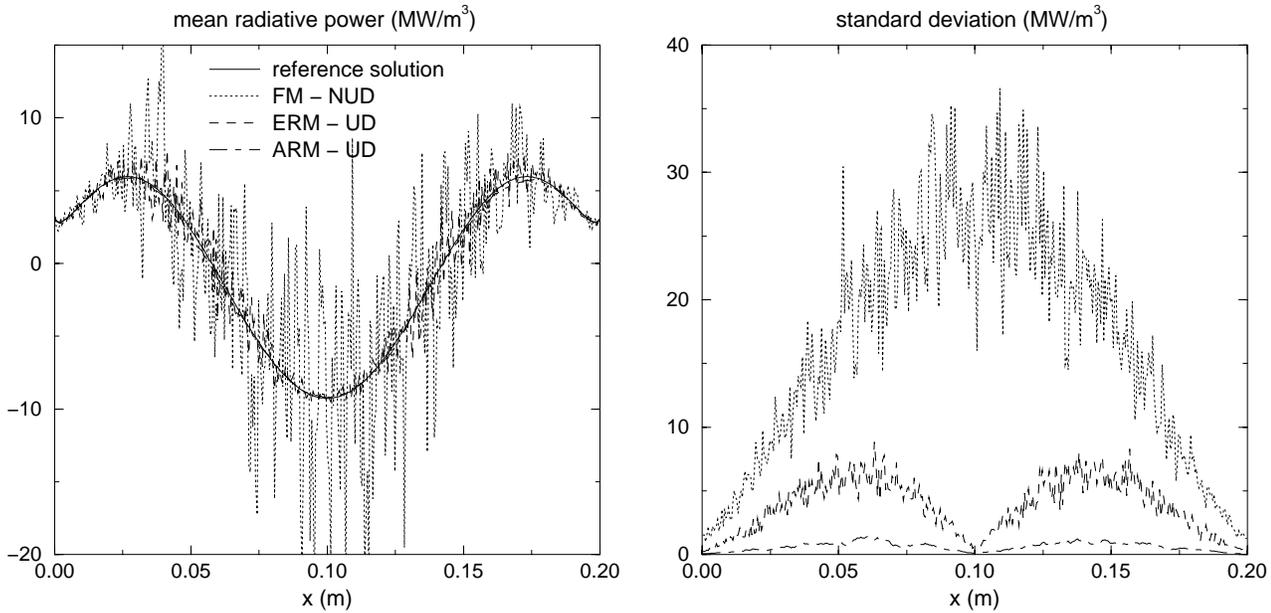


Figure 2.9: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 3).

Case 4 is defined by hot walls separated by a cold absorbing medium. The FM formulation produces the best results, as illustrated by Fig. 2.10, for the same reason than in case 2, i.e.

case 4 is characterized by exchanges between strongly nonisothermal zones. ARM results are better than ERM ones because the medium is more absorbing than emitting.

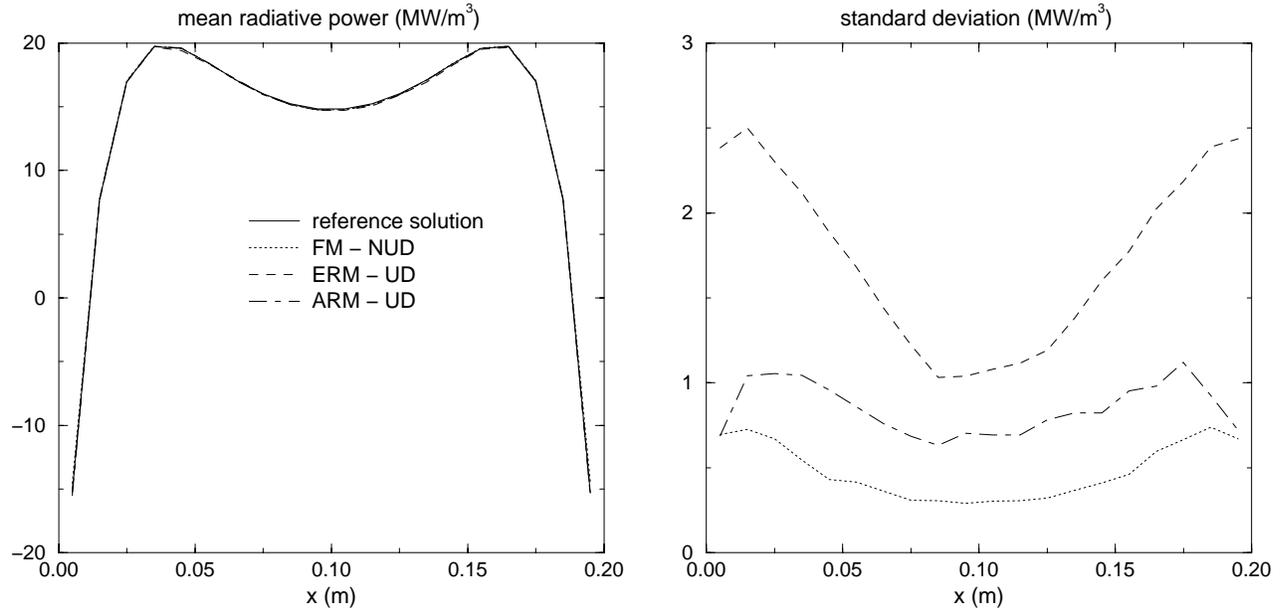


Figure 2.10: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 4).

Case 5 is a thermal configuration similar to that of Fournier [167] and Cherkaoui et al. [168, 169]. As the system is nearly isothermal, the reciprocal methods are more efficient, as shown in Fig. 2.11. These results confirm those of the previous authors. The standard deviation relative to ARM results is roughly 25 times smaller than the one relative to FM results.

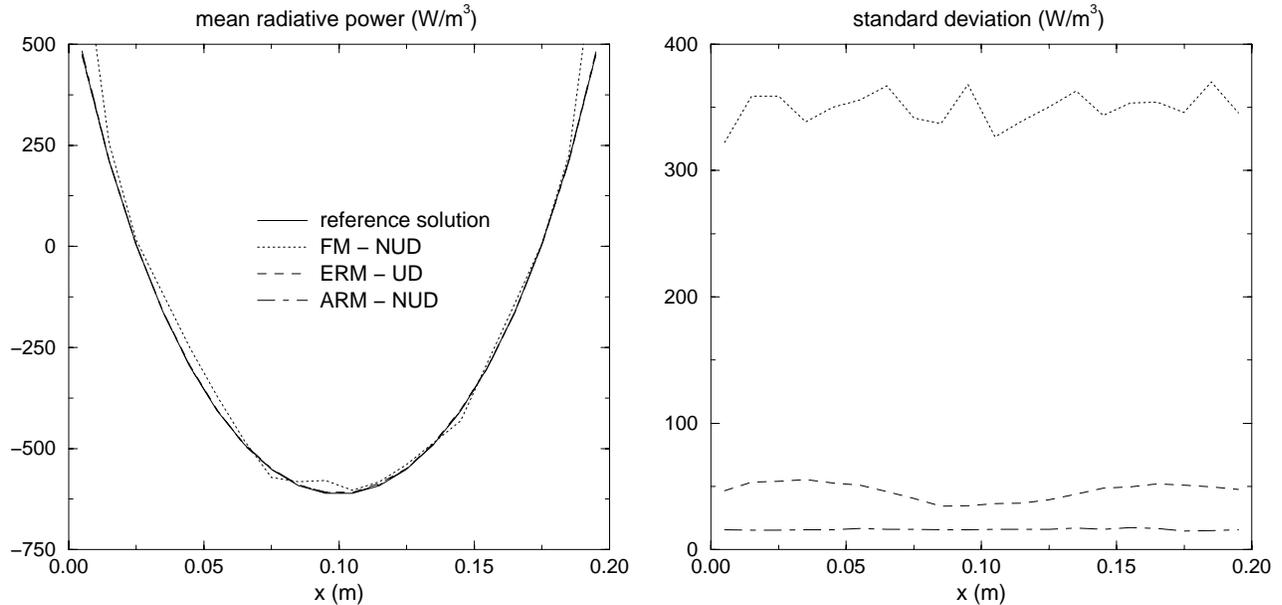


Figure 2.11: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 5).

The formulation associated with the spatial distribution of the optical path source points, which leads to the best results for the power field and the wall fluxes, is given in Table 2.3 for each case. The most suitable formulations for wall flux calculations can differ from those associated with power calculations. In case 1, corresponding to a semi-transparent medium characterized by an intermediate value of the optical thickness, the layer between the system center and a wall has an equivalent optical thickness of 1.8 (Hottel's equivalent radius). Consequently a significant part of radiation emitted by the hot central region reaches the walls. In this case, the ERM-UD formulation is the most suitable for the wall flux calculation: on one hand, absorption of radiation emitted by the hot region is taken into account correctly by the reciprocity principle; on the other hand, the number of optical paths originating from a wall is much larger with a uniform spatial distribution than with a non-uniform spatial one. In case 2, corresponding to a thin medium, as for power calculation, the ARM formulation is equivalent to the FM one in the vicinity of the walls. The emission by the hot region is then accurately determined, especially with the non-uniform spatial distribution of the optical path source points. In case 3, relative to a very thick medium, the same analysis as for power calculations leads to the conclusion that the ARM-UD is the best formulation for the wall flux calculation. In case 4, since the walls are practically the only radiation source, the ERM-NUD formulation is the most suitable approach for the wall flux calculation.

2.4.2 Case of a real gas

Two benchmark cases, similar to those of [69] and also defined in Table 2.1, allow comparison of the behaviors of the three Monte Carlo formulations with actual gas mixtures. Gas radiative properties are treated in a correlated manner by a CK model [48, 49, 51, 52] based on the parameters of Soufiani and Taine [183]. The reference solution is also integrated over the whole spectrum according to the CK model. The influence of the optical thickness is replaced by that of the cube edge length L . The wall emissivity ε_w is equal to 1. The CO₂-H₂O-N₂ mixture, at atmospheric pressure, is characterized by CO₂ and H₂O molar fractions equal to 0.116 and 0.155 respectively. The total number N of optical paths is adjusted in order to have the same computation time for all the calculations.

Case 6 corresponds to a thin medium, as the case 2. Indeed, according to the Hottel's charts [25], the total emissivities of the whole medium assumed to be isothermal at 2500 K and 500 K are equal to 0.03 and 0.15 respectively. Consequently, the behaviors of the three Monte Carlo formulations are similar to those observed in the case 2, as shown in Figs. 2.12 and 2.8. As in case 2, the ARM is inaccurate in the medium core. In this region, the ERM is rather accurate but its standard deviation becomes larger in the regions close to the walls. The FM is the most accurate of the three methods.

In case 7, the total emissivity of the whole medium ranges from 0.19 at 2500 K to 0.50 at 700 K. For these intermediate values of the equivalent optical thickness, an interesting conclusion can be drawn: the best approach is a combination of the two reciprocal Monte Carlo formulations. In the central hot zone, the ERM must be used, while in the cold zones close to the walls the ARM approach is more suitable, as illustrated by Fig. 2.13.

The approaches which give the best results for the radiative powers and the radiative wall fluxes are summarized for all cases in Table 2.3.

	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5	case 6	case 7
power	ARM-UD or FM-NUD	FM-NUD	ARM-UD	FM-NUD	ARM-NUD or UD	FM-NUD	ARM-UD near the walls and ERM-UD elsewhere
flux	ERM-UD	ARM or FM-NUD	ARM-UD	ERM-NUD	ERM-NUD or UD	ARM or FM-NUD	ARM or FM-NUD or UD

Tableau 2.3: Best approaches for radiative power and wall flux calculations.

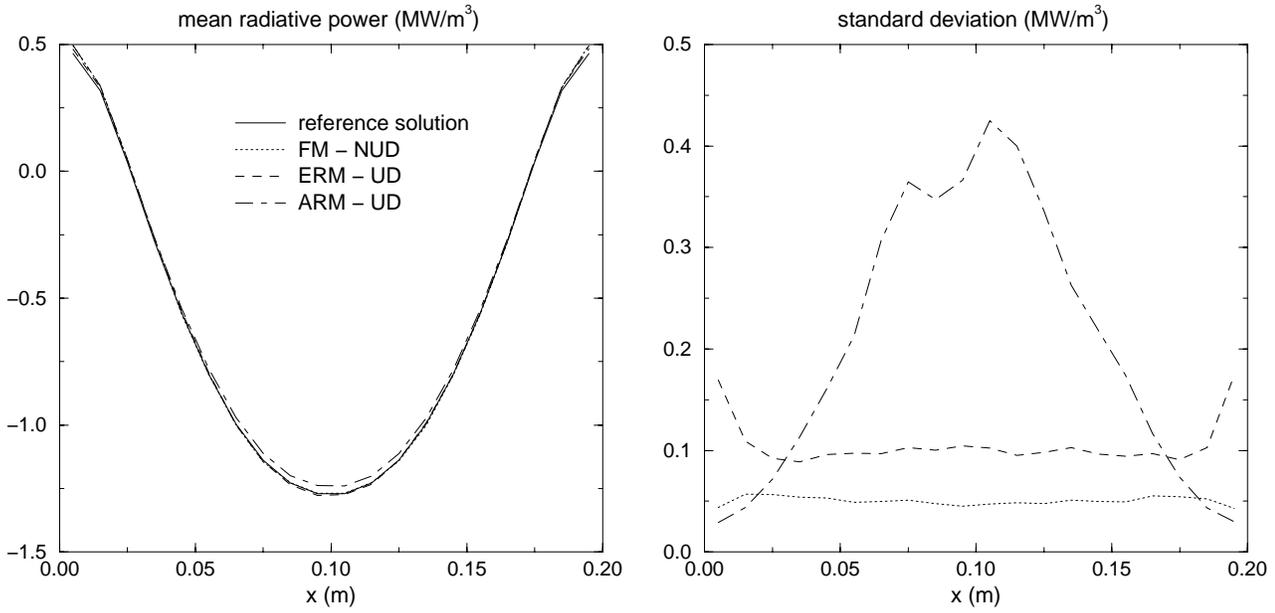


Figure 2.12: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 6).

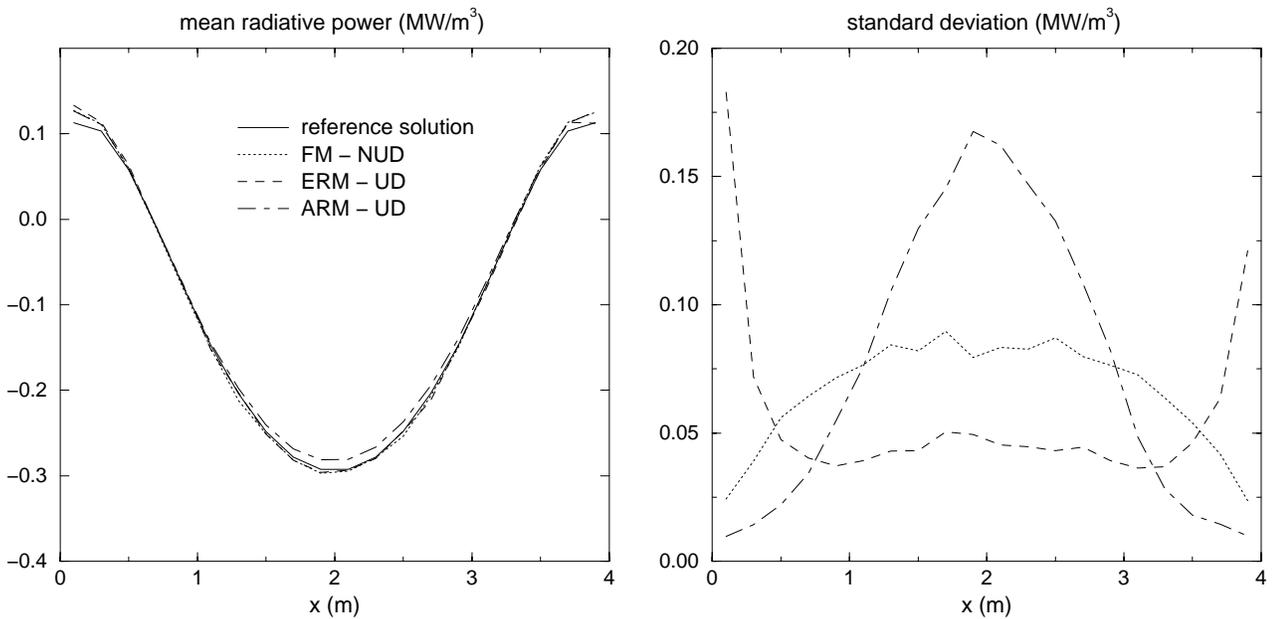


Figure 2.13: Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 7).

2.5 Conclusion

Two formulations of the Monte Carlo method based on the reciprocity principle, have been developed and discussed. The reciprocity principle is not only considered from the optical path point of view, as in the reverse Monte Carlo method [163, 166], but also from the energy point of view.

One-dimensional benchmark cases involving gray media or actual gas-mixtures and different optical thicknesses and thermal conditions have been defined. In actual gas-mixtures, gas radiative properties are treated in a correlated manner by a CK model. For a given computation time, comparisons have been made between standard deviations on flux and power fields, calculated by the above-mentioned approaches and a conventional forward Monte Carlo method. Although these problems are one-dimensional, the calculations have been carried out with three-dimensional calculation grids in order to check the capacity of the methods for dealing with actual three-dimensional systems.

Advantages and drawbacks of the three approaches have been discussed. In particular, the forward Monte Carlo method appears to be the most suitable for optically thin media, or semi-transparent media characterized by important temperature gradients. On the contrary, the reciprocal formulations are the most suitable for optically thick media or nearly isothermal media. These results have been found for fictitious gray media and actual gas-mixtures. In the general case, the three methods can be used concurrently in order to improve the accuracy by choosing the most suitable method at each point of an actual system.

The results given by the three methods are obtained simultaneously with only one calculation. In terms of computation time, it is not more expensive to obtain the results from the three methods than to obtain the results from only one given method.

Acknowledgements

The authors would like to thank Dr R. Fournier for helpful discussions.

Appendix : the CK model

The parameters of the CK model used here have been generated for applications at atmospheric pressure in the temperature range 300-2500 K [183]. The useful wavenumber range ($150\text{-}9200\text{ cm}^{-1}$) is divided into 44 spectral bands b for H_2O . However, CO_2 absorbs radiation in only 17 of these bands. Gauss quadratures with 7 points g and g_2 are used for H_2O and CO_2 respectively in their absorption bands, i.e. 49 quadrature points are used in the 17 overlapping bands. Therefore, 1022 pseudo-spectral points have to be considered, which is not a drawback here since a Monte Carlo approach is used.

The expression of the total power emitted by a volume V_i is

$$P_i^e = \sum_{b=1}^{44} \sum_{g=1}^7 \sum_{g_2=1}^{g_{2max}} \Delta P_i^e(b, g, g_2), \quad (2.28a)$$

$$\Delta P_i^e(b, g, g_2) = 4\pi V_i [k_{ibg}^{H_2O} + k_{ibg_2}^{CO_2}] I_b^0(T_i) \omega_g \omega_{g_2} \Delta\nu_b, \quad (2.28b)$$

where $k_{ibg}^{H_2O}$ is the pseudo-spectral absorption coefficient of H_2O in V_i and ω_g, ω_{g_2} the weights associated with the quadrature points. For transparency CO_2 bands, g_{2max} and ω_{g_2} are taken equal to 1. The random generation of a pseudo-spectral point is equivalent to the random generation of the three parameters b, g and g_2 . The probability to have these three parameters simultaneously is given by

$$\mathcal{P}(b, g, g_2) = \frac{\Delta P_i^e(b, g, g_2)}{P_i^e}. \quad (2.29)$$

The three parameters b_n, g_n and g_{2n} are deduced from the generation of only one uniform $[0 - 1]$ random number R according to the following double inequality

$$\sum_{b=1}^{b_n} \sum_{g=1}^{g_n} \sum_{g_2=1}^{g_{2n}-1} \mathcal{P}(b, g, g_2) < R \leq \sum_{b=1}^{b_n} \sum_{g=1}^{g_n} \sum_{g_2=1}^{g_{2n}} \mathcal{P}(b, g, g_2). \quad (2.30)$$

Chapitre 3

Extension aux milieux diffusants

Bien que la diffusion ne soit pas un phénomène primordial dans le rayonnement des flammes comportant des suies (voir fin du chapitre 1), il a été jugé utile d'introduire ce phénomène dans notre modèle. D'une part, cela nous permet de montrer que les deux méthodes de Monte Carlo réciproques développées au chapitre précédent peuvent être appliquées aux milieux diffusants. D'autre part, il est souhaitable que notre modélisation s'applique non seulement aux écoulements résultants d'une combustion aérobie, mais aussi aux écoulements dans les moteurs à propergol solide aluminisé contenant de grosses particules diffusantes d'alumine liquide (le code ASTRE a d'ailleurs été transféré à une équipe de SNECMA Moteurs de Bordeaux afin de calculer les transferts radiatifs dans ce type d'écoulement).

Contrairement à l'absorption, un traitement stochastique de la diffusion a été retenu. Cela signifie qu'un point de diffusion est tiré au sort avant la génération du chemin optique alors que l'absorption est calculée de façon déterministe dans chaque maille traversée par le chemin optique (on ne tire pas au sort l'autre extrémité du chemin optique où toute la puissance transportée le long de ce chemin serait déposée). Cette approche hybride est justifiée dans l'annexe D. Ce choix a été guidé par le fait qu'il est plus simple de traiter la diffusion de façon stochastique que de façon déterministe. En effet, la diffusion correspond à un changement de direction du rayon lumineux et non à son absorption partielle, qui, elle, peut être traitée de façon continue par de simples lois exponentielles. Cependant, il faut signaler qu'il existe des méthodes permettant de traiter la diffusion de façon continue le long du chemin optique (méthode « ray splitting » [165]) comme c'est le cas pour l'absorption. Ces méthodes seront peut-être explorées ultérieurement.

Dans un premier temps, les modifications apportées à l'algorithme afin de traiter les phénomènes de diffusion du rayonnement sont détaillées. Dans cette section, l'ensemble de l'algorithme est rappelé de façon succincte afin d'éclaircir l'exposé, mais pour plus de détails le lecteur pourra se reporter au chapitre précédent et aux annexes situées à la fin de ce mémoire. Dans un second temps, des calculs de validation en flux et en puissance ainsi que des comparaisons avec une méthode des ordonnées discrètes sont présentés.

3.1 Modifications apportées à l'algorithme

On rappelle que l'algorithme est structuré de la façon suivante. Dès que les données d'entrée (type de calcul, maillage, champ de température ...) sont lues, les puissances spectrales émises radiativement, ne tenant pas compte de l'autoabsorption pour les mailles volumiques, sont calculées pour chaque maille (volumes et surfaces). On en déduit la probabilité d'émission dans chaque bande spectrale pour chaque maille du domaine. Selon le type de répartition choisi (NUD ou UD), le nombre N_i de chemins optiques à générer aléatoirement au départ de chaque maille i est soit proportionnel à la puissance totale P_i^e émise par la maille (puissance donnée par les équations (2.7b) et (2.7c) ou (2.9b) et (2.9c)), soit uniforme sur tout le domaine, y compris sur les frontières. Ensuite, les chemins optiques sont générés un à un et construits de proche en proche, de façon stochastique.

3.1.1 Génération aléatoire d'un chemin optique

Cette étape consiste à tirer au sort l'ensemble des grandeurs caractéristiques d'un chemin optique avant de commencer sa construction.

L'ensemble des $(N_V + N_S)$ mailles volumiques et surfaciques résultant de la discrétisation spatiale est balayé et, pour chaque maille i , les N_i chemins optiques à générer aléatoirement depuis cette maille, sont traités un à un. La puissance associée au sens direct d'un chemin optique est égale à la puissance totale P_i^e émise par la maille i d'où est issu le chemin optique, divisée par le nombre total N_i de chemins optiques à générer aléatoirement depuis cette maille.

Pour chaque chemin optique, un nombre d'onde ν , une direction initiale $\vec{\Delta}$ et éventuellement un point source B sont tirés au sort. Le point source est tiré au sort uniquement si la première maille traversée par le chemin optique (qui est la maille source elle-même dans le cas d'une maille volumique) est non optiquement mince pour le nombre d'onde tiré au sort. Or, avec la prise en compte des phénomènes de diffusion, une maille de volume V_i est dite non optiquement mince si :

$$\beta_\nu \sqrt[3]{V_i} = (\kappa_\nu + \sigma_\nu) \sqrt[3]{V_i} \geq 0,1, \quad (3.1)$$

où β_ν est le coefficient monochromatique d'extinction (en m^{-1}).

La prise en compte des phénomènes de diffusion du rayonnement impose également de tirer au sort une nouvelle grandeur : l'épaisseur optique de diffusion E_d . Cette grandeur permet, lors de la construction du chemin optique, de déterminer le point D où a lieu le premier changement de direction par diffusion du chemin optique. La probabilité qu'un chemin optique change de direction par diffusion entre les abscisses curvilignes s et $s + ds$ ($s = 0$ au point B) est donnée par :

$$f(s)ds = \underbrace{\exp \left[- \int_0^s \beta_\nu(s') ds' \right]}_{\text{probabilité de transmission entre 0 et } s} \underbrace{\sigma_\nu(s) ds}_{\text{probabilité de diffusion entre } s \text{ et } s+ds}, \quad (3.2a)$$

$$= \exp \left[- \int_0^s \kappa_\nu(s') ds' \right] \underbrace{\exp \left[- \int_0^s \sigma_\nu(s') ds' \right] \sigma_\nu(s) ds}_{f_d(s)}, \quad (3.2b)$$

où f_d représente la fonction de distribution (ou PDF) de diffusion. D'après l'équation (3.2b), il apparaît clairement qu'il est possible de traiter séparément l'absorption et la diffusion puisque ces phénomènes sont statistiquement indépendants. On a choisi de traiter l'absorption de façon déterministe et la diffusion de façon stochastique (voir annexe D). D'après l'équation (3.2b), la puissance diffusée en s est alors obtenue en multipliant la puissance émise en $s = 0$ par le facteur $\exp\left[-\int_0^s \kappa_\nu(s')ds'\right]$ pour tenir compte, de façon déterministe, de l'absorption entre 0 et s .

On déduit de f_d , définie dans l'équation (3.2b), l'expression de la fonction de distribution cumulée de diffusion g_d :

$$g_d(s) = \int_0^s f_d(s')ds' = 1 - \exp\left[-\int_0^s \sigma_\nu(s')ds'\right], \quad (3.3)$$

qui prend des valeurs comprises entre 0 et 1. Soit R_d un nombre aléatoire tiré au sort uniformément dans l'intervalle $[0; 1]$, représentant une valeur possible de $g_d(s)$. L'épaisseur optique de diffusion E_d s'obtient donc en inversant l'équation (3.3), soit :

$$E_d = \int_0^s \sigma_\nu(s')ds' = -\ln(1 - R_d). \quad (3.4)$$

Comme R_d est un nombre aléatoire uniformément réparti dans l'intervalle $[0; 1]$, il en est de même pour $1 - R_d$. La relation qui est utilisée pour déterminer l'épaisseur optique de diffusion E_d est donc la suivante :

$$E_d = \int_0^s \sigma_\nu(s')ds' = -\ln(R_d). \quad (3.5)$$

Le point de diffusion D , d'abscisse curviligne s , est déduit de cette equation.

3.1.2 Construction d'un chemin optique

La construction d'un chemin optique s'effectue toujours dans le sens direct bien que des puissances puissent être véhiculées dans les deux sens (direct et réciproque) le long d'un chemin optique selon les méthodes considérées parallèlement.

Le point de sortie de la première maille traversée par le chemin optique est calculé. On en déduit la distance l_1 parcourue dans cette maille. Si le produit $\sigma_{1\nu}l_1$ est inférieur à E_d , le chemin optique ne change pas de direction. La puissance absorbée par la maille traversée est calculée de façon déterministe. On en déduit la nouvelle puissance transportée par le chemin optique dans le sens direct et la puissance échangée entre la maille traversée et la maille source. Les coordonnées de la maille suivante sont calculées et la même procédure est reprise en remplaçant $\sigma_{1\nu}l_1$ par $(\sigma_{1\nu}l_1 + \sigma_{2\nu}l_2)$. On continue ainsi tant que le rapport puissance transportée (dans le sens direct) sur puissance transportée initiale (dans le sens direct) est supérieur au critère de coupure³ fixé par l'utilisateur et tant que la somme $\sum_m \sigma_{m\nu}l_m$ est inférieure à E_d .

3. Ce critère d'arrêt du calcul du chemin optique, appelé « cutoff level » et noté τ_l dans le chapitre précédent, est défini comme une transmittivité limite.

Si le rapport défini ci-dessus devient inférieur au critère de coupure, la construction du chemin optique s'arrête et la puissance transportée résiduelle est entièrement déposée dans la maille qui suit celle où ce critère a été atteint, afin de conserver l'énergie sur l'ensemble du domaine.

Dans le cas contraire, lorsque la somme $\sum_{m=1}^M \sigma_{m\nu} l_m$ devient supérieure à E_d , le chemin optique change de direction par diffusion dans la $M^{\text{ième}}$ maille traversée. Le point de diffusion D à l'intérieur de la maille M est obtenu par la relation suivante :

$$\overrightarrow{OD} = \overrightarrow{OF_M} + \overrightarrow{F_M D} = \overrightarrow{OF_M} - \|\overrightarrow{F_M D}\| \vec{u}, \quad (3.6)$$

où le point O est l'origine du repère absolu, F_M le point de sortie connu de la maille M , \vec{u} le vecteur directeur normé du chemin optique orienté dans le sens direct (voir figure 3.1). La norme $\|\overrightarrow{F_M D}\|$ est donnée par :

$$\|\overrightarrow{F_M D}\| = \frac{\sum_{m=1}^M \sigma_{m\nu} l_m - E_d}{\sigma_{M\nu}}. \quad (3.7)$$

La puissance absorbée par la maille M , avant le changement de direction, est calculée en tenant compte de la longueur $l^* = l_M - \|\overrightarrow{F_M D}\|$. On en déduit la nouvelle puissance transportée par le chemin optique dans le sens direct et la puissance échangée entre la maille M et la maille source. Une nouvelle épaisseur optique de diffusion E'_d et une direction de diffusion $\vec{\Delta}'$ sont tirées au sort.

La direction de diffusion est caractérisée par deux angles θ_d et φ_d définis par rapport aux axes du repère local $(D, \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{u})$ lié au plan de diffusion Π_d (voir figure 3.1). Lorsque la diffusion est isotrope, ces deux angles sont obtenus de la façon suivante :

$$\varphi_d = 2\pi R_\varphi, \quad (3.8a)$$

$$\cos \theta_d = 1 - 2R_\theta, \quad (3.8b)$$

$$\sin \theta_d = \sqrt{1 - (\cos \theta_d)^2}, \quad (3.8c)$$

où R_φ et R_θ sont deux nombres aléatoires tirés uniformément entre 0 et 1. Si les phénomènes de diffusion sont au contraire anisotropes, le tirage au sort de ces angles prend en compte la fonction de phase de diffusion monochromatique p_ν de la maille M par l'intermédiaire de la relation suivante :

$$R_a = \frac{\int_0^{\varphi_d} \int_0^{\theta_d} p_\nu(M, \vec{\Delta} \rightarrow \vec{\Delta}') d\Omega}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi p_\nu(M, \vec{\Delta} \rightarrow \vec{\Delta}') d\Omega} = \frac{\int_0^{\varphi_d} \int_0^{\theta_d} p_\nu(M, \theta, \varphi, \theta'', \varphi'') \sin \theta'' d\theta'' d\varphi''}{4\pi}, \quad (3.9)$$

où R_a est un nombre aléatoire tiré uniformément entre 0 et 1.

Les coordonnées, dans le repère local, du nouveau vecteur directeur unitaire \vec{u}' s'expriment de la façon suivante :

$$u''_1 = \sin \theta_d \cos \varphi_d, \quad (3.10a)$$

$$u''_2 = \sin \theta_d \sin \varphi_d, \quad (3.10b)$$

$$u''_3 = \cos \theta_d. \quad (3.10c)$$

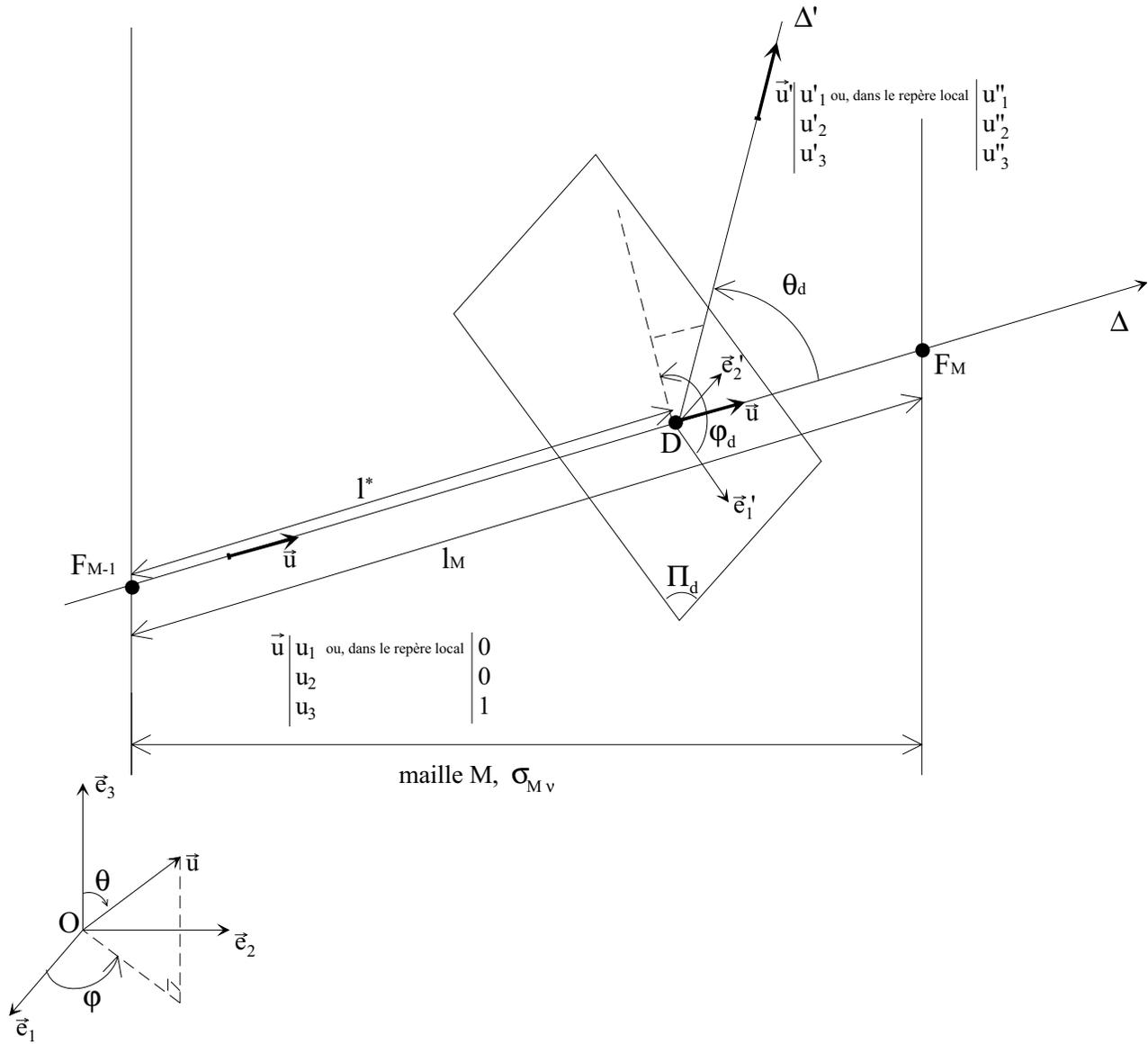


Figure 3.1: *Changement de direction par diffusion d'un chemin optique.*

Il s'agit maintenant de transformer ces coordonnées locales en coordonnées absolues. La matrice de passage du repère local $(D, \vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{u})$ au repère absolu $(O, \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ est constituée des trois vecteurs colonnes contenant les coordonnées, dans le repère absolu, des trois vecteurs formant la base orthonormée du repère local. Les coordonnées, dans le repère absolu, du nouveau vecteur directeur unitaire \vec{u}' sont donc définies par la relation matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ u'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_3 \cos \varphi & -\sin \varphi & u_1 \\ u_3 \sin \varphi & \cos \varphi & u_2 \\ -\sin \theta & 0 & u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u''_1 \\ u''_2 \\ u''_3 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

avec :

$$\sin \theta = \sqrt{1 - u_3^2}, \quad (3.12a)$$

$$\cos \varphi = \frac{u_1}{\sin \theta}, \quad (3.12b)$$

$$\sin \varphi = \frac{u_2}{\sin \theta}. \quad (3.12c)$$

Ensuite, le nouveau point de sortie F'_M et la distance l'_M entre les points D et F'_M sont calculés. On reprend alors la même procédure en commençant par comparer $\sigma_{M\nu} l'_M$ à la nouvelle valeur E'_d de l'épaisseur optique de diffusion.

3.2 Résultats de validation

Tous les calculs présentés dans cette section ont été effectués sur le cas de validation du mur plan décrit dans l'annexe C. Cependant, contrairement au chapitre précédent et à la description faite dans cette annexe, le milieu est diffusant et le champ de température $T(x)$ n'est pas parabolique et symétrique par rapport au plan situé à égale distance des deux parois. De plus, chaque paroi est caractérisée par une température, une émissivité et un type de réflexion (diffus ou spéculaire) qui peuvent être différents (voir figure 3.2), ce qui peut conduire à des valeurs différentes du flux radiatif sur chacune d'elles. Bien que les méthodes de Monte Carlo développées puissent traiter des milieux non gris et diffusant de façon anisotrope, tous les calculs ont été effectués, dans cette phase de validation, en supposant le milieu et les parois gris et en considérant les phénomènes de diffusion comme isotropes, dans la mesure où presque tous les cas de validation de la littérature ont été réalisés dans ces conditions. Par ailleurs, les champs de coefficients d'absorption et de diffusion sont considérés uniformes sur tout le domaine de calcul. Enfin, les parois sont toujours distantes d'une longueur L égale à 20 centimètres.

Bien que ce problème soit monodimensionnel, tous les calculs ont été effectués sur un cube de 20 centimètres de côté discrétisé dans les trois directions (voir justification dans l'annexe C). Ainsi, chaque section du maillage, à x fixé, comporte $N_y N_z$ mailles donnant lieu à autant de valeurs (théoriquement identiques) de la puissance radiative volumique dissipée. Le calcul fournit également $N_y N_z$ valeurs du flux radiatif pariétal sur chaque paroi (plans $x = 0$ et $x = L$). On peut donc, pour chaque tranche (à x constant) du milieu et chaque paroi, calculer la valeur moyenne et l'écart type sur $N_y N_z$ valeurs. C'est sous la forme de ces deux grandeurs statistiques que sont présentés les résultats dans cette section.

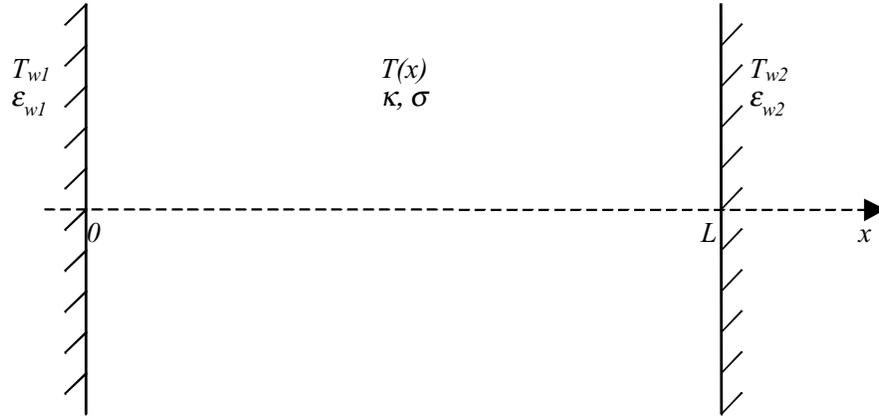


Figure 3.2: Géométrie 1D du mur plan en milieu gris diffusant de façon isotrope.

3.2.1 Validations en flux

3.2.1.1 Milieu absorbant non émissif

Özsisik et Siewert [190] ont étudié le cas d'un milieu gris, anisotherme, émissif, absorbant et diffusant de façon isotrope, confiné entre deux parois grises à réflexions spéculaires et à émission diffuse, et ont développé une technique analytique permettant d'obtenir la solution de ce problème. Dans un second article, Lii et Özsisik [191] ont présenté les résultats obtenus avec cette méthode pour un très grand nombre de situations (ils ont fait varier l'épaisseur optique d'extinction βL , l'albédo $\omega = \sigma/\beta$ ainsi que l'émissivité et le type de réflexion sur la paroi 2), mais en considérant le milieu et la paroi 2 non émissifs ($T(x) = T_{w2} = 0$ K) et la paroi 1 noire. Les valeurs numériques fournies, dans ce second papier, sont celles du « facteur de réflexion » \mathcal{R} de l'ensemble « milieu - paroi 2 » et du « facteur de transmission » \mathcal{T} définies par les relations suivantes :

$$\mathcal{R} = \frac{\phi_1^a}{\phi_1^e} = 1 + \frac{\phi_1^R}{\phi_1^e}, \quad (3.13a)$$

$$\mathcal{T} = \frac{\phi_2^a}{\phi_1^e} = \frac{\phi_2^R}{\phi_1^e}, \quad (3.13b)$$

où ϕ_1^a est le flux absorbé par la paroi 1, ϕ_1^R le flux radiatif sur la paroi 1 et ϕ_1^e le flux émis par la paroi 1, égal à :

$$\phi_1^e = \sigma_s T_{w1}^4, \quad (3.14)$$

où σ_s est la constante de Stephan égale à $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ et T_{w1} la température de la paroi 1 (en K).

Les trois méthodes de Monte Carlo (FM, ERM et ARM) fournissent la moyenne et l'écart type des flux radiatifs sur les parois 1 et 2. La valeur moyenne de \mathcal{R} et de \mathcal{T} ainsi que leur

	cas 1	cas 2	cas 3	cas 4	cas 5	cas 6	cas 7	cas 8
βL	0,1	1	5		1		10	20
L (m)	0,2							
$\omega = \sigma/\beta$	0,9				0,7	0,999	0,7	0,9
ε_{w1}	1							
ε_{w2}	1			0,5	1			
T_{w1} (K)	1000 et 3000				0			
T_{w2} (K)	0							
$T(x) = T_m$ (K)	0				1000			
$N_x \times N_y \times N_z$	20 \times 20 \times 20							
N	10 ⁶							
τ_l	0,01							

Tableau 3.1: Présentation des différents cas de validation en flux.

écart type relatif (é.t.r.) sont ensuite obtenus très simplement de la façon suivante :

$$\tilde{\mathcal{R}} = 1 + \frac{\widetilde{\phi_1^R}}{\phi_1^e}, \quad \frac{\sigma(\mathcal{R})}{\tilde{\mathcal{R}}} = \frac{\sigma(\phi_1^R)}{\phi_1^e + \widetilde{\phi_1^R}}, \quad (3.15)$$

$$\tilde{\mathcal{J}} = \frac{\widetilde{\phi_2^R}}{\phi_1^e}, \quad \frac{\sigma(\mathcal{J})}{\tilde{\mathcal{J}}} = \frac{\sigma(\phi_2^R)}{\phi_2^R}. \quad (3.16)$$

Quatre situations, parmi celles étudiées par Lii et Özisik, ont été choisies. Pour ces quatre cas, l'albédo ω est constant et égal à 0,9. Les différences entre ces quatre cas portent sur les valeurs de l'épaisseur optique d'extinction βL du milieu et de l'émissivité ε_{w2} de la paroi 2. Ces quatre situations correspondent aux quatre premiers cas présentés dans le tableau 3.1. Dans le cas 4, les réflexions sur la paroi 2 sont spéculaires. D'autre part, deux valeurs de la température de la paroi 1 ont été testées (1000 K et 3000 K) afin de vérifier l'indépendance des résultats vis-à-vis de cette grandeur. Les résultats obtenus avec ces deux températures sont strictement identiques, conformément à nos attentes. Enfin, compte tenu du champ de température et du maillage, les 10⁶ chemins optiques sont répartis uniformément sur les 400 facettes de la paroi 1, c'est-à-dire que 2500 chemins optiques sont issus de chaque facette de la paroi 1.

Les résultats obtenus dans ces quatre cas avec les trois méthodes de Monte Carlo sont comparés avec la solution de référence de Lii et Özisik [191] dans le tableau 3.2. Compte tenu du choix du maillage, les moyennes et écarts types présentés dans ce tableau sont calculés sur 400 valeurs. Dans l'ensemble, tous les résultats fournis par les méthodes de Monte Carlo sont en très bon accord avec la solution de référence.

La méthode ERM est pilotée par le processus d'émission. Comme la paroi 2 n'émet pas, cette méthode retourne une valeur nulle du flux radiatif sur la paroi 2. En revanche, elle se comporte très bien sur la paroi émettrice 1.

A l'opposé de la méthode ERM, la méthode ARM est pilotée par l'absorption. Comme les parois 1 et 2 sont absorbantes, la méthode ARM devrait pouvoir s'appliquer sur les deux parois. Cependant, on constate que cette méthode donne un résultat nul sur la paroi 1. Cela

		solution de référence	FM		ERM		ARM		temps CPU
			moy.	é.t.r. (%)	moy.	é.t.r. (%)	moy.	é.t.r. (%)	
Cas 1	\mathcal{R}	0,0744	0,0743	6,84	0,0743	7,03	0	0	610''
	\mathcal{T}	0,9060	0,9061	2,26	0	0	0,9061	2,26	
Cas 2	\mathcal{R}	0,3527	0,3532	3,14	0,3532	2,40	0	0	640''
	\mathcal{T}	0,4747	0,4744	2,52	0	0	0,4744	2,52	
Cas 3	\mathcal{R}	0,4763	0,4763	2,37	0,4763	1,49	0	0	730''
	\mathcal{T}	0,0534	0,0535	5,23	0	0	0,0535	5,23	
Cas 4	\mathcal{R}	0,4783	0,4780	2,45	0,4780	1,45	0	0	930''
	\mathcal{T}	0,0349	0,0345	4,05	0	0	0,0345	4,05	

Tableau 3.2: Comparaison des flux obtenus par les méthodes de Monte Carlo directe (FM) et réciproques (ERM et ARM) avec ceux donnés par la solution de référence de Lii et Özisik [191] dans le cas du mur plan pour différentes conditions.

provient du fait que la paroi 1 est l'unique zone émettrice du domaine. Par conséquent, la puissance absorbée par la paroi 1 provient forcément de l'émission de cette même paroi. Or, l'application du principe de réciprocité entre deux zones isothermes conduit à un échange radiatif rigoureusement nul. Sur la paroi 2, la méthode ARM donne les mêmes résultats que la méthode FM. En effet, cette paroi n'émet pas ; or, la différence entre ces deux méthodes réside dans le calcul de l'émission.

L'évolution du temps de calcul entre les cas 1, 2 et 3 montre que ce dernier augmente avec le nombre moyen de changements de direction subi par les chemins optiques (à albédo constant, plus l'épaisseur optique d'extinction augmente, plus le coefficient de diffusion est grand, plus le temps de calcul devient important). L'augmentation du temps de calcul entre les cas 3 et 4 montre que celui-ci est proportionnel à la longueur moyenne des chemins optiques (la paroi 2 est réfléchissante dans le cas 4 alors qu'elle est noire dans le cas 3). Ces temps de calcul ont été obtenus sur un seul processeur vectoriel d'un ordinateur NEC SX5. Le code ne tourne qu'à 75 Mflops alors que la puissance de crête de ce type de processeur est de 8 Gflops. Les performances pourraient être amplement améliorées par la vectorisation et/ou la parallélisation.

3.2.1.2 Milieu absorbant émissif avec parois absorbantes non émissives

Les cas étudiés ici sont très similaires à ceux du paragraphe précédent. La principale différence réside dans le fait que le milieu est désormais émissif. Ces cas ont été proposés par Joumani [1]. Les résultats présentés dans cette référence ont été obtenus avec un code monodimensionnel utilisant la méthode des ordonnées discrètes en considérant 1000 tranches de gaz entre les deux parois. Comme les deux parois sont identiques (noires et froides) et que les champs caractérisant le milieu (température, coefficients d'absorption et de diffusion) sont uniformes, les flux radiatifs sur les parois 1 et 2 sont égaux. L'auteur fournit donc le flux radiatif pariétal adimensionné par le flux émis par une surface noire à la même température

	Méthode ordonnées discrètes 1D	FM ou ARM				Temps de calcul (seconde)
		paroi 1		paroi 2		
		moyenne	é.t.r. (%)	moyenne	é.t.r. (%)	
Cas 5	0,4065	0,4071	2,98	0,4061	3,01	490
Cas 6	$0,1997.10^{-2}$	$0,1999.10^{-2}$	2,91	$0,1995.10^{-2}$	2,87	520
Cas 7	0,7430	0,7432	5,81	0,7408	5,73	510
Cas 8	0,5219	0,5120	6,07	0,5113	5,81	930

Tableau 3.3: Comparaison des flux obtenus par les méthodes de Monte Carlo directe (FM) et réciproque (ARM) avec ceux donnés par une méthode des ordonnées discrètes 1D [1] dans le cas du mur plan pour différentes conditions.

que le milieu, soit :

$$\phi^* = \frac{\phi_1^R}{\sigma_s T_m^4} = \frac{\phi_2^R}{\sigma_s T_m^4}, \quad (3.17)$$

où T_m est la température du milieu supposé isotherme.

Parmi les cas de calcul traités par Joumani [1], quatre ont été sélectionnés, faisant varier l'albédo ω de 0,7 à 0,999 et l'épaisseur optique d'extinction βL de 1 à 20. Ce sont les cas numérotés de 5 à 8 dans le tableau 3.1.

Les résultats obtenus dans ces quatre cas avec les méthodes de Monte Carlo sont comparés avec ceux obtenus avec la méthode des ordonnées discrètes dans le tableau 3.3. Compte tenu du choix du maillage, les moyennes et écarts types présentés dans ce tableau sont calculés sur 400 valeurs.

Comme les parois 1 et 2 sont absorbantes, la méthode ARM peut s'appliquer sur ces deux parois. En revanche, ces parois étant non émissives, la méthode ARM donne strictement les mêmes résultats que la méthode FM et la méthode ERM ne peut s'appliquer sur aucune des deux parois.

Dans les quatre cas, les méthodes de Monte Carlo et la méthode des ordonnées discrètes sont en accord. L'écart type augmente avec l'épaisseur optique car le nombre de chemins optiques issus du milieu atteignant les parois diminue avec l'épaisseur optique.

A épaisseur optique constante, l'augmentation de l'albédo entraîne un accroissement du temps de calcul car le nombre moyen de changements de direction subi par un chemin optique augmente. L'impact sur le temps de calcul n'est ici que très léger. En effet, la longueur des chemins optiques est limitée car les parois sont noires. Ces temps de calcul ont également été obtenus sur un seul processeur vectoriel d'un ordinateur NEC SX5. Les performances sont les mêmes que précédemment.

3.2.2 Validation en puissance

Les validations en puissance dans un milieu diffusant sont très rares dans la littérature. On a donc cherché à se ramener à un cas où certaines hypothèses simplificatrices sont valables et permettent d'appliquer des formules analytiques simples. On a alors considéré le cas des milieux épais où l'approximation conductive [23] permet d'aboutir à une expression simplifiée

de la puissance radiative volumique dissipée en un point n'interagissant pas avec les parois :

$$P^R(x) = -\frac{\partial \phi^R}{\partial x} = \frac{\partial(\lambda_R \frac{dT}{dx})}{\partial x} = \frac{\partial \lambda_R}{\partial x} \frac{dT}{dx} + \lambda_R \frac{d^2 T}{dx^2}, \quad (3.18)$$

où λ_R est la conductivité radiative donnée par :

$$\lambda_R = \frac{4\pi}{3} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\beta_\nu} \frac{\partial L_\nu^0(T)}{\partial T} d\nu. \quad (3.19)$$

Les hypothèses nécessaires pour aboutir à cette formule sont les suivantes :

- diffusion isotrope ;
- milieu épais, c'est-à-dire que si d est une distance petite devant l'épaisseur L du milieu, sur laquelle on peut considérer T et dT/dx uniformes, alors on a : $\kappa_\nu d \gg 1$ et $\sigma_\nu d \gg 1$;
- champs de coefficients d'absorption κ_ν et de diffusion σ_ν uniformes.

Si, de plus, on suppose que le milieu est gris et que le profil de température $T(x)$ est linéaire entre les parois, c'est-à-dire de la forme :

$$T(x) = \frac{T_{w2} - T_{w1}}{L} x + T_1, \quad (3.20)$$

la puissance radiative volumique s'écrit alors :

$$P^R(x) = \frac{16\sigma_s (T_{w2} - T_{w1})^2}{\beta L^2} T^2(x). \quad (3.21)$$

Afin de satisfaire toutes les hypothèses nécessaires à l'application de cette formule, les conditions de calcul choisies sont les suivantes :

- $\beta L = 20$;
- $\omega = 0,5$;
- $T(x) = 320 - 200x$ (T en Kelvin avec x en mètre) ;
- $T_{w1} = 320$ K et $\varepsilon_{w1} = 0$ avec réflexions spéculaires ;
- $T_{w2} = 280$ K et $\varepsilon_{w2} = 0$ avec réflexions spéculaires ;
- maillage $200 \times 6 \times 6$, soit 7200 mailles cubiques, 72 facettes paroi (= miroir puisque $\varepsilon_{w1} = \varepsilon_{w2} = 0$) et 4800 facettes miroir ;
- $7,2 \cdot 10^7$ chemins optiques à générer répartis uniformément sur les 72 mailles volumiques centrales, soit 10^6 chemins optiques issus de chaque maille ;
- arrêt du suivi d'un photon lorsqu'il transporte moins de 1% de sa puissance initiale ($\tau_l = 0,01$).

La formule (3.21) n'étant valable que dans les zones n'interagissant pas avec les parois, les puissances sont uniquement calculées dans les 72 mailles volumiques contenues dans les deux tranches centrales (tranches 100 et 101) situées à peu près à égale distance des deux parois. Ainsi, entre ces tranches et les parois, l'épaisseur optique d'extinction est de l'ordre de 10 et celle d'absorption de l'ordre de 5 ce qui est suffisant pour satisfaire les hypothèses énoncées ci-dessus. Le calcul n'a été effectué qu'avec la méthode ERM car c'est la seule des trois méthodes qui permet de calculer la puissance dans une maille donnée sans qu'il soit nécessaire d'émettre des chemins optiques depuis toutes les mailles. En effet, dans la méthode ERM, un chemin optique sert exclusivement au calcul du bilan radiatif dans la maille d'où il est issu, alors que dans les méthodes FM et ARM, un chemin optique intervient dans la statistique de toutes les mailles qu'il traverse.

Le maillage a été raffiné dans la direction x afin que le profil de température $T(x)$ soit pris en compte de façon précise (on rappelle en effet qu'une maille est supposée isotherme et que dans un milieu optiquement épais la représentation numérique du profil de température est très importante puisque les échanges n'ont lieu qu'entre mailles voisines). En revanche, les discrétisations spatiales sont assez grossières dans les directions y et z afin de conserver un nombre total de mailles constant car le temps de calcul est sensible au nombre moyen de mailles traversées par un chemin optique. Ce type de discrétisation n'affecte quasiment pas la qualité des résultats car la quantité $N_y N_z$ n'a d'importance que pour le calcul des grandeurs statistiques.

Les puissances radiatives volumiques (en W/m^3) obtenues par la méthode ERM sont comparées à celles données par l'équation (3.21) dans le tableau 3.4. Compte tenu du choix du maillage, les moyennes et écarts types présentés dans ce tableau sont calculés sur 36 valeurs.

	Approximation conductive (équation (3.21))	ERM moyenne (écart type relatif)
Tranche 100 $9,9 < x < 10$ cm ; $T = 300,1$ K	32,68	32,29 (7,09%)
Tranche 101 $10 < x < 10,1$ cm ; $T = 299,9$ K	32,64	31,50 (6,22%)

Tableau 3.4: Comparaison des puissances radiatives volumiques (en W/m^3) obtenues par la méthode de Monte Carlo réciproque (ERM) avec celles issues de l'approximation conductive dans le cas du mur plan optiquement épais.

Le temps de calcul nécessaire à l'obtention de ces résultats est de 40000 secondes sur la même configuration matérielle que précédemment. Les performances restent inchangées (75 Mflops).

Le temps de calcul est beaucoup plus important que dans les cas précédents car le nombre de chemins optiques générés est 72 fois plus important. Bien que la puissance radiative ne soit évaluée que dans 72 mailles seulement (au lieu de 8000 dans les calculs précédents), un grand nombre de chemins optiques est nécessaire car ce type de calcul converge très lentement. En effet, l'importante épaisseur optique du milieu et les faibles gradients de température entraînent des puissances radiatives extrêmement faibles, en valeur absolue, comparées aux puissances

émises et absorbées. On se retrouve donc dans la situation délicate où la quantité recherchée, obtenue par différence de deux grands nombres, est très faible, en valeur absolue, par rapport à ces grands nombres. C'est pourquoi, l'évaluation précise des puissances radiatives, dans ces conditions, est extrêmement difficile et nécessite un nombre important de chemins optiques.

Chapitre 4

Application à une flamme turbulente de diffusion éthylène/air

Dans ce chapitre, la méthodologie de calcul des transferts radiatifs développée dans le chapitre 2 est appliquée à une flamme turbulente de diffusion éthylène/air contenant des particules de suie. L'objectif de ce chapitre est la mise en évidence de l'importance de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence. Dans cette optique, il n'est donc pas indispensable de tenir compte de la diffusion, qui compliquerait la modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence et rendrait, par conséquent, plus difficile l'interprétation des résultats. Pour cette raison et celles évoquées dans la section 1.3.3 page 21, la diffusion du rayonnement par les particules de suie est négligée. Par ailleurs, comme l'éthylène brûle dans l'air ambiant à la pression atmosphérique, les fluctuations de pression sont négligées dans la modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence.

La flamme, ainsi que sa simulation numérique aérothermochimique (domaine de calcul, maillage, conditions imposées sur les frontières du domaine, modèles aérodynamique, de combustion, de formation des suies . . .) sont décrites dans la première section. Dans un deuxième temps, la modélisation des transferts radiatifs au sein de cette flamme (maillage, conditions aux limites, discrétisation spectrale, modèles de propriétés radiatives des gaz et des suies, modèle d'interaction rayonnement/turbulence . . .) est détaillée. Enfin, tous les résultats obtenus avec notre modèle, c'est-à-dire le code de calcul de transferts radiatifs ASTRE, sont présentés dans la dernière section. En particulier, dans cette section, les trois méthodes associées aux deux techniques de répartition des chemins optiques sont comparées; l'influence des conditions radiatives imposées sur les frontières du domaine est discutée; l'influence de l'interaction rayonnement/turbulence, ainsi que l'erreur commise lors de l'utilisation d'une hypothèse de décorrélation des fluctuations turbulentes entre mailles optiquement minces sont étudiées; les influences de la constante K_s du coefficient d'absorption des suies et de la taille des tourbillons sont successivement mises en évidence; les contributions respectives des gaz et des suies sont données.

4.1 Présentations de la flamme et de sa simulation aérothermochimique

4.1.1 Description de la flamme étudiée

La flamme choisie a été étudiée expérimentalement au CORIA à Rouen [192, 193]. Il s'agit d'un jet axisymétrique vertical ascendant d'éthylène pur débouchant dans l'air ambiant. Le jet d'éthylène, issu d'un tuyau de diamètre $D = 4$ mm, a une vitesse débitante U_0 de 29,5 m/s. L'éthylène est préchauffé à 322 K. Cette flamme est caractérisée par un nombre de Reynolds ($Re = \rho U_0 D / \mu$) de 11800 et un nombre de Froude ($Fr = U_0^2 / (gD)$) de 22200.

Comme l'éthylène produit des quantités importantes de suie (environ 10 fois plus que le méthane), la flamme est très lumineuse, de couleur jaune. La partie visible de la flamme s'étend sur 70 cm. La puissance dégagée par la réaction de combustion est à peu près de 18 kW. Une fraction de cette énergie, égale à environ 30-35%, est évacuée vers l'extérieur par rayonnement (cette valeur est en accord avec des études précédentes menées sur des flammes d'éthylène [15, 19]). La température maximale mesurée le long de l'axe de la flamme est de l'ordre de 1600 K. La fraction volumique de suie maximale sur l'axe a été mesurée à 38 cm au-dessus de la sortie du tuyau d'injection et vaut 1,9 ppm. La flamme est à la pression atmosphérique.

4.1.2 Domaine de calcul, maillage et conditions aux limites choisis

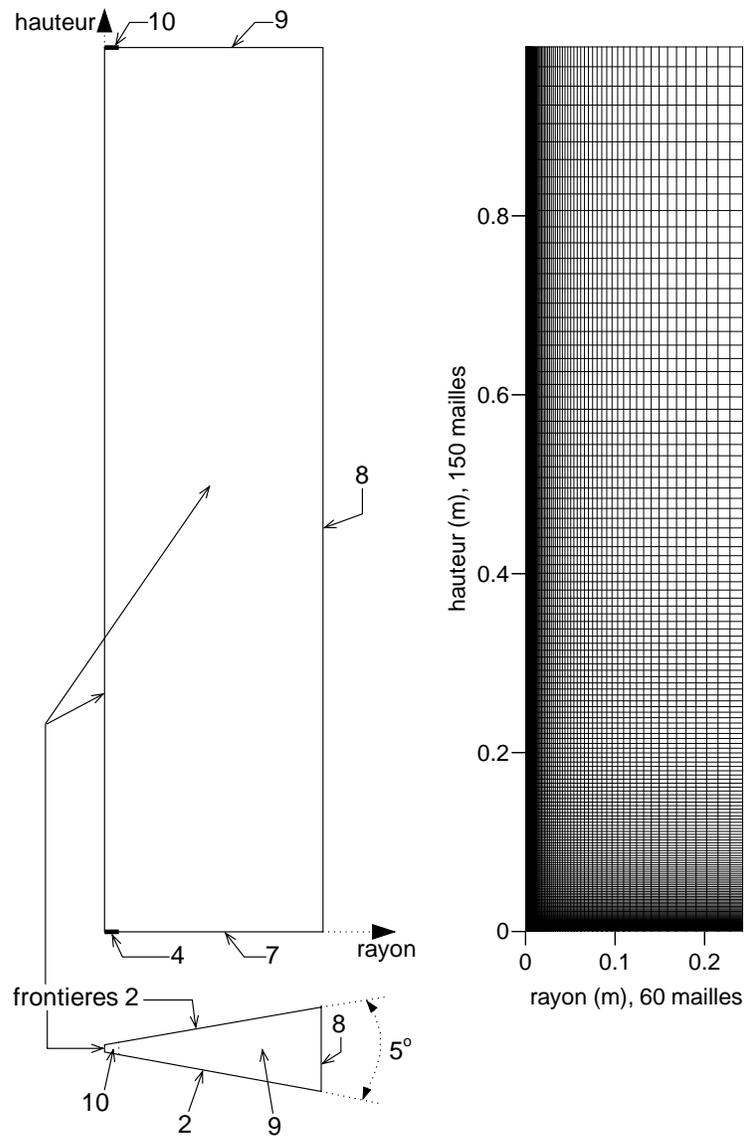
Pour traiter correctement la dispersion turbulente des particules fluides dans le calcul d'aérothermochimie, le domaine de calcul doit nécessairement être tridimensionnel. Cependant, la flamme étant axisymétrique, on peut se contenter d'effectuer le calcul sur un petit secteur de 5° et de n'introduire qu'une seule maille dans la direction orthoradiale. Le rayon du secteur calculé est de 25 cm et sa hauteur de 1 m. L'angle étant très faible, les arcs de cercle sont approximés par des segments de droites. De plus, toutes les mailles devant être délimitées par 6 facettes de surface non nulle (condition imposée par le module de trajectographie), le domaine ne s'étend pas jusqu'à l'axe de la flamme, mais s'arrête à quelques microns de l'axe. Le domaine est donc un hexaèdre de section trapézoïdale (voir figure 4.1).

La direction axiale (hauteur) est découpée en 150 mailles irrégulières dont la taille augmente avec la hauteur (voir figure 4.1). La direction radiale est discrétisée en 60 intervalles irréguliers dont la largeur augmente avec le rayon. La direction angulaire ne comporte qu'une seule maille. Le maillage, irrégulier mais structuré, comprend donc 9000 mailles.

Les conditions imposées sur les frontières du domaine (numérotées sur la figure 4.1) pour effectuer le calcul aérothermochimique de la flamme sont données dans le tableau 4.1. Dans ce tableau, est également donné le nombre de facettes que comporte chaque frontière.

4.1.3 Modélisation aérothermochimique utilisée

La méthodologie adoptée, appelée modèle PEUL (Probabiliste EULérien Lagrangien), a initialement été proposée par Borghi [194] et a ensuite été reprise et étendue [3, 4, 8, 195, 196]. Elle consiste à découper le calcul aérothermochimique en un calcul eulérien pour l'aérodynamique suivi d'un calcul lagrangien pour la thermochimie. Cette approche est équivalente à un modèle

Figure 4.1: *Domaine de calcul et maillage utilisés pour calculer la flamme.*

numéro de la frontière	condition imposée sur la frontière	nombre de facettes
2	plan de symétrie	18150
4	débit imposé (injection d'éthylène)	4
7	pression d'arrêt imposée (entrée d'air)	56
8	pression d'arrêt imposée (entrée d'air)	150
9	pression statique imposée (sortie des gaz de combustion)	56
10	pression statique imposée (sortie des gaz de combustion)	4

Tableau 4.1: *Conditions imposées sur les frontières du domaine pour effectuer le calcul aérothermochimique de la flamme.*

à équation de transport de PDF [194, 197, 198] résolue par une méthode de Monte Carlo. L'objectif de ce type de modèle est de construire en tout point du domaine une PDF jointe composition/température afin d'évaluer le taux moyen de production (ou de disparition) de chaque espèce chimique et le taux moyen de dégagement de chaleur. Ces modèles présentent l'avantage de pouvoir tenir compte d'une cinétique chimique très détaillée faisant intervenir des temps caractéristiques chimiques très variables.

Lors du calcul eulérien, des valeurs moyennes des grandeurs aérodynamiques, du taux de dégagement de chaleur, de la température et des concentrations des espèces gazeuses majoritaires sont obtenues. Le calcul lagrangien permet d'affiner l'estimation des grandeurs thermochimiques moyennes en calculant les concentrations des espèces gazeuses minoritaires et des suies. Le calcul lagrangien permet également d'obtenir les fluctuations turbulentes de la température, du taux de dégagement de chaleur, des taux de production et des concentrations de toutes les espèces gazeuses et des suies.

En toute rigueur, il faudrait effectuer plusieurs itérations eulériennes/lagrangiennes ; c'est-à-dire réaliser un nouveau calcul eulérien en tenant compte des termes sources chimiques issus du calcul lagrangien, puis refaire un nouveau calcul lagrangien et ainsi de suite . . . On s'est contenté ici d'une seule itération mais on a pris en compte, dans le calcul eulérien, les principaux phénomènes physiques de façon à obtenir un calcul proche de la solution réelle dès la première étape eulérienne. Notons que les itérations ne sont nécessaires que si la variation du taux de dégagement de chaleur est suffisamment importante pour modifier de façon non négligeable le champ de vitesse. Or, la prise en compte des espèces polluantes minoritaires n'a pas un très fort impact sur le taux de dégagement de chaleur.

4.1.3.1 Calcul eulérien

Lors du calcul eulérien stationnaire, les équations de Navier Stokes moyennées sont résolues par une méthode de volumes finis. Ce système d'équations est fermé à l'aide d'un modèle de turbulence, le modèle $k - \epsilon_k$, d'un modèle de combustion turbulente, le modèle CLE (Combustion Limitée par l'Equilibre) [4, 199, 200] et d'un modèle semi-empirique de transferts radiatifs [3, 4].

Le rôle du modèle CLE est de calculer la vitesse moyenne de consommation des réactants et d'en déduire le taux moyen de dégagement de chaleur. Pour cela, les hypothèses suivantes sont faites :

- seule la réaction chimique globale d'oxydation totale (produits = $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$) est considérée et elle est supposée brusque (quand elle démarre, elle est infiniment rapide) ;
- le taux de conversion des réactants est limité par l'équilibre donné par la richesse locale.

L'idée de base du modèle CLE est de conserver l'hypothèse d'une réaction d'oxydation unique et brusque, mais de limiter la quantité de combustible brûlé, afin de représenter l'oxydation incomplète des réactants dans une réaction réelle de combustion.

On introduit donc une grandeur très importante : la fraction massique limite de combustible Y_F^* . Elle représente la limite inférieure pouvant être atteinte en chaque point, par la fraction massique de combustible Y_F . De cette façon, après la combustion, il reste toujours une petite quantité de combustible. La quantité de carburant restante est calculée de manière à ce que

la température soit égale à celle donnée par un calcul d'équilibre chimique pour les mêmes conditions de richesse.

Par conséquent, l'énergie dégagée par la combustion, calculée par le modèle CLE est inférieure à l'énergie dégagée par la combustion totale. Ainsi, l'énergie puisée par les réactions de dissociation formant les espèces minoritaires est modélisée et les niveaux de température calculés sont proches de la réalité.

Les pertes radiatives sont prises en compte de façon semi-empirique dans le calcul eulérien. Un terme puits, exprimé en W/m^3 , a été introduit dans l'équation de l'énergie. Il a pour expression [3, 4] :

$$P^R = -\rho\dot{\omega}_F h^* \int_0^{+\infty} \exp\left[-\left(\frac{\ln(r)}{2\sigma}\right)^2\right] f(r) dr \quad (4.1)$$

où r est la richesse, ρ la masse volumique (en kg/m^3), $\dot{\omega}_F$ le taux de disparition du combustible (en s^{-1}), $f(r)$ une PDF simulée par une fonction β , h^* et σ des constantes (respectivement en J/kg et sans unité) fixées de façon à ce que les résultats numériques correspondent au mieux aux mesures [192, 193]. L'intégrale sur tout le domaine (secteur de 5°) de ce terme donne une (pseudo-) perte radiative totale d'environ 80 W, soit 32% de la puissance dégagée par la réaction de combustion qui est de 250 W. C'est donc cet ordre de grandeur que l'on devra retrouver lors du calcul de la puissance radiative volumique avec le code de transferts radiatifs.

Afin de mesurer l'influence des transferts radiatifs, un calcul eulérien a été réalisé sans les prendre en compte. Les champs de température issus des deux calculs eulériens avec et sans prise en compte des pertes radiatives sont comparés sur la figure 4.2. On constate que l'influence des transferts radiatifs dans les flammes ouvertes est très importante : ils abaissent la température maximale d'environ 800 K pour une température maximale initiale de 2400 K.

4.1.3.2 Calcul lagrangien

Lors de ce calcul, les trajectoires et les évolutions thermochimiques d'un grand nombre de particules fluides indépendantes sont simulées. Pour le calcul de la flamme, 24000 particules fluides ont été suivies. Ces particules sont injectées depuis les frontières 4, 7 et 8 proportionnellement au débit entrant, rebondissent éventuellement sur la frontière 2 et sortent du domaine de calcul par les frontières 9 et 10 (voir figure 4.1). Afin de calculer l'état thermochimique d'une particule, un schéma cinétique détaillé (113 réactions faisant intervenir $N_e = 37$ espèces [3]) et un modèle de formation/destruction des suies sont utilisés [3, 4].

Ce modèle prend en compte de nombreux phénomènes physiques :

- apparition des précurseurs légers, c'est-à-dire des hydrocarbures polyaromatiques (HPA) de masse molaire inférieure à 200 g/mol (réaction entre benzène et acétylène) ;
- croissance (addition d'acétylène) des précurseurs légers et lourds (masse molaire comprise entre 200 et 1200 g/mol) ;
- coalescence (collision) des précurseurs légers et lourds (deux légers forment un lourd, un léger et un lourd forment un lourd et deux lourds forment une particule de suie) ;
- oxydation (destruction) par O_2 et OH des précurseurs légers et lourds ;

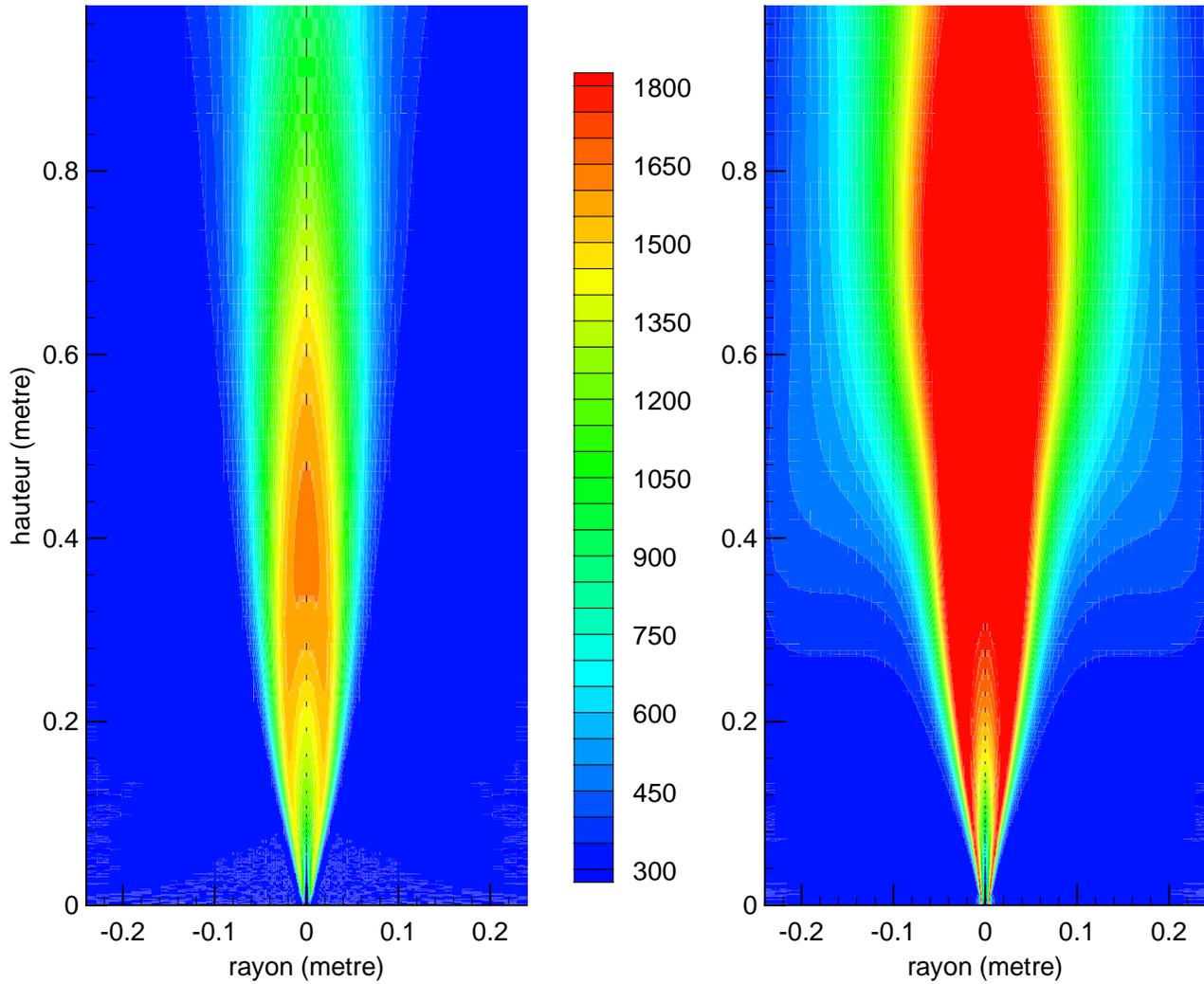


Figure 4.2: Comparaison des champs de température (en K) issus de deux calculs eulériens avec (à gauche) et sans (à droite) prise en compte des transferts radiatifs.

- apparition d’une particule de suie (nucléation) suite à la collision de deux précurseurs lourds ;
- croissance en surface des particules de suie par branchement d’espèces gazeuses ;
- coalescence des particules de suie (collision entre deux particules de suie ou entre une particule de suie et un précurseur lourd ou léger) ;
- oxydation (destruction) par O_2 et OH des particules de suie.

En revanche, ce modèle ne rend pas compte des processus d’agglomération à l’origine des agrégats. Ce modèle comporte une équation de bilan pour chacune des 5 variables suivantes : la concentration en précurseurs légers, la concentration en précurseurs lourds, le nombre total de particules de suie par unité de volume, la fraction volumique de suie (rapport du volume occupé par les particules de suie sur le volume du gaz) et la surface totale des particules de suie par unité de volume. Enfin, dans ce modèle, les particules de suie sont supposées être à la même température que l’écoulement.

La trajectoire de chaque particule fluide est obtenue en résolvant les équations suivantes :

$$\frac{dx_i}{dt} = \langle v_i \rangle + v'_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.2)$$

où i désigne successivement les 3 directions de l’espace, x_i les coordonnées de la particule fluide, $\langle v_i \rangle$ les composantes moyennes du vecteur vitesse issues du calcul eulérien et v'_i les fluctuations du vecteur vitesse obtenues par un processus stochastique [3,4].

Pour fermer les équations d’évolution thermochimique d’une particule fluide, le modèle IEM (Interaction par Echange avec la Moyenne) est utilisé pour modéliser les échanges entre la particule et son environnement extérieur. Notons que ces échanges sont liés à la turbulence à petite échelle présente dans l’écoulement. Ces équations s’écrivent alors :

$$\frac{dY_j}{dt} = \frac{\langle Y_j \rangle - Y_j}{C_\tau \langle k \rangle / \langle \epsilon_k \rangle} + \dot{\omega}_j \quad j = 1, \dots, N_e + 6 \quad (4.3)$$

où Y_j désigne successivement les fractions massiques des N_e espèces, l’enthalpie et les 5 variables du modèle de formation/destruction des suies. $\langle Y_j \rangle$ représente la valeur moyenne, provenant du calcul eulérien, de la grandeur Y_j . $C_\tau \langle k \rangle / \langle \epsilon_k \rangle$ est le temps caractéristique d’échange où $\langle k \rangle$ est l’énergie cinétique turbulente moyenne (en m^2/s^2), $\langle \epsilon_k \rangle$ le taux moyen de dissipation de l’énergie cinétique turbulente (en m^2/s^3) et C_τ une constante sans dimension égale à 0,7 [3] ($\langle k \rangle$ et $\langle \epsilon_k \rangle$ sont issues du calcul eulérien). $\dot{\omega}_j$ désigne le taux de production ou de disparition de la grandeur Y_j dans la particule fluide. Le premier terme du second membre de l’équation (4.3) représente l’échange, dû à la diffusion turbulente, entre la particule fluide et son environnement caractérisé par l’ensemble des grandeurs moyennes issues du calcul eulérien. Pour les grandeurs Y_j non calculées lors de l’étape eulérienne, ce terme d’échange est pris égal à zéro. Dans l’équation d’évolution de l’enthalpie (équation (4.3) où Y_j désigne l’enthalpie), les transferts radiatifs ne sont pas pris en compte. Cependant, la valeur de l’enthalpie instantanée de la particule fluide est limitée car l’enthalpie moyenne, issue du calcul eulérien et présente dans le terme d’échange de cette équation, tient compte, de façon semi-empirique, des transferts radiatifs (voir équation (4.1)). Toutefois, il sera nécessaire, à l’avenir, de prendre

en compte les transferts radiatifs dans le calcul lagrangien. En effet, la procédure actuelle conduit à des températures lagrangiennes qui peuvent être localement supérieures de 200 K aux températures eulériennes [4].

La prise en compte dans chaque maille de la contribution de toutes les particules fluides l'ayant traversée, rend possible le calcul en chaque maille de la PDF jointe dépendant de toutes les grandeurs calculées lors de l'étape lagrangienne. La contribution d'une particule fluide dans une maille est pondérée par le temps de présence de cette particule fluide dans la maille.

4.1.3.3 Hypothèses et données nécessaires au calcul des transferts radiatifs

Lorsque l'interaction rayonnement/turbulence est prise en compte, les champs d'énergie cinétique turbulente moyenne $\langle k \rangle$ et de son taux moyen de dissipation $\langle \epsilon_k \rangle$ sont nécessaires pour évaluer la taille des structures turbulentes cohérentes dans le calcul des transferts radiatifs. Ces champs, issus du calcul eulérien, sont représentés sur la figure 4.3. Ce type de calcul de transferts radiatifs nécessite également une PDF jointe multidimensionnelle de la température T , de la fraction volumique de suie f_V et des fractions molaires x_i des espèces gazeuses participant aux transferts radiatifs (en toute rigueur, le coefficient d'absorption dépend également du champ de pression p , mais on rappelle que ce dernier est ici supposé uniforme et égal à 1 atm). En ne tenant compte que des principales espèces gazeuses participant aux transferts radiatifs, la PDF jointe requise est une PDF à 5 dimensions (T , f_V , x_{H_2O} , x_{CO_2} et x_{CO}).

Cependant, le stockage, en chaque point d'un maillage, d'une telle PDF pose des problèmes informatiques d'occupation mémoire. Pour fixer les idées, avec un maillage comportant 10^4 mailles et en se contentant de 10 intervalles pour chaque dimension, on constate qu'il faut stocker 10^9 valeurs. En admettant qu'une valeur nécessite 8 octets, on obtient une occupation mémoire de 8 giga-octets.

Pour cette raison, il a fallu trouver un moyen d'obtenir une représentation des fluctuations de ces 5 grandeurs sans passer par cette gigantesque PDF. Afin d'y parvenir, une hypothèse a été nécessaire : l'hypothèse de réaction brusque. Cependant, cette hypothèse n'est utilisée que partiellement (elle n'est pas appliquée à toutes les réactions et donc à toutes les espèces). Ceci a plusieurs conséquences. D'une part, le degré d'avancement ξ des réactions principales est soit égal à 0, soit égal à 1. D'autre part, lorsque ξ est égal à 1, la température et les fractions molaires des espèces gazeuses considérées, qui sont des espèces majoritaires, sont déterminées par les conditions d'équilibre, autrement dit, sont fixées dès lors qu'on connaît la richesse r . En revanche, la cinétique de formation et d'oxydation des particules de suie est lente par rapport à la cinétique des réactions principales et l'hypothèse de réaction brusque ne peut pas s'appliquer aux suies. En d'autres termes, on peut remplacer la PDF jointe à 5 dimensions par une loi de probabilité à deux valeurs pour le degré d'avancement ξ et par une PDF jointe à 2 dimensions (r et f_V) conditionnée par le fait que ξ soit égal à 1.

Cette hypothèse nécessite la connaissance des courbes d'équilibre donnant la température et les fractions molaires des espèces gazeuses majoritaires en fonction de la richesse. Pour cela, les évolutions, en fonction de la richesse, de la température et des fractions molaires (x_{H_2O} , x_{CO_2} et x_{CO}) des particules fluides ont été observées au cours du calcul lagrangien. Par exemple, les évolutions en fonction de la richesse des températures de trois particules fluides, représentatives de l'ensemble des particules, sont représentées sur la figure 4.4. Ces trois courbes présentent toutes les mêmes tendances mais ne coïncident pas exactement car

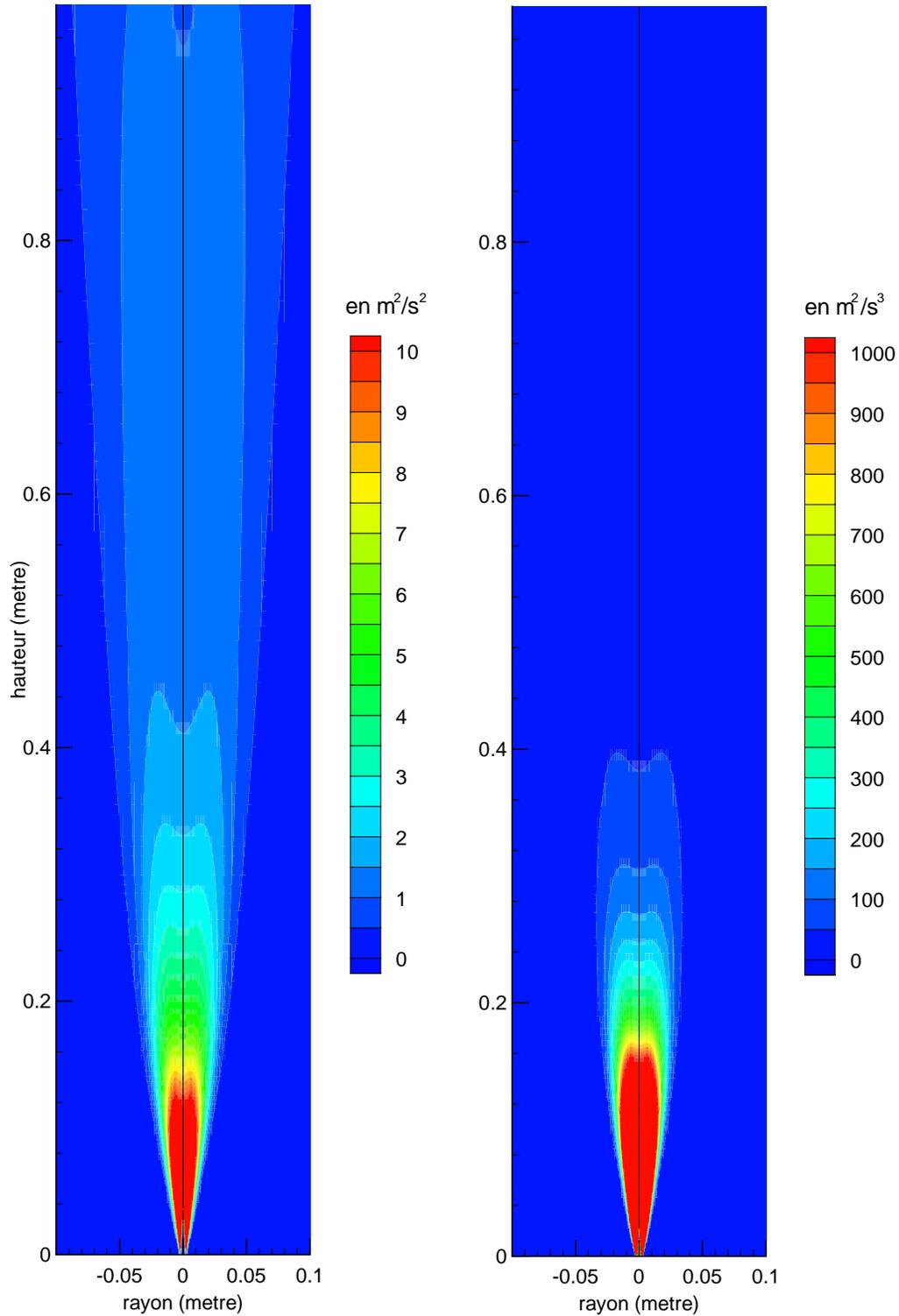


Figure 4.3: Champs d'énergie cinétique turbulente moyenne (à gauche) et de son taux moyen de dissipation (à droite) issus du calcul eulérien ; $\langle k \rangle_{max} \simeq 25 \text{ m}^2/\text{s}^2$ et $\langle \epsilon_k \rangle_{max} \simeq 10^5 \text{ m}^2/\text{s}^3$.

les termes d'échange entre les particules fluides et leur environnement peuvent induire des petits écarts par rapport à la position d'équilibre. Seules les évolutions de la température sont représentées à titre d'exemple, mais on a vérifié que les mêmes remarques peuvent être faites à propos des évolutions des fractions molaires (x_{H_2O} , x_{CO_2} et x_{CO}) en fonction de la richesse. Les courbes d'équilibre retenues pour effectuer les calculs de transferts radiatifs ont été obtenues en moyennant les différentes évolutions des 24000 particules fluides (les évolutions correspondant à des degrés d'avancement différents de 1 ne sont pas prises en compte). Ces courbes d'équilibre sont représentées sur les figures 4.5, 4.6 et 4.7.

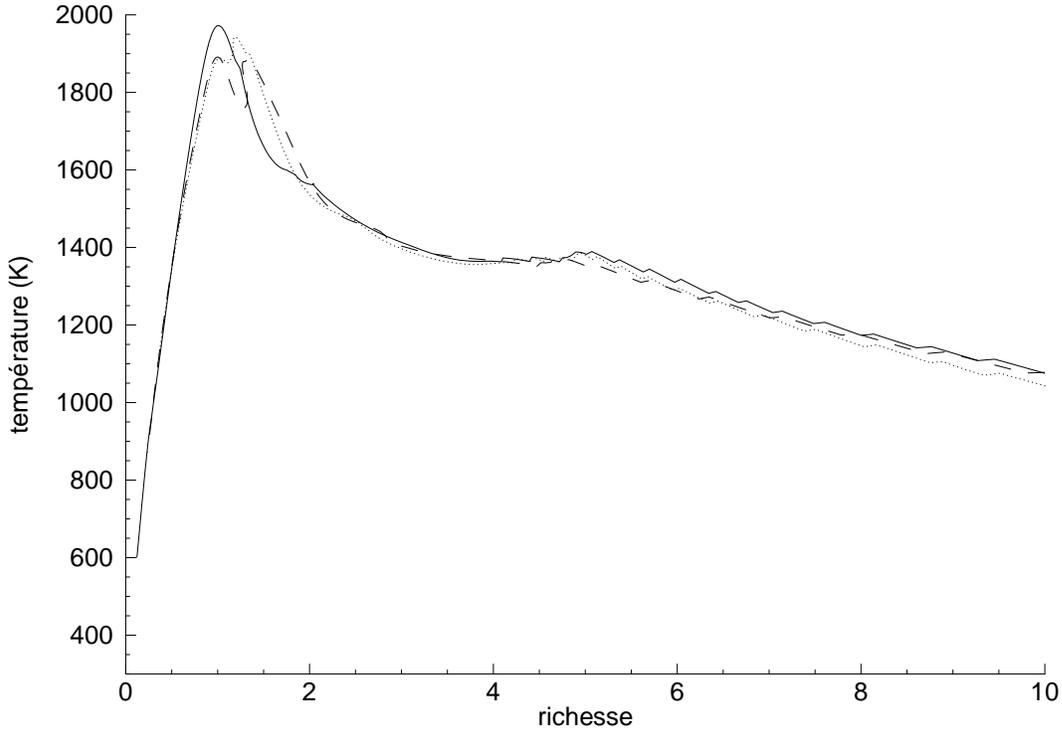


Figure 4.4: *Evolutions en fonction de la richesse des températures de trois particules fluides typiques suivies lors du calcul lagrangien.*

Il n'est pas possible de déterminer une courbe d'équilibre pour les suies. En effet, les évolutions, en fonction de la richesse, de la fraction volumique de suie des particules fluides ont également été observées au cours du calcul lagrangien. Les évolutions de trois de ces particules fluides (les mêmes que celles choisies pour représenter typiquement les évolutions de température) sont représentées sur la figure 4.8. Pour une richesse donnée, la valeur de la fraction volumique de suie varie fortement d'une particule fluide à l'autre. Elle dépend en effet de l'histoire de chaque particule fluide étant donné que les suies résultent de processus chimiques lents au sein de la particule fluide.

Pour résumer, les informations fournies par le modèle de combustion turbulente au code de transferts radiatifs pour effectuer un calcul prenant en compte l'interaction rayonnement/turbulence, sont les suivantes :

- les champs d'énergie cinétique turbulente moyenne $\langle k \rangle$ et de son taux moyen de dissipation $\langle \epsilon_k \rangle$, pour en extraire une échelle intégrale de longueur ;

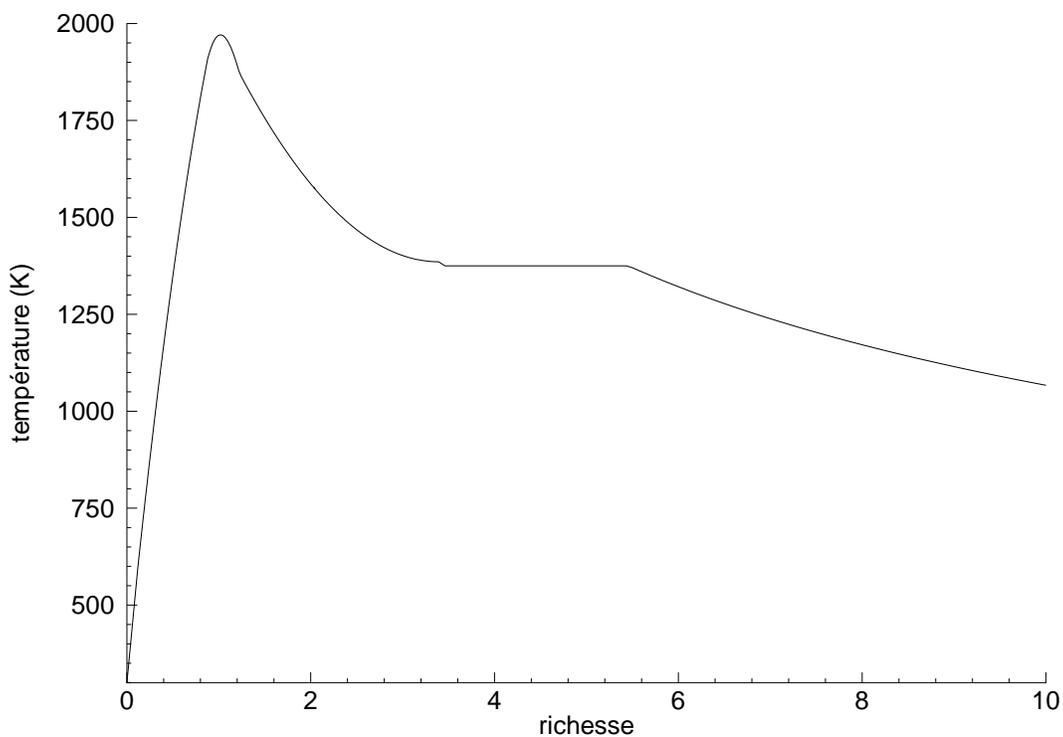
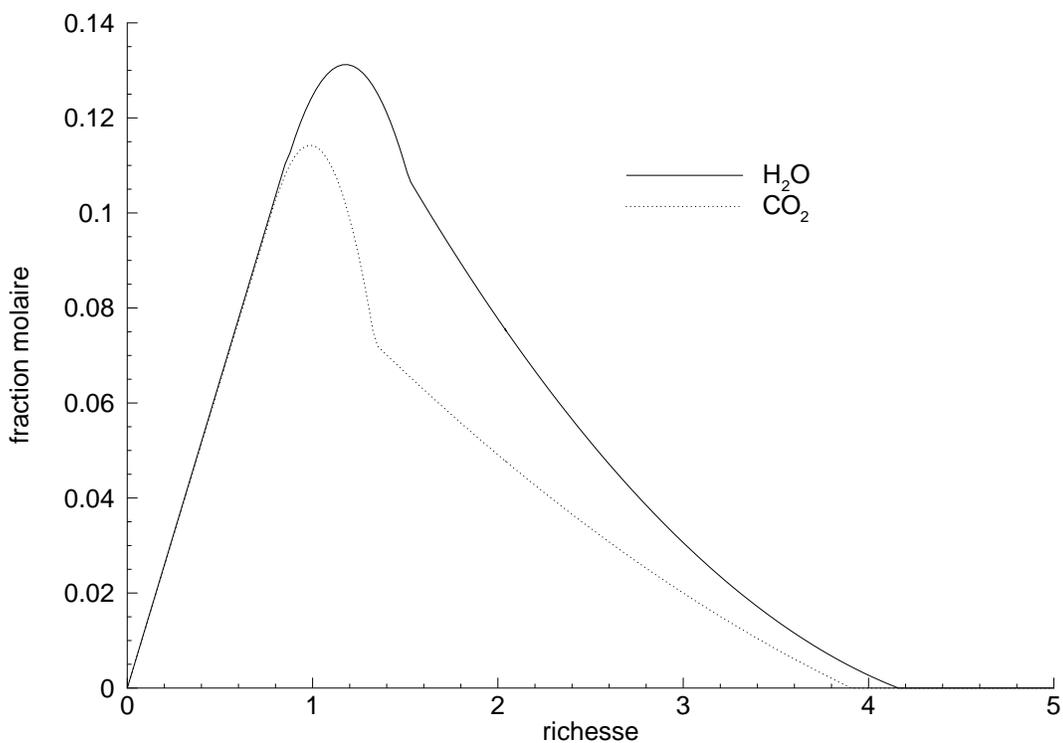


Figure 4.5: Courbe d'équilibre de température retenue.

Figure 4.6: Courbes d'équilibre de fractions molaires d'H₂O et de CO₂ retenues.

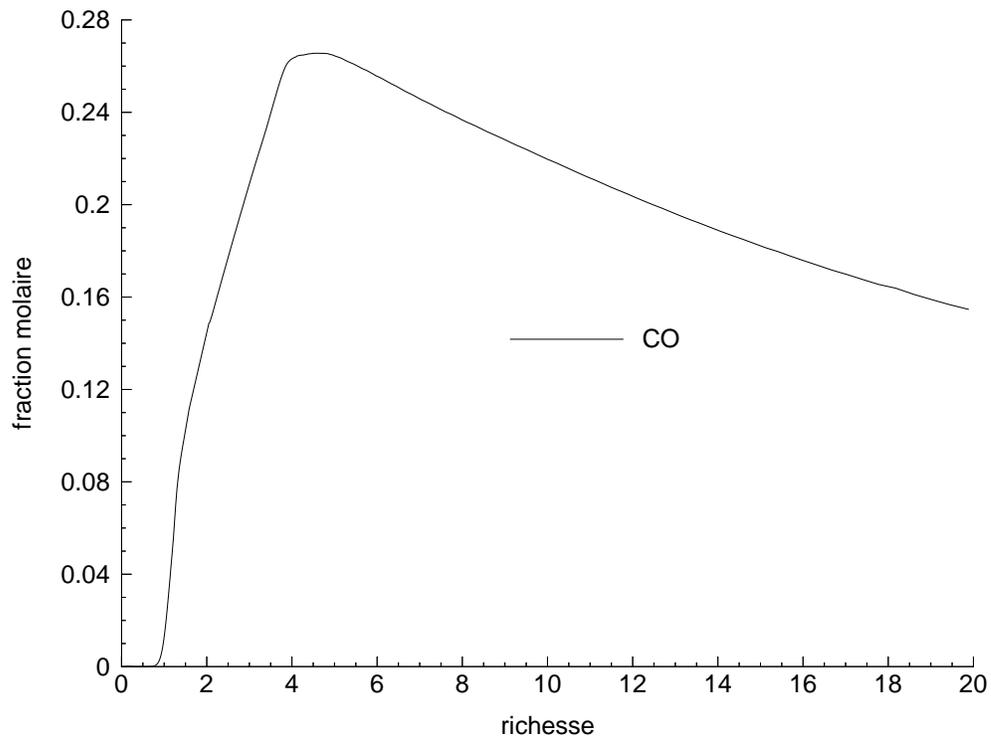


Figure 4.7: Courbe d'équilibre de fraction molaire de CO retenue.

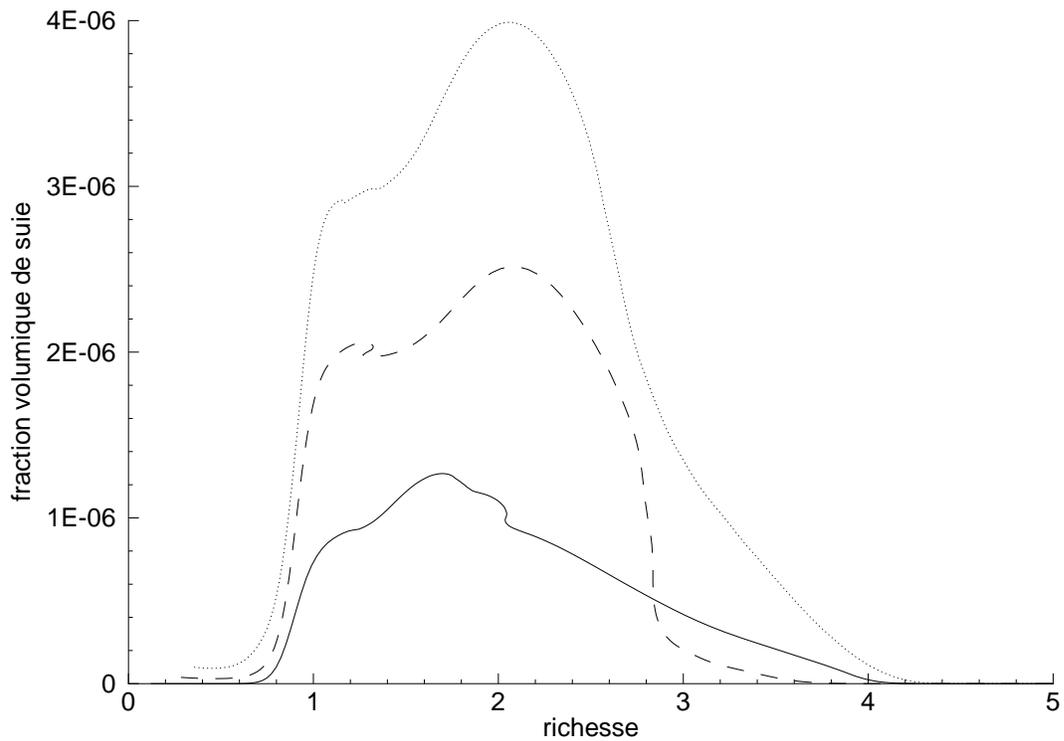


Figure 4.8: Evolutions en fonction de la richesse des fractions volumiques de suie des trois particules fluides dont les évolutions de température sont représentées sur la figure 4.4.

- le champ de probabilité que le degré d’avancement ξ des réactions soit égal à 1 : $\mathcal{P}(\xi = 1)$;
- les courbes d’équilibre $T_{eq}(r)$, $x_{H_2O_{eq}}(r)$, $x_{CO_2_{eq}}(r)$ et $x_{CO_{eq}}(r)$ en fonction de la richesse r ;
- le champ de PDF jointe bidimensionnelle conditionnelle $f_t(r, f_V/\xi = 1)$.

Un calcul de transferts radiatifs ne tenant pas compte de l’interaction rayonnement/turbulence nécessite la connaissance des champs de température moyenne $\langle T \rangle$, de fraction volumique moyenne de suie $\langle f_V \rangle$ et de fractions molaires moyennes $\langle x_i \rangle$ des espèces gazeuses participant aux transferts radiatifs. Ces champs de grandeurs moyennes sont reconstruits à partir de la probabilité $\mathcal{P}(\xi = 1)$, de la PDF jointe bidimensionnelle conditionnelle $f_t(r, f_V/\xi = 1)$ et des courbes d’équilibre, afin de pouvoir comparer les calculs ne prenant pas en compte l’interaction rayonnement/turbulence à ceux qui en tiennent compte. La température et les fractions molaires moyennes sont obtenues par la relation suivante :

$$\langle Y \rangle = \mathcal{P}(\xi = 1) \int_0^{+\infty} Y_{eq}(r) \int_0^1 f_t(r, f_V/\xi = 1) df_V dr. \quad (4.4)$$

La fraction volumique moyenne de suie est donnée par la formule suivante :

$$\langle f_V \rangle = \mathcal{P}(\xi = 1) \int_0^1 f_V \int_0^{+\infty} f_t(r, f_V/\xi = 1) dr df_V. \quad (4.5)$$

Les profils radiaux, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, de certaines des grandeurs moyennes ainsi obtenues sont représentés sur la figure 4.9. Les champs de ces mêmes grandeurs moyennes sont représentés sur les figures 4.10 et 4.11. Il a été vérifié que les champs de température et de fractions molaires moyennes obtenus à partir de l’équation (4.4) étaient proches de ceux issus directement du calcul lagrangien, c’est-à-dire ceux obtenus avec la PDF jointe dépendant de la température et des fractions molaires.

4.2 Modélisation des transferts radiatifs au sein de la flamme

4.2.1 Domaine de calcul, maillage et conditions aux limites choisis

Le maillage utilisé pour faire un calcul de rayonnement est le même que celui utilisé pour le calcul d’aérothermochimie (voir figure 4.1) car on cherche à calculer le terme source radiatif au sein de chaque maille afin de le réintroduire dans l’équation de l’énergie.

Les conditions imposées sur les frontières du domaine (numérotées sur la figure 4.1) pour effectuer le calcul de transferts radiatifs au sein de la flamme sont données dans le tableau 4.2.

Tout rayonnement arrivant sur une facette de type « symétrie » est réfléchi intégralement et spéculairement (ce type de frontière n’émet pas et n’absorbe pas). Une facette de type « orifice » est une surface transparente du point de vue du rayonnement, c’est-à-dire qu’elle n’émet, n’absorbe et ne réfléchit aucun rayonnement. L’émissivité ε_e et la température T_e qui sont associées à ce type de frontière sont celles du milieu situé derrière cette surface à

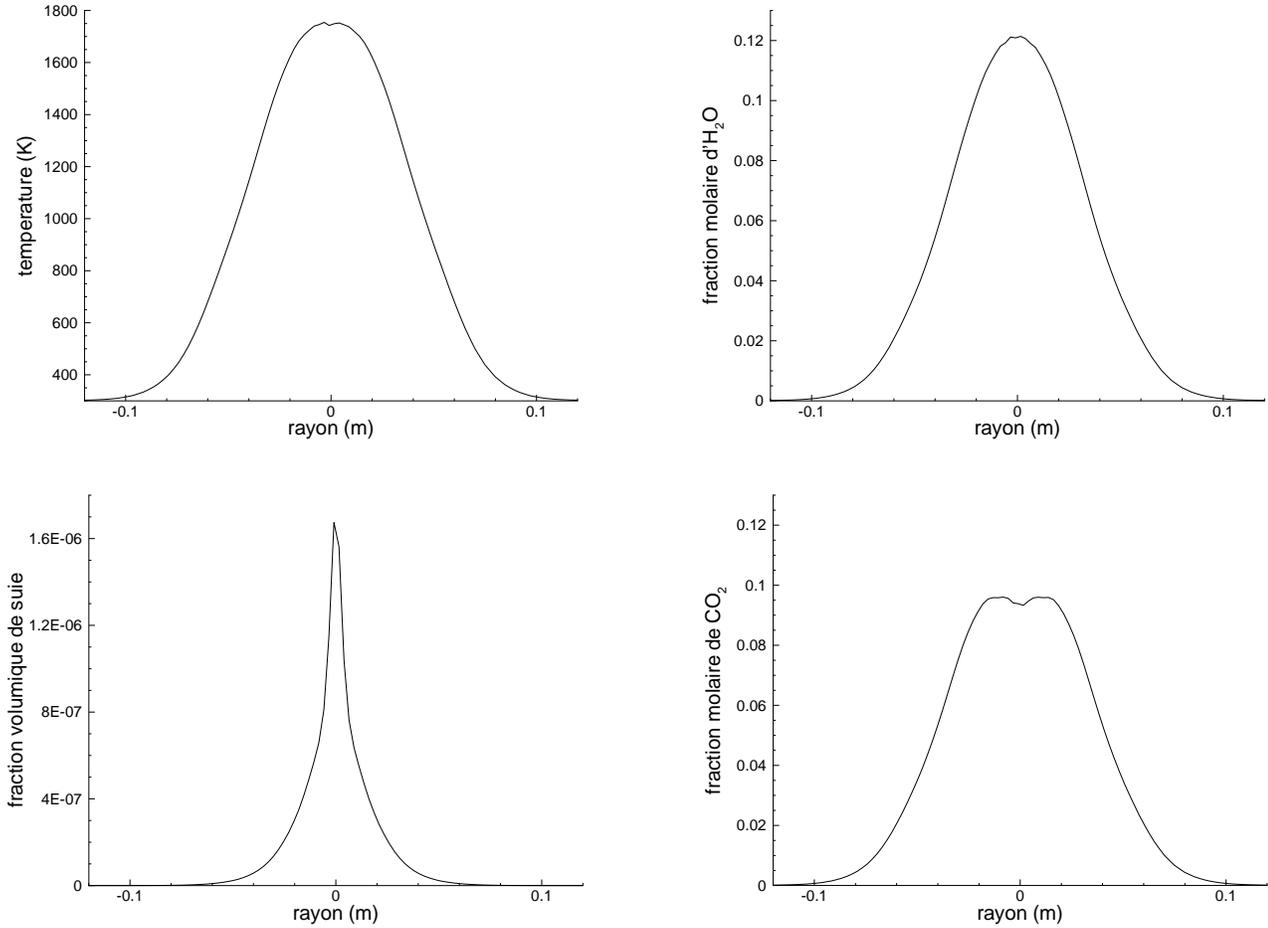


Figure 4.9: Profils radiaux, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, de température moyenne, de fraction volumique moyenne de suie et de fractions molaires moyennes de H_2O et de CO_2 reconstruits à partir de la PDF $f_t(r, f_V)$ obtenue lors de la simulation lagrangienne.

numéro de la frontière	condition imposée sur la frontière	nombre de facettes
2	plan de symétrie ($\varepsilon_{f2} = 0$ et réflexions spéculaires)	18150
4	orifice ($\varepsilon_{e4} = 0$ et $T_{e4} = 320$ K)	4
7	orifice ($\varepsilon_{e7} = 0$ et $T_{e7} = 300$ K)	56
8	orifice ($\varepsilon_{e8} = 0$ et $T_{e8} = 300$ K)	150
9	orifice ($\varepsilon_{e9} = 0$ et T_{e9} varie spatialement)	56
10	orifice ($\varepsilon_{e10} = 0$ et T_{e10} varie spatialement)	4

Tableau 4.2: Conditions imposées sur les frontières du domaine pour effectuer le calcul de transferts radiatifs au sein de la flamme.

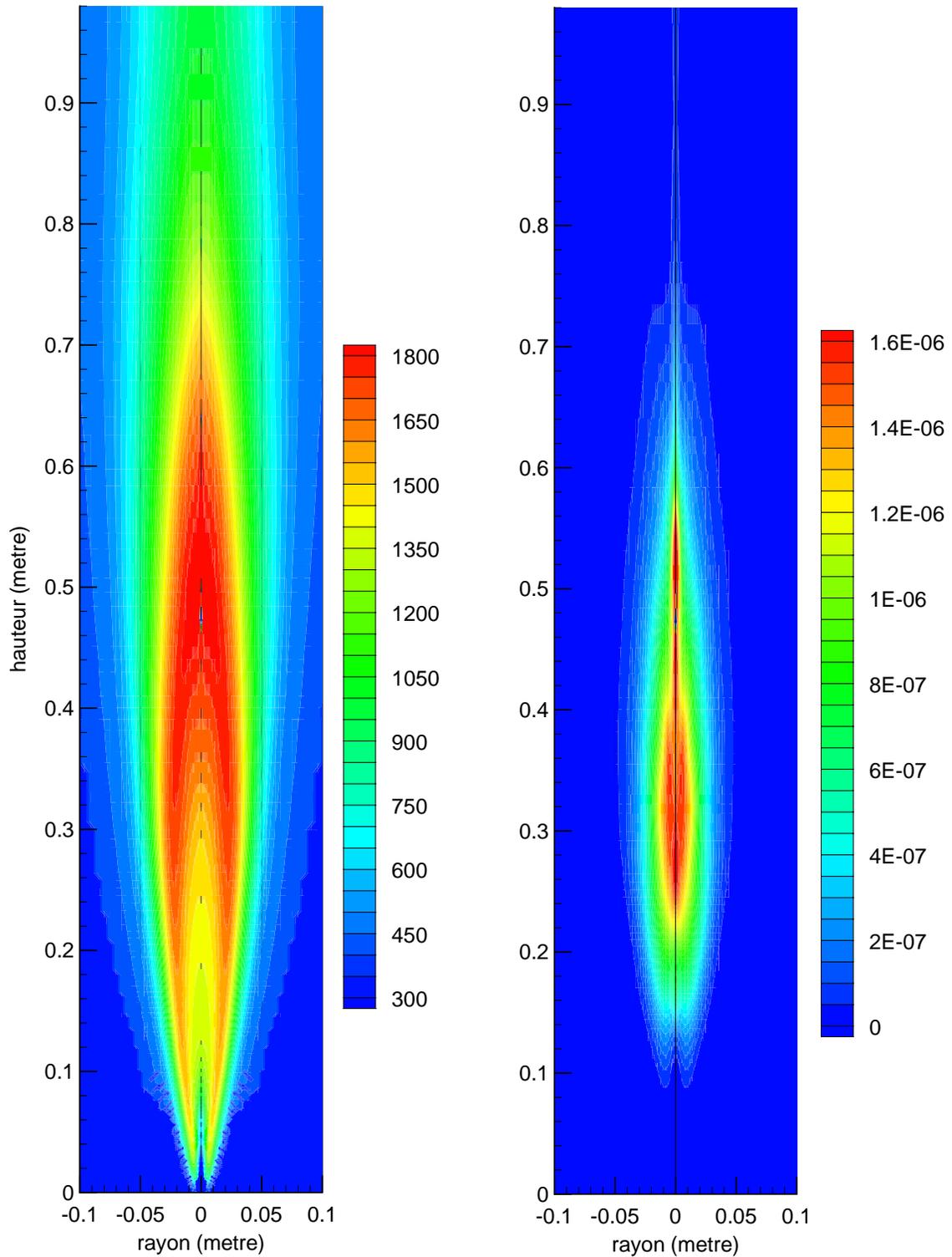


Figure 4.10: Champs de température moyenne (en K, à gauche) et de fraction volumique moyenne de suie (à droite) reconstruits à partir de la PDF $f_t(r, f_V)$ obtenue lors de la simulation lagrangienne; $\langle T \rangle_{max} \simeq 1800$ K et $\langle f_V \rangle_{max} \simeq 1,9$ ppm.

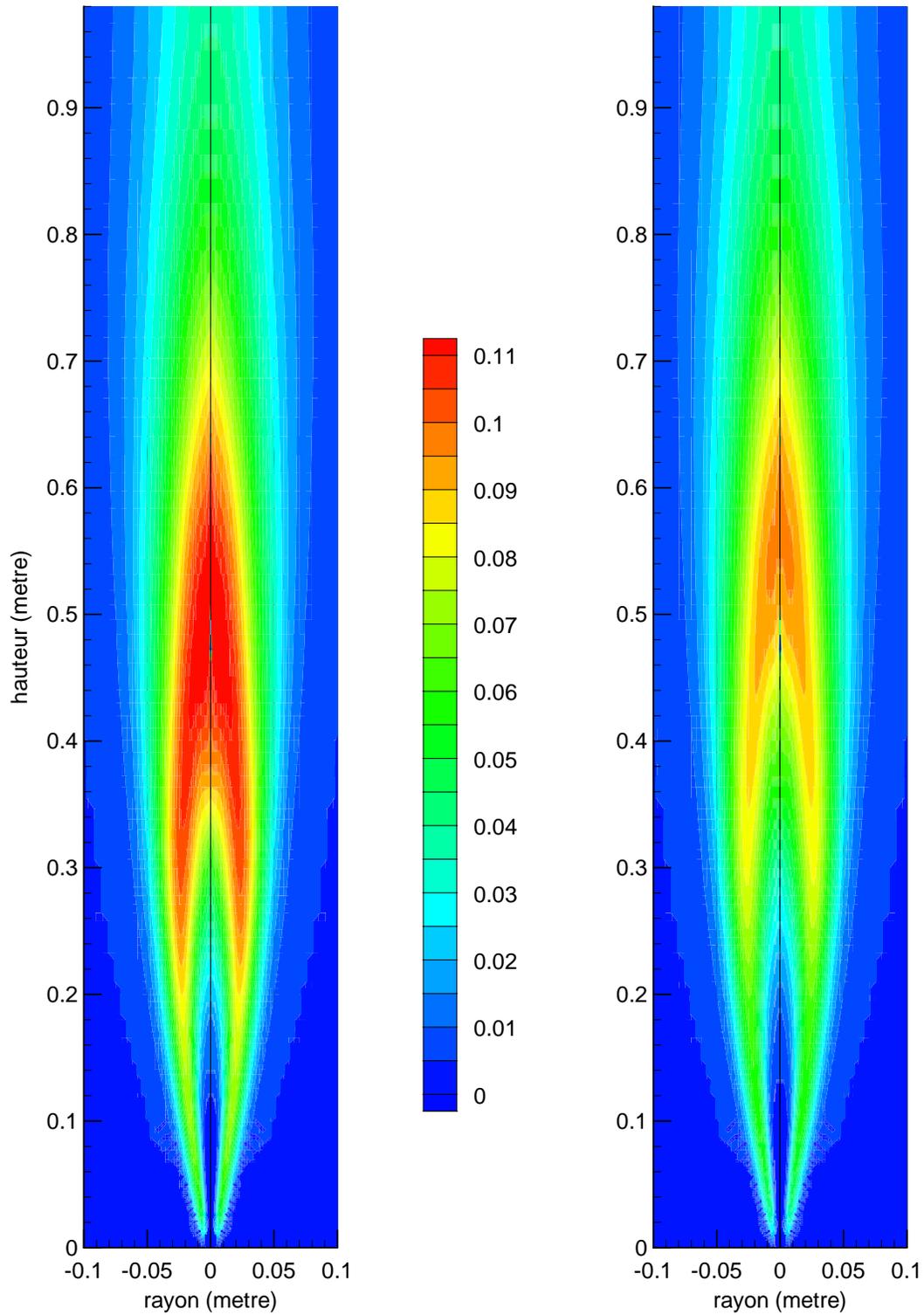


Figure 4.11: Champs de fraction molaire moyenne de H_2O (à gauche) et de CO_2 (à droite) reconstruits à partir de la PDF $f_t(r, f_V)$ obtenue lors de la simulation lagrangienne ; $\langle x_{H_2O} \rangle_{max} \simeq 0,12$ et $\langle x_{CO_2} \rangle_{max} \simeq 0,10$.

l'extérieur du domaine de calcul. Par conséquent, un rayonnement provenant de l'extérieur peut rentrer dans le domaine de calcul par ces frontières, bien que ces dernières n'émettent pas. Le profil de température considéré pour le milieu extérieur situé au-dessus des frontières 9 et 10 est celui présent dans les mailles volumiques voisines de ces deux frontières. Ce profil est représenté sur la figure 4.12.

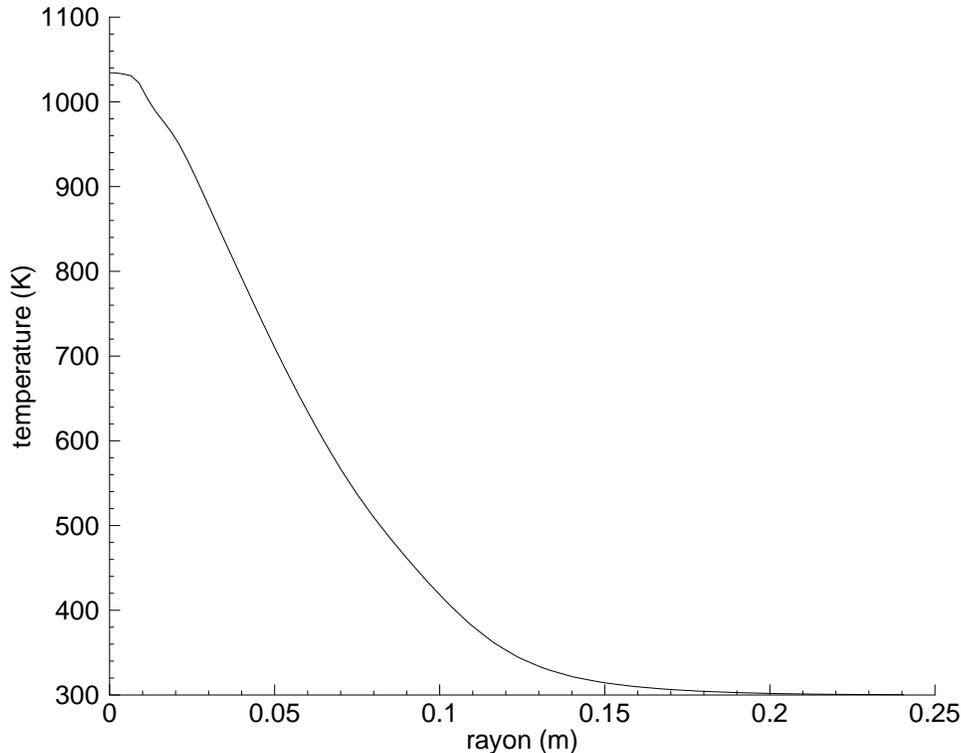


Figure 4.12: Profil de température considéré au sein du milieu extérieur situé au-dessus des frontières ouvertes 9 et 10.

Dans un premier temps, il a été choisi de négliger l'émission du milieu extérieur en affectant des émissivités nulles au milieu extérieur situé derrière chaque frontière de type « orifice ». Cette hypothèse est acceptable pour les frontières 4, 7 et 8 car derrière ces surfaces le milieu extérieur est vraisemblablement constitué d'air et de parois à température ambiante. En revanche, cette hypothèse est peut-être discutable pour les frontières 9 et 10 au-dessus desquelles le milieu extérieur est constitué des gaz chauds de combustion (voir figure 4.12). Cependant, l'aire de ces frontières est très inférieure à l'aire de la surface latérale par laquelle la majorité du rayonnement est évacuée. L'influence de l'émission du milieu extérieur sera discutée dans la section 4.3.2.

4.2.2 Modélisation des propriétés radiatives et discrétisation spectrale

Les gaz absorbants sont traités par la méthode CK (voir section 1.2) qui, dans le cas d'un mélange de gaz absorbants dans la même bande spectrale, revient à utiliser un coefficient

d'absorption pour ce mélange (voir l'« appendix » à la fin de la publication qui constitue le chapitre 2). Nous utiliserons donc dans la suite la notion de coefficient d'absorption. Les gaz absorbants et les particules de suie apportent deux contributions indépendantes au coefficient d'absorption du milieu. Celui-ci s'exprime donc de la façon suivante :

$$\kappa_\nu(r, f_V) = \kappa_\nu^{gaz}(r) + \kappa_\nu^{sui}(f_V). \quad (4.6)$$

Le coefficient d'absorption des particules de suie est donné par la relation suivante (voir section 1.3.3) :

$$\kappa_\nu^{sui} = 5,5\nu f_V. \quad (4.7)$$

Les paramètres du modèle CK, utilisé pour calculer le coefficient d'absorption du mélange de gaz absorbants, sont tabulés en fonction de la température et de la fraction molaire de vapeur d'eau [30, 183]. Ce modèle est valable à pression atmosphérique et pour des températures comprises entre 300 et 2500 K. Pour le calcul des transferts radiatifs au sein de la flamme, le monoxyde de carbone n'est pas pris en compte car les paramètres CK pour ce gaz n'existent pas pour l'instant. De toute façon, la contribution de cette espèce aux transferts radiatifs est en général faible.

Le domaine spectral considéré s'étend de 150 cm^{-1} à 20000 cm^{-1} , c'est-à-dire de $0,5 \mu\text{m}$ à $66,7 \mu\text{m}$. Sur cet intervalle, on distingue deux sous-domaines. Le premier, sur lequel le rayonnement des gaz et des suies est pris en compte, s'étend de 150 cm^{-1} à 9200 cm^{-1} , c'est-à-dire de $1,09 \mu\text{m}$ à $66,7 \mu\text{m}$. La discrétisation spectrale considérée sur cet intervalle est celle du modèle CK utilisé. Ce sous-domaine est divisé en 44 bandes spectrales dont la largeur varie de 50 cm^{-1} à 400 cm^{-1} (la largeur augmente avec le nombre d'onde). La vapeur d'eau et les suies sont présentes sur toutes les bandes alors que le dioxyde de carbone n'est présent que sur 17 de ces bandes. Ces bandes sont subdivisées en 1022 points spectraux ($1022 = 17 \times n^a + (44 - 17) \times n$ avec $n = 7$ et $a = 2$; n correspond au nombre de points de la quadrature de Gauss et l'exposant a au nombre de gaz présents sur les 17 bandes). Le second, sur lequel seul le rayonnement des suies est pris en compte, s'étend de 9200 cm^{-1} à 20000 cm^{-1} , c'est-à-dire de $0,5 \mu\text{m}$ à $1,09 \mu\text{m}$. Cet intervalle est divisé en 27 bandes spectrales de largeur égale à 400 cm^{-1} . Par conséquent, 1049 points spectraux, répartis non uniformément sur 71 bandes spectrales, sont considérés.

4.2.3 Prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence

La modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence décrite dans cette partie suppose qu'un rayonnement ne peut pas changer de direction par diffusion ou par réflexion sur une paroi « réelle » (par opposition à une paroi « fictive », comme un plan de symétrie, ne servant qu'à limiter le domaine de calcul). En d'autres termes, on suppose qu'un chemin optique ne peut pas passer plusieurs fois en un point donné du domaine « réel »⁴. En effet, la propagation du rayonnement pouvant être considérée comme instantanée par rapport au temps caractéristique de la turbulence, si un chemin optique passait plusieurs fois en un point, il faudrait que ce dernier soit caractérisé par les mêmes propriétés thermophysiques quelque soit le passage du chemin optique en ce point, ce qui n'est pas le cas dans la modélisation proposée ci-dessous. Pour un milieu diffusif ou contenant des parois « réelles » non noires, il serait nécessaire de

générer des champs thermophysiques instantanés pour chaque chemin optique (mais ce serait alors la présence de plan de symétrie qui poserait problème).

La modélisation de la turbulence utilisée pour simuler l'interaction rayonnement/turbulence est décrite dans la première sous-section. Dans les deux sous-sections suivantes, seules les modifications apportées à l'algorithme Monte Carlo pour traiter l'interaction rayonnement/turbulence sont détaillées. L'ensemble de l'algorithme est rappelé de façon succincte afin d'éclaircir l'exposé, mais pour plus de détails le lecteur pourra se reporter au chapitre 2 et aux annexes situées à la fin de ce mémoire.

4.2.3.1 Modélisation de la turbulence

Pour modéliser l'interaction entre le rayonnement et la turbulence, une description simplifiée de la turbulence a été retenue. On suppose que la turbulence est isotrope (les propriétés statistiques de la turbulence sont invariantes par rotation). Cela entraîne que la turbulence est également homogène (les propriétés statistiques de la turbulence sont indépendantes de la position).

La fonction d'autocorrélation spatiale d'une des composantes du vecteur vitesse est définie par :

$$C(\zeta) = \frac{\langle u'(x)u'(x + \zeta) \rangle}{\langle u'^2(x) \rangle}, \quad (4.8)$$

où $u'(x)$ désigne la partie fluctuante de cette composante ($u = \langle u \rangle + u'$). Dans notre approche simplifiée, cette fonction d'autocorrélation spatiale est supposée égale à 1 sur une longueur Λ , appelée échelle intégrale de la turbulence (ou macro-échelle de Taylor) et égale à 0 au-delà de cette distance (voir figure 4.13). Cela signifie que la fluctuation de vitesse $u'(x)$ est parfaitement corrélée avec elle-même, c'est-à-dire constante, sur la longueur Λ et totalement décorrélée d'elle-même au-delà. L'échelle de longueur intégrale de la turbulence Λ , qui représente une dimension caractéristique des structures turbulentes cohérentes, est définie par :

$$\Lambda = \int_0^{+\infty} C(\zeta) d\zeta. \quad (4.9)$$

Λ est donc égale à l'aire sous la courbe $C(\zeta)$ et peut être interprétée comme une longueur de corrélation moyenne ou la distance maximale sur laquelle la fluctuation de vitesse est parfaitement corrélée.

Un écoulement turbulent contient des structures turbulentes de tailles très variées. L'écoulement moyen cède de l'énergie aux grosses structures qui en cèdent aux plus petites qui dissipent l'énergie sous forme de chaleur par effet de la viscosité moléculaire (cascade de l'énergie de Kolmogorov). La représentation de la densité spectrale d'énergie montre que les structures énergétiques font partie des plus grosses structures rencontrées dans l'écoulement [201].

4. Le cas de la flamme traitée ici rentre dans le cadre de cette hypothèse car le domaine de calcul (le secteur de cylindre de 5°) ne comporte que des plans de symétrie. Par conséquent, les multiples passages d'un chemin optique dans une maille, après réflexions sur les plans de symétrie, représentent la propagation du rayonnement dans le domaine « réel » (le cylindre entier). Les propriétés thermophysiques d'une maille doivent donc varier suivant les passages du chemin optique dans cette maille, afin de simuler la traversée du domaine « réel » par le chemin optique.

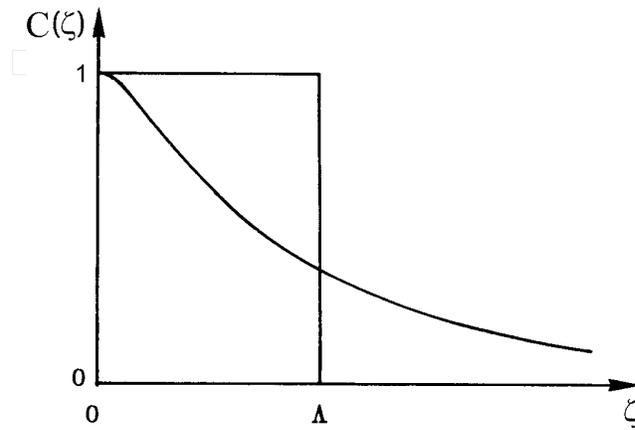


Figure 4.13: Définition de l'échelle de longueur intégrale Λ de la turbulence.

Les petites structures, appelées structures dissipatives, sont caractérisées par une échelle de longueur $\eta = (\nu_m^3/\epsilon_k)^{1/4}$ où ν_m est la viscosité moléculaire (en m^2/s). Le temps caractéristique des petites structures est très petit devant celui des structures énergétiques (hypothèse d'équilibre universel de Kolmogorov), si bien que le taux de dissipation ϵ_k ne dépend que des caractéristiques des structures énergétiques puisqu'il est sensiblement égal au flux d'énergie allant des structures énergétiques aux plus petites. On en déduit l'expression de l'échelle de longueur l_e caractéristique des structures énergétiques :

$$l_e \propto \frac{k^{3/2}}{\epsilon_k}. \quad (4.10)$$

En s'appuyant sur la formulation du modèle $k-\epsilon_k$, l'expression de cette échelle de longueur devient⁵ :

$$l_e = C_\mu^{3/4} \frac{\langle k \rangle^{3/2}}{\langle \epsilon_k \rangle}, \quad (4.11)$$

où C_μ est une constante sans dimension du modèle égale à 0,09. On considère en général que l'échelle de longueur intégrale de la turbulence Λ est égale à l'échelle de longueur l_e caractéristique des structures énergétiques (grosses structures), soit :

$$\Lambda = l_e = C_\mu^{3/4} \frac{\langle k \rangle^{3/2}}{\langle \epsilon_k \rangle}. \quad (4.12)$$

Nous supposons que cette expression de l'échelle intégrale, valable pour la vitesse, est transposable à la température et aux différentes concentrations, ce qui n'est pas exact surtout dans un écoulement réactif. Cependant, le modèle d'interaction rayonnement/turbulence présenté dans les deux sous-sections qui suivent resterait valable avec une modélisation plus sophistiquée de la turbulence. En particulier, il serait possible de tenir compte d'une échelle intégrale différente pour chaque grandeur thermophysique ou de tirer au sort la valeur de l'échelle intégrale afin de simuler la fonction $C(\zeta)$ par une exponentielle décroissante et non plus par un échelon.

5. Cette expression peut s'obtenir en injectant la formule de la viscosité turbulente $\nu_t = C_\mu \langle k \rangle^2 / \langle \epsilon_k \rangle$, définie dans ce modèle, dans celle de l'échelle de longueur η des petites structures

Dans la modélisation retenue de l'interaction rayonnement/turbulence, un chemin optique est découpé en une succession de structures turbulentes cohérentes (appelées « tourbillons » par la suite pour alléger l'écriture), de longueur ℓ_t , supposées homogènes et isothermes. La taille ℓ_t de ces tourbillons est considérée égale à l'échelle de longueur intégrale Λ donnée par l'équation (4.12). L'influence de la valeur de ℓ_t sur les résultats obtenus avec notre modèle est discutée dans la section 4.3.3.

4.2.3.2 Traitement de l'émission

Lorsque l'interaction rayonnement/turbulence est prise en compte la puissance moyenne totale (en W) émise radiativement (sans tenir compte de l'autoabsorption) par chaque maille volumique i s'exprime de la façon suivante :

$$\langle P_i^e \rangle = 4\pi V_i \mathcal{P}_i(\xi = 1) \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^1 \kappa_\nu(r, f_V) L_\nu^0(r) f_{li}(r, f_V/\xi = 1) df_V dr d\nu, \quad (4.13)$$

où V_i désigne le volume (en m^3) de la maille i et $L_\nu^0(r)$ la luminance monochromatique isotrope du rayonnement d'équilibre (en $\text{W}/\text{m}^2/\text{Sr}/\text{m}^{-1}$). L'utilisation du modèle CK pour le calcul de cette puissance est décrite dans l'« appendix » à la fin du chapitre 2. Il n'a pas été introduit de fluctuations turbulentes de température et d'émissivité sur les mailles surfaciques de la frontière. La puissance émise par ces frontières est donc obtenue en utilisant les équations (2.9b) et (2.9c).

Les N chemins optiques à construire sont répartis dans les mailles proportionnellement à la puissance totale émise par ces dernières (technique NUD) ou uniformément (technique UD). Ensuite, l'ensemble des mailles volumiques et surfaciques est balayé et, pour chaque maille, tous les chemins optiques affectés à cette maille sont construits successivement. Ces procédures sont identiques à celles mises en œuvre lorsque l'interaction rayonnement/turbulence n'est pas prise en compte. Cependant, dans le cas présent, les puissances associées au sens direct des chemins optiques issus d'une même maille volumique varient d'un chemin optique à l'autre pour modéliser les fluctuations statistiques⁶ de la puissance émise par une maille volumique.

La procédure (décrite ci-dessous) de calcul de la puissance véhiculée dans le sens direct par un chemin optique repose sur deux hypothèses. Premièrement, la maille volumique i est supposée homogène et isotherme lors de l'émission d'un chemin optique. Cela implique que la taille des tourbillons ℓ_t doit nécessairement être supérieure ou égale à la distance l_1 parcourue par ce chemin optique dans la maille i d'où il est issu, soit :

$$\ell_t \geq l_1. \quad (4.14)$$

Lorsque ℓ_t est égale à l'échelle intégrale Λ , l'ordre de grandeur de ℓ_t est typiquement de deux ou trois mailles. Deuxièmement, le nombre d'onde ν est supposé statistiquement indépendant des grandeurs r , f_V et ξ (cette hypothèse permet de réduire le volume de calcul car il n'est alors pas nécessaire de calculer les probabilités de tous les points spectraux pour chaque chemin optique mais uniquement pour chaque maille).

6. Les fluctuations temporelles sont remplacées par des fluctuations statistiques : c'est l'hypothèse d'ergodicité.

Supposons que N_i chemins optiques doivent être construits depuis la maille volumique i . Tout d'abord, N_i couples (r_n, f_{Vn}) fixant les propriétés thermo-chimiques du milieu sont tirés au sort à l'aide de la PDF $f_{ti}(r, f_V/\xi = 1)$. C'est-à-dire qu'au $n^{\text{ème}}$ chemin optique qui sera construit depuis la maille volumique i est associé un état thermo-chimique caractérisé par les grandeurs thermo-chimiques $T_{eq}(r_n)$, $x_{H_2O_{eq}}(r_n)$, $x_{CO_2_{eq}}(r_n)$ et f_{Vn} . Pour chaque état thermo-chimique n , la puissance totale émise radiativement P_{in}^e est calculée de la façon suivante :

$$P_{in}^e = 4\pi V_i \int_0^{+\infty} \kappa_\nu(r_n, f_{Vn}) L_\nu^0(T_{eq}(r_n)) d\nu. \quad (4.15)$$

La puissance P_{in}^v véhiculée dans le sens direct par le $n^{\text{ème}}$ chemin optique issu de la maille volumique i est alors donnée par la relation :

$$P_{in}^v = \frac{P_{in}^e}{N_i} \langle P_i^e \rangle. \quad (4.16)$$

$$\sum_{k=1} P_{ik}^e$$

De cette façon, la puissance totale émise par la maille volumique i est bien égale à la puissance $\langle P_i^e \rangle$ calculée précédemment. La puissance totale émise est contrôlée car c'est une grandeur importante pour obtenir les bons niveaux de pertes radiatives totales. Les mêmes précautions ne sont pas prises pour la direction et le nombre d'onde car on ne cherche pas à obtenir très précisément des grandeurs radiatives spectrales et directionnelles. La répartition spectrale et directionnelle de la puissance est effectuée lors du tirage au sort d'un nombre d'onde et d'une direction, avant le démarrage de la construction de chaque chemin optique. Pour une maille volumique i , le nombre d'onde ν_n du $n^{\text{ème}}$ chemin optique est tiré au sort suivant la relation :

$$R = \frac{4\pi V_i \mathcal{P}_i(\xi = 1) \int_0^{\nu_n} \int_0^{+\infty} \int_0^1 \kappa_\nu(r, f_V) L_\nu^0(r) f_{ti}(r, f_V/\xi = 1) df_V dr d\nu}{\langle P_i^e \rangle}, \quad (4.17)$$

où R désigne un nombre aléatoire tiré uniformément dans l'intervalle $[0; 1]$. En ce qui concerne les mailles surfaciques, la loi de tirage au sort du nombre d'onde est inchangée (voir équations (2.23), (2.9a) et (2.9b)). Les formules (2.24) et (2.25) restent également valables pour le tirage des directions. Le point de départ (dans le sens direct) du $n^{\text{ème}}$ chemin optique est tiré au sort uniquement si la maille volumique i est non-optiquement mince pour les conditions tirées au sort pour ce chemin optique, c'est-à-dire si :

$$\kappa_{\nu_n}(r_n, f_{Vn}) \sqrt[3]{V_i} \geq 0,1. \quad (4.18)$$

Dans le cas contraire, le point de départ du $n^{\text{ème}}$ chemin optique est le centre de la maille i . Dans le cas de l'émission depuis une maille surfacique, le point est tiré au sort (ou non) en tenant compte de l'épaisseur optique fluctuante de la maille voisine.

4.2.3.3 Traitement de l'absorption

Lorsque l'interaction rayonnement/turbulence n'est pas prise en compte, un chemin optique traverse des mailles homogènes et isothermes qui sont toujours caractérisées par le même

coefficient d'absorption quel que soit le chemin optique qui les traverse. Lorsque l'on tient compte de l'interaction rayonnement/turbulence avec notre modèle simplifié de turbulence, un chemin optique traverse non plus un ensemble de mailles homogènes et isothermes mais une succession de tourbillons homogènes et isothermes, de longueur ℓ_t . Les frontières entre ces tourbillons ne correspondent pas aux facettes des mailles. Par conséquent, une maille peut être hétérogène et anisotherme spatialement. De plus, les paramètres physiques (r et f_V) qui caractérisent ces tourbillons sont tirés au sort lors de la construction de chaque chemin optique. Une maille n'a donc pas les mêmes propriétés physiques selon les chemins optiques qui la parcourent. Cela est une conséquence de la présence des fluctuations statistiques liées à la turbulence.

Le $n^{\text{ème}}$ chemin optique issu de la maille i traverse un premier tourbillon de longueur ℓ_{ti} caractérisé par les grandeurs thermochimiques $T_{eq}(r_n)$, $x_{H_2Oeq}(r_n)$, $x_{CO_2eq}(r_n)$ et f_{Vn} déterminées précédemment lors du calcul de la puissance associée au chemin optique. L'absorption est calculée de façon déterministe dans chaque maille recouverte par ce tourbillon en tenant compte de ces grandeurs thermochimiques et de la distance parcourue dans chaque maille par le chemin optique.

Lorsque la longueur du chemin optique dépasse la taille du premier tourbillon, le chemin optique pénètre dans un deuxième tourbillon de taille ℓ_{tm} où m est l'indice de la maille dans laquelle la taille du premier tourbillon a été atteinte. Les propriétés thermochimiques de ce nouveau tourbillon sont tirées au sort à l'aide de la probabilité $\mathcal{P}_m(\xi = 1)$ et de la PDF $f_{tm}(r, f_V/\xi = 1)$ de la maille m . Les propriétés thermochimiques de deux tourbillons successifs sont donc totalement décorréliées. L'absorption dans la maille m tient compte des contributions associées aux deux tourbillons. Ce processus est itéré sur l'ensemble du chemin optique.

Pour déterminer les propriétés thermochimiques d'un tourbillon, le degré d'avancement ξ des réactions chimiques est tiré au sort à l'aide de la probabilité $\mathcal{P}(\xi = 1)$. Si le degré d'avancement est égal à 0, cela signifie que la réaction de combustion n'a pas commencé et que le milieu traversé est soit de l'air ambiant, soit du combustible pur. Dans les deux cas, on considère, du point de vue radiatif, que le milieu est totalement transparent et on affecte au tourbillon un coefficient d'absorption nul (afin d'améliorer le modèle, il serait éventuellement possible de tenir compte du degré hygrométrique de l'air et de l'absorption par l'éthylène afin de pouvoir évaluer l'échauffement de celui-ci). En revanche, si le degré d'avancement est égal à 1, ceci signifie que la réaction de combustion est complète et que le milieu traversé est composé des produits de combustion. Il est alors nécessaire de tirer au sort un couple (r, f_V) en utilisant la PDF $f_t(r, f_V/\xi = 1)$. A partir des courbes d'équilibre, on déduit de la richesse les valeurs de la température T et des fractions molaires des gaz absorbants x_{H_2O} et x_{CO_2} . Connaissant la bande spectrale, on dispose alors de toutes les informations nécessaires pour calculer le coefficient d'absorption du mélange « gaz + particules » caractérisant le tourbillon.

4.2.3.4 Hypothèse de décorrélation entre mailles optiquement minces (DMOM)

Une modélisation simplifiée de l'interaction rayonnement/turbulence a été comparée au modèle décrit dans les trois sous-sections précédentes. Le modèle simplifié considéré ici repose sur une hypothèse de décorrélation des fluctuations turbulentes entre les mailles supposées optiquement minces. Chacune des mailles est caractérisée

- pour l'émission, par une puissance totale moyenne turbulente émise égale à celle calculée

par la relation (4.13). Chacun des N_i chemins optiques issus de cette maille véhicule dans le sens direct une puissance égale à $\langle P_i^e \rangle / N_i$. L'émission est de cette façon beaucoup mieux représentée qu'à partir du champ moyen de température.

- pour l'absorption, par un coefficient d'absorption moyen $\langle \kappa_{j\nu} \rangle$, qui n'est pas obtenu à partir des champs moyens mais à partir de la PDF jointe associée à la maille j , soit :

$$\langle \kappa_{j\nu} \rangle = \mathcal{P}_j(\xi = 1) \int_0^{+\infty} \int_0^1 \kappa_\nu(r, f_V) f_{t_j}(r, f_V / \xi = 1) df_V dr. \quad (4.19)$$

Dans ces conditions, l'absorptivité moyenne $\langle \alpha_{j\nu} \rangle$ associée à la distance l_j parcourue dans la maille j par un chemin optique est, dans la limite d'une maille optiquement mince, égale à :

$$\langle \alpha_{j\nu} \rangle = \langle 1 - e^{-\kappa_{j\nu} l_j} \rangle, \quad (4.20a)$$

$$\simeq \langle \kappa_{j\nu} \rangle l_j, \quad (4.20b)$$

$$\simeq 1 - e^{-\langle \kappa_{j\nu} \rangle l_j}. \quad (4.20c)$$

En pratique, c'est la formulation (4.20c) justifiée dans le cas d'une maille optiquement mince qui est utilisée.

Ce modèle ne présente pas d'intérêt particulier en terme de temps de calcul avec une méthode de type Monte Carlo. Il pourrait cependant être utilisé avec une méthode déterministe de résolution de l'ETR, en utilisant par exemple, pour l'émission par chaque maille une température équivalente T_i^* , telle que la puissance émise soit $\langle P_i^e \rangle$.

Sur le plan de la turbulence, ce modèle ne s'appuie pas sur la notion d'échelle intégrale, mais simplement sur des modélisations locales, décorréelées entre mailles, d'effets turbulents moyens. Les résultats sont donc a priori dépendants du maillage choisi.

4.2.4 Principe de réciprocité en milieu turbulent

Le principe de réciprocité peut s'appliquer sans difficulté en milieu turbulent. En gardant les notations de la figure 2.1 mais en supposant que le domaine de calcul ne contient pas de parois « réelles » non noires (voir début de la section 4.2.3), l'équation discrétisée (2.11) devient alors :

$$\langle \widetilde{P_{ij}^{exch}} \rangle = \sum_{n=1}^{N_{ij}} P_{in}^v \left\{ \sum_{c=1}^{N_{pn}} \tau_{\nu_n}(B_{in} F_{jc}) \left\{ \sum_{m=N_{tc}}^{N_{tc}+1} \left[\frac{L_{\nu_n}^0(T_{jm})}{L_{\nu_n}^0(T_{in})} - 1 \right] \tau_{jm\nu_n} \alpha_{jm\nu_n} \right\} \right\}, \quad (4.21)$$

avec

$$\tau_{\nu_n}(B_{in} F_{jc}) = \exp \left[- \sum_{m=1}^{N_{tc}-1} \kappa_{\nu_n}(r_m, f_{Vm}) \ell_{tm} \right] \exp \left[- \kappa_{\nu_n}(r_{N_{tc}}, f_{VN_{tc}}) l_c^* \right] \prod_{h=1}^{N_{rc}} (1 - \varepsilon_{fh\nu_n}), \quad (4.22)$$

et

$$\alpha_{jm\nu_n} = 1 - \exp \left[- \kappa_{j\nu_n}(r_m, f_{Vm}) l_{jm} \right]. \quad (4.23)$$

Dans ces équations, l'indice m porte sur les tourbillons traversés par le chemin optique et N_{tc} désigne l'indice du tourbillon dans lequel le chemin optique pénètre avant de rentrer pour la $c^{\text{ème}}$ fois dans la maille j . La longueur l_c^* représente la distance parcourue dans le $N_{tc}^{\text{ème}}$ tourbillon avant d'atteindre le point F_{jc}^* (point de la $c^{\text{ème}}$ entrée du chemin optique dans la maille j). La limite du $N_{tc}^{\text{ème}}$ tourbillon peut se trouver soit au-delà de la maille j , soit à l'intérieur de la maille j . C'est ce qui justifie la présence dans la formule (4.21) de la somme sur l'indice m variant de N_{tc} à $N_{tc} + 1$. Selon le cas, un des deux termes de la somme peut être nul :

- 1^{er} cas : la limite du $N_{tc}^{\text{ème}}$ tourbillon se trouve au-delà de la maille j ; on a alors les relation suivantes :

pour $m = N_{tc}$, $\tau_{jm\nu_n} = 1$ et $l_{jm} = l_{jc}$ où l_{jc} est la distance parcourue dans la maille j par le chemin optique lors de son $c^{\text{ème}}$ passage ;

pour $m = N_{tc} + 1$, $\alpha_{jm\nu_n} = 0$ car $l_{jm} = 0$;

- 2^{ème} cas : la limite du $N_{tc}^{\text{ème}}$ tourbillon se trouve à l'intérieur de la maille j ; on a alors les relation suivantes :

pour $m = N_{tc}$, $\tau_{jm\nu_n} = 1$ et $l_{jm} = \ell_{tm} - l_c^*$;

pour $m = N_{tc} + 1$, $\tau_{jm\nu_n} = 1 - \alpha_{jN_{tc}\nu_n}$ et $l_{jm} = l_{jc} - l_{jN_{tc}}$.

4.3 Résultats

Les écarts types présentés dans cette section ont été obtenus en subdivisant un calcul utilisant 10^7 chemins optiques en 10 calculs nécessitant chacun la génération aléatoire de 10^6 chemins optiques. Ainsi, en chaque point volumique ou surfacique du maillage, on dispose de 10 valeurs différentes de la puissance radiative volumique ou du flux radiatif surfacique, ce qui permet de calculer une moyenne et un écart type en chaque point. La moyenne obtenue correspond à celle d'un calcul faisant intervenir 10^7 chemins optiques alors que l'écart type est celui d'un calcul mettant en jeu 10^6 chemins optiques. Les écarts types présentés sont donc, en ordre de grandeur, trois fois ($\sqrt{10} \simeq 3$) supérieurs à ceux du calcul réellement réalisé avec 10^7 chemins optiques. Cette loi de décroissance de l'écart type en $1/\sqrt{N}$ a été vérifiée en subdivisant un calcul utilisant 10^7 chemins optiques en 100 calculs faisant intervenir chacun 10^5 chemins optiques. L'écart type ainsi obtenu est trois fois supérieur à celui obtenu en subdivisant en 10 calculs de 10^6 chemins optiques (voir figure 4.18).

Tous les résultats présentés dans cette section ont été obtenus avec un critère de coupure τ_l égal à 0,01.

Les temps de calcul donnés dans cette section ont été obtenus sur un ordinateur parallèle et vectoriel (NEC SX5). Cependant, comme le code ASTRE n'est ni parallélisé ni vectorisé, les performances sont médiocres et les temps de calcul assez longs. Des gains en temps de calcul importants pourront être obtenus en parallélisant et en vectorisant le code.

4.3.1 Comparaison des trois méthodes associées aux deux techniques de répartition

On a tout d'abord cherché à déterminer la méthode la plus adaptée au calcul des transferts radiatifs au sein de la flamme. D'après les conclusions du chapitre 2, la meilleure méthode devrait être la méthode FM-NUD car la flamme est proche du cas 6 défini dans le chapitre 2. Afin de vérifier ces prévisions, deux calculs utilisant chacun une technique de répartition différente (NUD et UD) ont été réalisés (on rappelle que les résultats donnés par les trois méthodes, dites FM, ERM et ARM, sont obtenus avec un seul calcul puisque les différences entre ces méthodes résident uniquement dans le post-traitement des chemins optiques). Les résultats de ces deux calculs, ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence, sont résumés dans le tableau 4.3.

	FM		ERM		ARM	
	NUD	UD	NUD	UD	NUD	UD
puissance émise (W)	93,0	93,0	93,0	93,0	34,3	34,3
puissance absorbée (W)	34,3	34,3	34,3	34,3	34,3	34,3
perte radiative (W)	58,7	58,7	58,7	58,7	0	0
flux sortant (W)	58,7	58,7	0	0	58,7	58,7
temps CPU (seconde)	9170	9030	9170	9030	9170	9030

Tableau 4.3: Comparaison des résultats obtenus avec les trois méthodes associées chacune aux deux techniques de répartition (les deux calculs ont été réalisés avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).

Dans le tableau 4.3, on appelle puissance émise, la puissance totale (sur tout le spectre) émise radiativement (sans tenir compte de l'autoabsorption) par tout le domaine de calcul.

Pour les méthodes FM et ERM, cette grandeur est égale à la somme $\sum_{i=1}^{N_V} P_i^e$ où P_i^e est donnée

soit par les formules (2.7b) et (2.7c), soit par la formule (4.13) lorsque l'interaction rayonnement/turbulence est prise en compte. Les conditions radiatives imposées sur les frontières (émission nulle) rendent la méthode ARM inadaptée au calcul de l'émission de la flamme. En effet, dans cette méthode, la puissance émise est reconstruite statistiquement à l'aide de la puissance absorbée et du principe de réciprocité. Comme la puissance, provenant de l'extérieur, absorbée par la flamme est nulle (puisque la puissance provenant de l'extérieur est nulle), l'émission de la flamme est très sous-estimée. Seule la puissance émise et absorbée par la flamme contribue au calcul de l'émission réciproque de la flamme.

L'absorption est calculée correctement par les trois méthodes. La flamme n'est pas optiquement mince car elle absorbe 37% de la puissance émise. La perte radiative (en valeur absolue) est obtenue en soustrayant la puissance absorbée à la puissance émise. Les valeurs obtenues avec les méthodes FM et ERM sont plus faibles que la valeur de 80 W qui avait été grossièrement estimée (voir section 4.1.3.1). Le tableau 4.3 ne permet pas de discerner quelle méthode (FM ou ERM) et quelle technique de répartition (NUD ou UD) sont les plus adaptées au calcul des puissances radiatives volumiques (c'est-à-dire au calcul de la puissance absorbée, la puissance émise étant calculée analytiquement) car les valeurs présentées dans ce tableau

sont intégrées sur l'ensemble du domaine de calcul. Si on compare localement les quatre solutions, on constate que les puissances radiatives volumiques moyennes sont les mêmes mais que l'écart type varie de façon significative d'une solution à l'autre. Pour les deux méthodes, la technique NUD donne les meilleurs résultats. Cependant, la méthode FM-NUD présente un écart type 2 à 5 fois plus faible que celui de la méthode ERM-NUD (voir figures 4.14, 4.15 et 4.16). La méthode réciproque ERM donne de moins bons résultats que la méthode FM car les principaux échanges radiatifs ont lieu entre deux zones fortement anisothermes : la flamme, chaude et peu absorbante, et le milieu extérieur situé derrière les frontières ouvertes, absorbant et froid. Or, il a été mis en évidence au chapitre 2 que ces conditions sont défavorables aux méthodes réciproques. Les écarts types sont plus élevés près de l'axe car les mailles volumiques sont plus petites et le nombre de chemins optiques impliqués dans les statistiques de ces mailles est plus faible. On peut noter également la forte corrélation entre la puissance radiative moyenne (figure 4.16) et la fraction volumique de suie (figure 4.9).

Dans le tableau 4.3, on appelle flux sortant le flux qui sort du domaine de calcul par les frontières ouvertes. Dans les méthodes réciproques, le flux sortant n'est pas égal à la perte radiative car, avec les conditions aux limites choisies, ces méthodes ne sont pas conservatives. Dans la méthode FM, le flux sortant est égal à la perte radiative car cette méthode est conservative par conception. La méthode ERM donne une valeur nulle pour cette grandeur car on suppose que le gaz extérieur situé derrière les frontières ouvertes n'émet pas ($\varepsilon_e = 0$). Par conséquent, aucun chemin optique n'est construit dans le sens direct depuis les facettes appartenant à ces frontières. Or, dans la méthode ERM, seuls les chemins optiques construits depuis un point servent à évaluer la puissance volumique ou le flux en ce point. La méthode ERM n'est donc pas adaptée au calcul du flux radiatif sortant par les frontières ouvertes, avec les conditions aux limites choisies. En revanche, la méthode ARM donne exactement les mêmes résultats que la méthode FM sur les frontières ouvertes. En effet, ces frontières n'émettent pas et la différence entre les méthodes FM et ARM réside dans le calcul de l'émission.

Comme pour le calcul des puissances radiatives volumiques, la technique NUD donne de meilleurs résultats pour le calcul des flux radiatifs que la technique UD (voir figure 4.17). Sur cette figure, le flux est positif ce qui signifie que c'est un flux sortant du domaine de calcul. Les courbes sont plus fluctuantes et les écarts types sont plus élevés pour les faibles hauteurs que pour les hauteurs importantes car, plus la hauteur est faible, plus les mailles sont petites et plus le nombre de chemins optiques intervenant dans la statistique de ces mailles est faible. Enfin, les écarts types sont d'une façon générale assez bruités car ils n'ont été estimés qu'avec 10 calculs indépendants.

On a vérifié que l'algorithme Monte Carlo converge correctement (décroissance de l'écart type en $1/\sqrt{N}$) en réalisant un calcul, avec 10^7 chemins optiques et la technique NUD, subdivisé en 100 calculs de 10^5 chemins optiques. Les résultats obtenus pour le flux radiatif sur la frontière ouverte verticale sont comparés à ceux obtenus précédemment sur la figure 4.18. L'écart type obtenu avec 10^5 chemins optiques est environ trois fois supérieur ($\sqrt{10} \simeq 3$) à celui obtenu avec 10^6 chemins optiques.

Il ressort de ces calculs que la méthode la plus adaptée au calcul des transferts radiatifs au sein de la flamme, aussi bien pour le calcul des puissances radiatives volumiques que pour celui des flux radiatifs surfaciques, est la méthode FM-NUD (cette conclusion est en accord avec celle obtenue dans le chapitre 2 dans le cas spectral 6). Pour cette raison, tous les résultats présentés dans la suite de ce mémoire ont été obtenus avec la méthode FM-NUD.

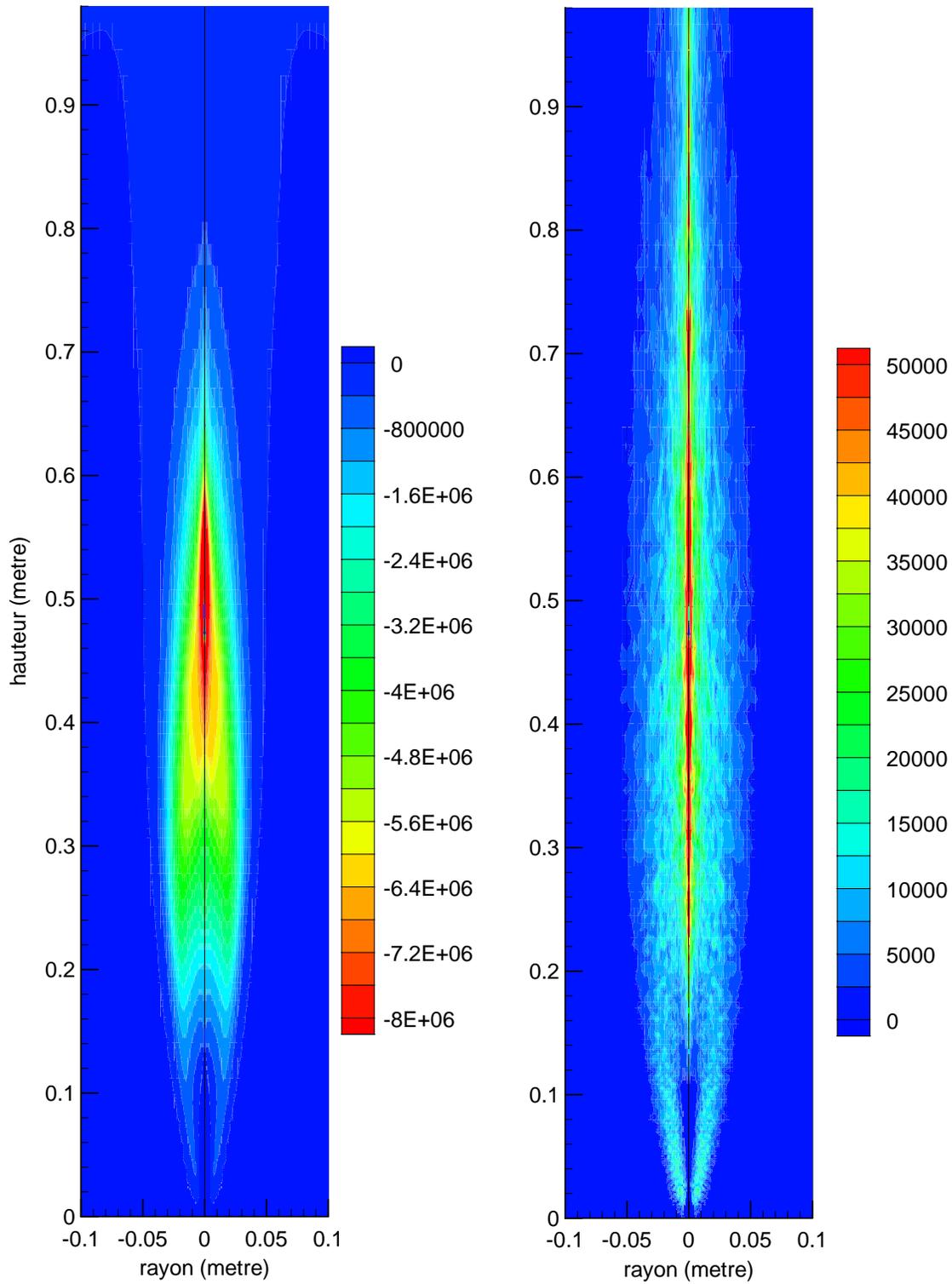


Figure 4.14: Champs de puissance radiative volumique moyenne (en W/m^3 , à gauche) et de l'écart type correspondant (en W/m^3 , à droite), obtenus avec la méthode FM-NUD (calcul réalisé avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).

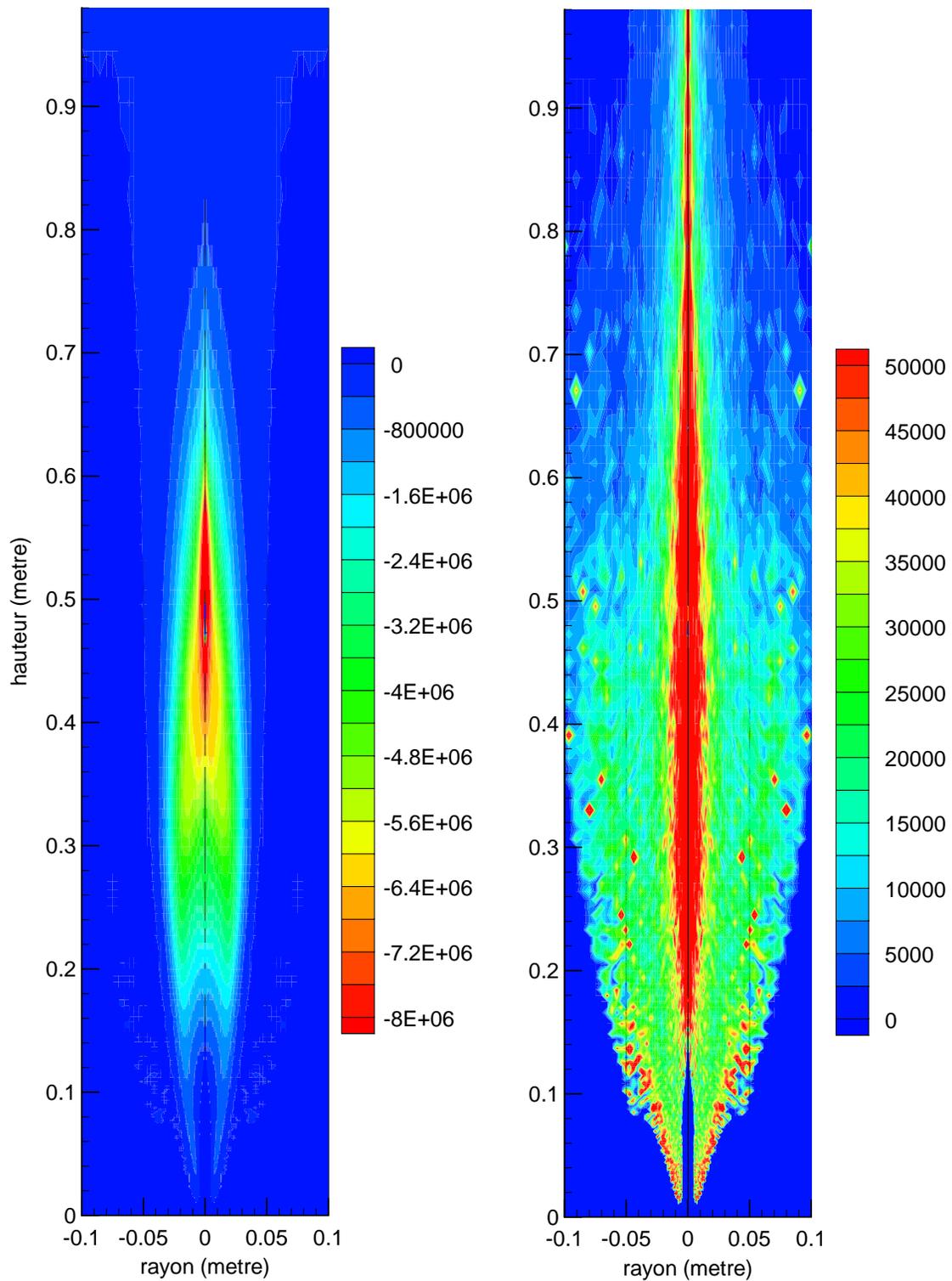


Figure 4.15: Champs de puissance radiative volumique moyenne (en W/m^3 , à gauche) et de l'écart type correspondant (en W/m^3 , à droite), obtenus avec la méthode ERM-NUD (calcul réalisé avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).

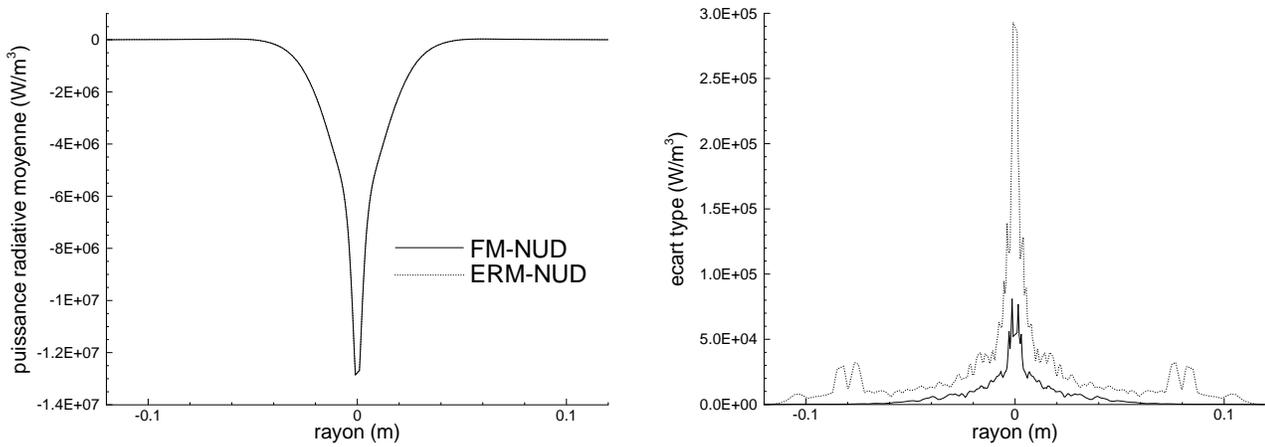


Figure 4.16: *Profils radiaux, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, de la puissance radiative volumique moyenne et de l'écart type correspondant, obtenus avec les deux méthodes donnant les meilleurs résultats (calcul réalisé avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).*

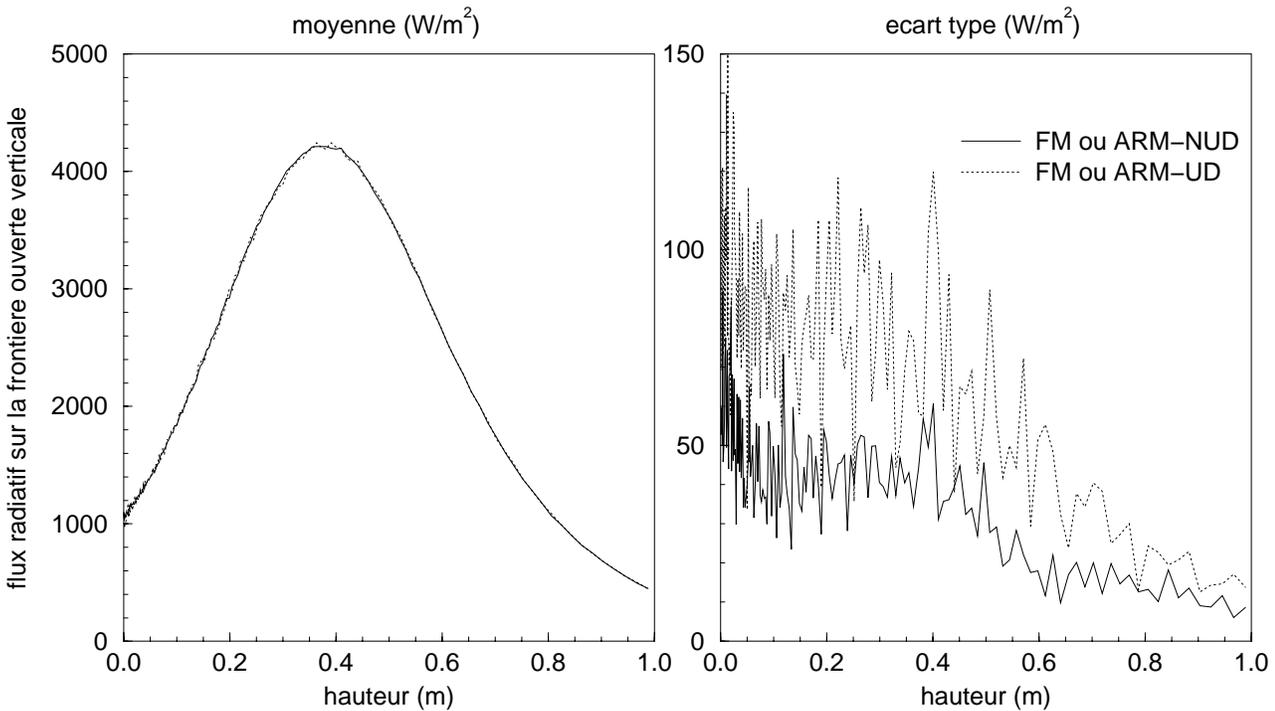


Figure 4.17: *Flux surfacique moyen, sortant par la frontière ouverte verticale, et écart type correspondant, obtenus avec les différentes méthodes (calculs réalisés avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).*

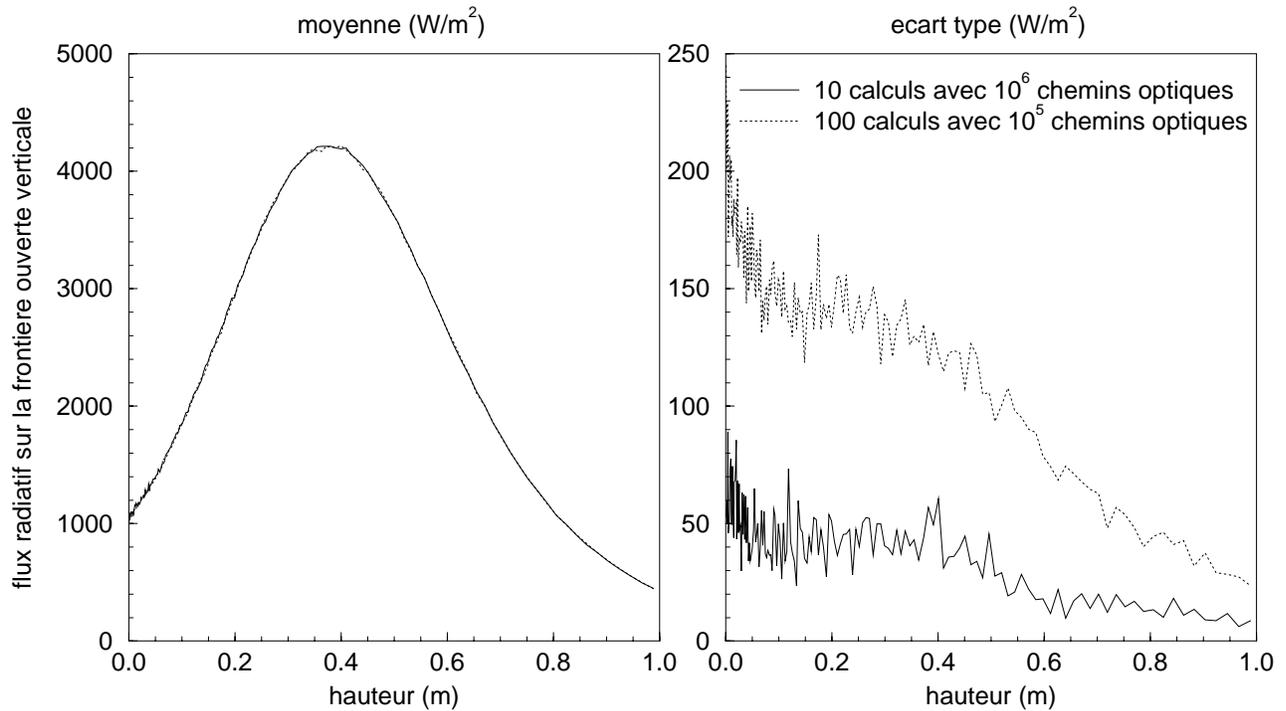


Figure 4.18: Convergence du flux surfacique sortant par la frontière ouverte verticale (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).

4.3.2 Influence de l'émission du milieu extérieur

Plusieurs calculs, ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence, ont été réalisés en faisant varier l'émissivité des milieux extérieurs situés derrière les différentes frontières ouvertes. L'émissivité affectée à chaque milieu extérieur est la même pour chaque frontière ouverte (frontières 4, 7, 8, 9 et 10 sur la figure 4.1) et est égale à ε_e . Les températures des milieux extérieurs situés derrière les frontières 4, 7 et 8 sont données dans le tableau 4.2. Le profil de température au sein du milieu extérieur situé au-dessus des frontières 9 et 10 est représenté sur la figure 4.12. Les résultats globaux obtenus lors de ces calculs sont présentés dans le tableau 4.4.

	puissance émise (W)	flux en- trant (W)	puissance absorbée (W)	flux sor- tant (W)	perte radiative (W)	temps CPU (s)
$\varepsilon_e = 0$	93,0	0	34,3	58,7	58,7	9170
$\varepsilon_e = 0,5$	93,0	8,6	34,6	66,9	58,4	9140
$\varepsilon_e = 1$	93,0	17,1	34,8	75,2	58,2	9080

Tableau 4.4: Influence de l'émissivité du milieu extérieur situé derrière les frontières ouvertes (résultats ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

Ce tableau montre que l'influence de l'émission du milieu extérieur sur la perte radiative

totale de la flamme est négligeable. En effet, cette perte varie de 58,7 à 58,2 W lorsque l'émissivité du milieu extérieur varie de 0 à 1. Cette faible variation de la perte radiative totale est due au fait que la majeure partie du flux entrant ressort du domaine de calcul sans être absorbée. Ainsi avec $\varepsilon_e = 1$, le flux entrant de 17,1 W se retrouve quasiment dans l'augmentation du flux sortant qui passe de 58,7 à 75,2 W quand ε_e passe de 0 à 1. Dans le tableau 4.4, l'augmentation du flux sortant est très nette alors que celle de la puissance absorbée est extrêmement faible. Cela peut s'expliquer simplement. L'émission du milieu extérieur se résume à l'émission des gaz chauds de combustion situés au-dessus de la frontière 10 et d'une partie de la frontière 9 (rayons inférieurs à 10 cm d'après la figure 4.12). Par conséquent, seuls les chemins optiques quittant cette zone avec une direction initiale, parallèle ou quasiment parallèle à l'axe de symétrie de la flamme, vont à coup sûr traverser une zone absorbante (seules les suies absorbent sur tout le spectre, les gaz n'absorbent que pour certains nombres d'onde). Les autres chemins optiques (la majorité) ne vont traverser une zone absorbante que si, simultanément, leur direction initiale n'est pas trop rasante (proche de l'horizontale) et la bande spectrale qui leur est associée correspond à une bande d'absorption des gaz. La probabilité que ces deux événements se produisent simultanément est faible car l'émissivité associée aux frontières ouvertes est uniforme sur tout le spectre (la dynamique spectrale de l'émission des gaz n'est pas prise en compte). C'est pourquoi de nombreux chemins optiques sortent du domaine par la frontière ouverte verticale sans avoir traversé de zone réellement absorbante, comme on peut le voir sur la figure 4.19. Dans le cas $\varepsilon_e = 1$, l'effet de l'émission du milieu extérieur sur la perte radiative est majoré. Par conséquent, l'influence de l'émission du milieu extérieur sur la perte radiative totale de la flamme serait encore moins importante si l'émissivité affectée au milieu extérieur tenait compte des propriétés radiatives spectrales des gaz.

4.3.3 Influence de l'interaction rayonnement/turbulence

Trois calculs ont été réalisés : un premier sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence (IRT), un second en tenant compte de l'IRT et un dernier mettant en œuvre le modèle de transferts décorrélés entre mailles optiquement minces (DMOM) décrit dans la sous-section 4.2.3.4. Les résultats globaux des trois calculs, obtenus chacun avec 10^7 chemins optiques, sont résumés dans le tableau 4.5.

	puissance émise (W)	puissance absorbée (W)	perte radiative (W)	temps CPU (s)
sans IRT	93,0	34,3	58,7	9170
avec IRT	123,5	43,3	80,2	10990
DMOM	123,5	39,9	83,6	8490

Tableau 4.5: Influence de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence sur les résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques.

On remarque d'abord que la prise en compte de l'IRT entraîne une augmentation de la puissance émise et de la perte radiative d'environ 35% et de la puissance absorbée d'environ 25%. L'effet de la turbulence est moins important sur l'absorption que sur l'émission car il ne se fait ressentir qu'au travers du coefficient d'absorption pour l'absorption alors qu'il

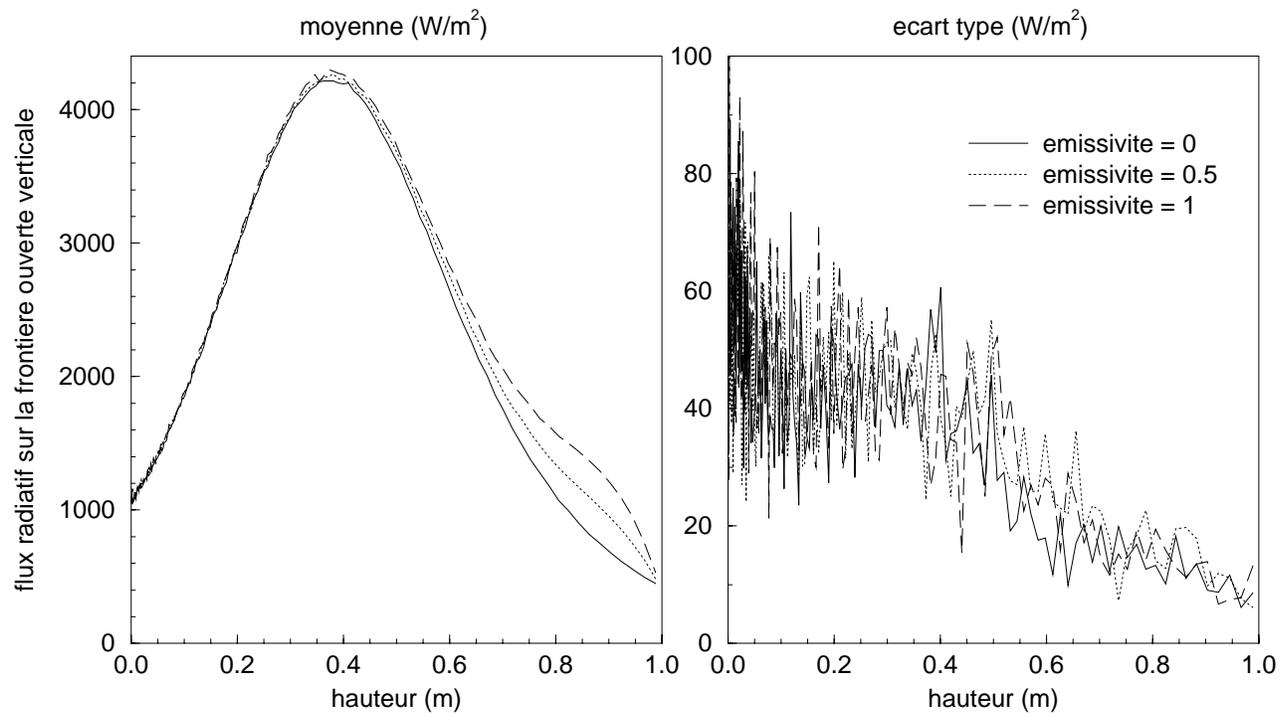


Figure 4.19: Influence de l'émissivité du milieu extérieur sur le flux radiatif surfacique moyen et l'écart type correspondant, sur la frontière ouverte verticale (résultats ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

se fait ressentir au travers du coefficient d'absorption et de la luminance du rayonnement d'équilibre pour l'émission. De plus, la luminance du rayonnement d'équilibre dépend de façon fortement non-linéaire de la température. Les fluctuations de température ont donc un effet très important sur la puissance émise. On constate également que la prise en compte de l'IRT permet d'obtenir, pour la perte radiative, l'ordre de grandeur de 80 W qui avait été grossièrement estimée (voir paragraphe 4.1.3.1). Ce résultat est quelque peu chanceux compte tenu des incertitudes sur certains paramètres comme, par exemple, la valeur de la constante du coefficient d'absorption des suies. En effet, le tableau 4.6 montre que la perte radiative avec prise en compte de l'IRT, varie de 67 à 92 W lorsque la constante K_s du coefficient d'absorption des suies varie de 4 à 7.

	$K_s = 4$		$K_s = 5,5$		$K_s = 7$	
	moy.	IRT	moy.	IRT	moy.	IRT
puissance émise (W)	81,0	107,3	93,0	123,5	104,9	139,7
puissance absorbée (W)	32,4	39,9	34,3	43,3	36,6	47,8
perte radiative (W)	48,6	67,4	58,7	80,2	68,3	91,9
temps CPU (seconde)	9000	10810	9170	10990	9300	11070

Tableau 4.6: Influence de la constante K_s du coefficient d'absorption des suies en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

D'après le tableau 4.5, la mise en œuvre du modèle DMOM conduit à une augmentation de la puissance évacuée de 42%, par rapport au calcul ne prenant pas en compte l'IRT. Cette valeur est surestimée car le recours au modèle DMOM conduit à une sous-estimation de 8% de la puissance absorbée. Cependant, dans une chambre de combustion de foyer aéronautique ou dans un propulseur à propergol solide, l'erreur commise par l'utilisation du modèle DMOM serait vraisemblablement plus importante. En effet, dans ces deux configurations, la flamme est optiquement plus épaisse pour deux raisons : l'épaisseur géométrique de la flamme est plus importante et la pression est plus élevée, ce qui conduit à l'augmentation du coefficient d'absorption des gaz et du niveau de fraction volumique de suie. Cette augmentation de l'épaisseur optique impliquerait de réduire la taille des mailles pour que l'hypothèse de mailles optiquement minces reste valable, mais c'est alors l'hypothèse de décorrélation entre les mailles qui risquerait de ne plus être valide du fait de la petite taille des mailles par rapport à celle des structures turbulentes cohérentes. En effet, plus les tourbillons sont grands par rapport aux mailles, moins le modèle DMOM, qui les considère d'une taille inférieure ou égale à celle d'une maille, est valide. D'après le tableau 4.7, lorsque la taille des tourbillons ℓ_t est égale à 3Λ où Λ est donnée par l'équation (4.12), le recours au modèle DMOM entraîne une erreur de 18% sur l'estimation de la puissance absorbée (à comparer aux 8% lorsque $\ell_t = \Lambda$). En effet, celui-ci ne tient pas compte de structures cohérentes de grande dimension par rapport aux mailles. Par conséquent, si les tourbillons sont nettement plus grands que les mailles, le

modèle de décorrélation entre mailles est inadapté. Le problème est que l'évaluation de la taille des tourbillons est délicate. Dans le cas d'une flamme turbulente de diffusion hydrogène/air, Kounalakis et al. [119] ont retrouvé des valeurs expérimentales par le calcul en considérant une taille de tourbillons égale à $6,6\Lambda$.

	puissance émise (W)	puissance absorbée (W)	perte radiative (W)	temps CPU (s)
$\ell_t = 3\Lambda$	123,5	48,4	75,1	9380
$\ell_t = \Lambda$	123,5	43,3	80,2	10990
$\ell_t = 0,3\Lambda$	123,5	41,0	82,5	14530
DMOM	123,5	39,9	83,6	8490

Tableau 4.7: *Influence de la taille des tourbillons dans la modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).*

L'effet de la prise en compte de l'IRT sur la puissance émise volumique moyenne est visible sur les figures 4.20 et 4.21. Sur la figure 4.21, la courbe DMOM de puissance émise est confondue avec la courbe avec IRT dans la mesure où elles sont calculées de la même façon. D'après la figure 4.20, la prise en compte de l'IRT provoque un élargissement et un allongement de la zone émettrice, un léger décalage vers l'aval de l'écoulement de la zone la plus émettrice et un abaissement général du niveau des puissances émises maximales (phénomènes déjà mentionnés dans la littérature [20, 22]). La figure 4.21 montre, de façon plus précise, que l'effet des fluctuations turbulentes entraîne une diminution de la puissance émise volumique au centre de la flamme (rayons inférieurs à 1,5 cm) et une augmentation de cette puissance dans la zone périphérique entourant la zone centrale (rayons compris entre 1,5 et 6 cm). Ces deux effets opposés ne se compensent pas car l'augmentation de puissance émise volumique concerne un volume beaucoup plus important que celui où a lieu la diminution (comme la flamme est axisymétrique, plus le rayon est grand, plus le volume correspondant est important). Ceci conduit à une augmentation de 33% de la puissance émise dans le tableau 4.5.

Ces phénomènes s'expliquent simplement. La puissance émise est importante lorsque la température et la fraction volumique de suie sont simultanément élevées. Lorsque l'IRT n'est pas prise en compte, l'émission est importante au centre de la flamme car cette zone est caractérisée par une température et une fraction volumique de suie moyennes élevées (1700 K et 1,2 ppm à 50 cm de hauteur). Mais, lorsque l'IRT est prise en compte, cet état moyen est remplacé par une succession d'états instantanés caractérisés, comparativement à l'état moyen, soit par une température plus faible et une fraction volumique de suie plus élevée, soit par une température plus élevée et une fraction volumique de suie beaucoup plus faible (dans les zones à température élevée, la richesse est trop faible pour que les suies apparaissent ou subsistent). Par conséquent, la puissance émise est plus faible au centre de la flamme avec IRT que sans IRT. Quant aux zones périphériques entourant le centre de la flamme, elles sont caractérisées par une température moyenne modérée (de l'ordre de 1000 K à 50 cm de hauteur) et une fraction volumique de suie moyenne faible (environ 0,1 ppm à 50 cm de hauteur), ce qui conduit à une puissance émise faible. Lorsque l'IRT est prise en compte, ces zones sont soumises à de très fortes fluctuations dues aux battements du front de flamme. A un instant donné, un point de ces zones est dans les gaz frais (500 K et pas de suie) et quelques instants plus tard ce même

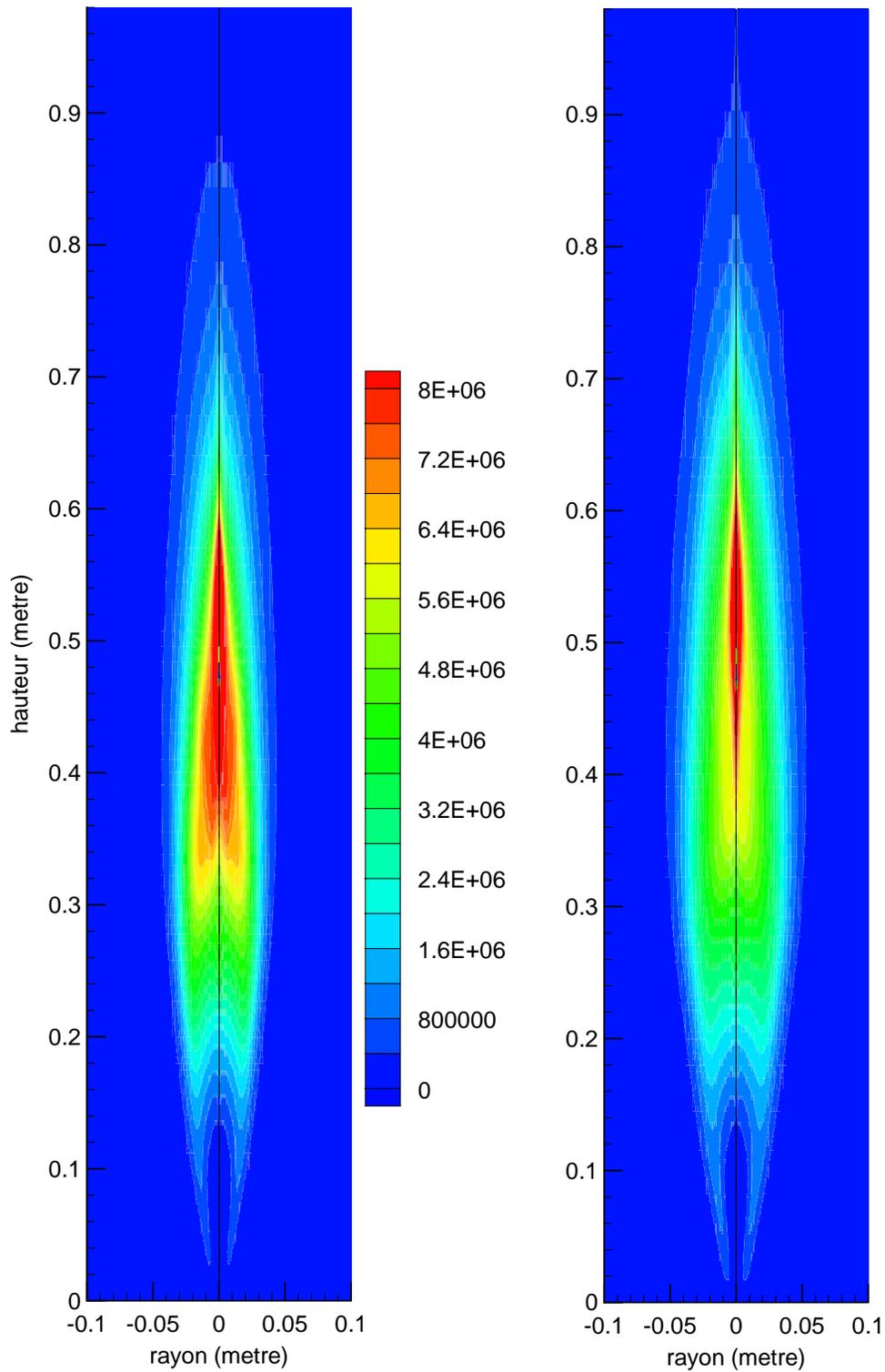


Figure 4.20: Comparaison des champs de puissance émise volumique moyenne (en W/m^3) sans (à gauche) et avec (à droite) prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence, obtenus analytiquement.

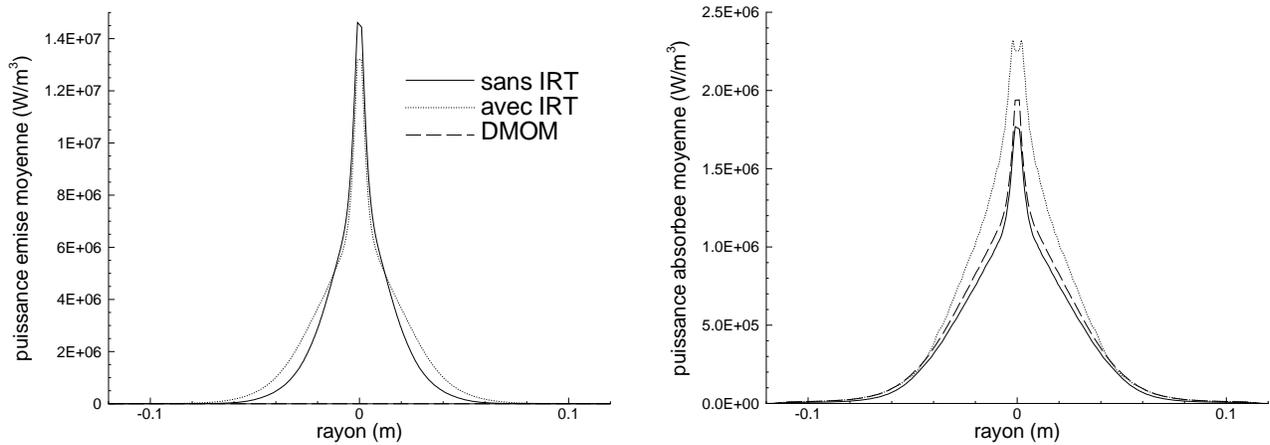


Figure 4.21: Influence de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence sur les profils radiaux de puissances émise et absorbée, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

point se trouve dans les gaz brûlés (1500 K et une fraction volumique de suie modérée). Ce sont ces importantes fluctuations de température, associées à la dépendance en température fortement non-linéaire de la luminance du rayonnement d'équilibre, qui sont responsables de l'augmentation de la puissance émise dans les zones périphériques et de l'élargissement de la zone émettrice lorsque l'IRT est prise en compte.

La figure 4.21 montre également que la puissance absorbée est plus importante lorsque l'IRT est prise en compte, principalement pour les rayons inférieurs à 4 cm. Cette augmentation est essentiellement due à celle de la puissance émise. En effet, d'après le tableau 4.5, la proportion de la puissance absorbée par rapport à la puissance émise passe de 37% sans IRT à 35% avec IRT, ce qui prouve que le facteur d'absorption de la flamme ne varie pas. L'augmentation de puissance absorbée a lieu principalement dans la zone centrale, là où les fluctuations de fraction volumique de suie sont présentes.

Etant donné qu'au centre de la flamme la puissance émise diminue et la puissance absorbée augmente lorsque l'IRT est prise en compte, il est normal de constater, en comparant les figures 4.14 et 4.22, que la puissance radiative ($P^R = P^a - P^e$) augmente (diminue en valeur absolue) dans cette zone lorsque l'IRT est prise en compte. Les profils radiaux à 50 cm de hauteur de puissance radiative avec et sans IRT sont représentés sur la figure 4.23. Ces trois figures permettent également de remarquer l'élargissement de la zone d'émission. Enfin, l'écart type est plus important lorsque l'IRT est prise en compte. Cela est lié au traitement stochastique de l'absorption. D'ailleurs, l'écart type obtenu avec le modèle DMOM est proche de celui obtenu sans IRT.

La figure 4.24 représente l'évolution, en fonction de la hauteur, du flux radiatif surfacique moyen sortant par la frontière ouverte verticale. On constate que le flux obtenu en tenant compte des fluctuations turbulentes est supérieur à celui calculé à partir des grandeurs moyennes sur toute la hauteur de la flamme. D'autre part, on s'aperçoit que la non prise en compte de l'IRT déplace le maximum du flux radiatif d'environ 5 cm vers l'amont de l'écoulement : le maximum est situé à environ 37 cm de hauteur pour le cas sans IRT et à environ 42 cm de hauteur pour les deux autres cas. Le fait que les flux obtenus avec IRT et le modèle DMOM

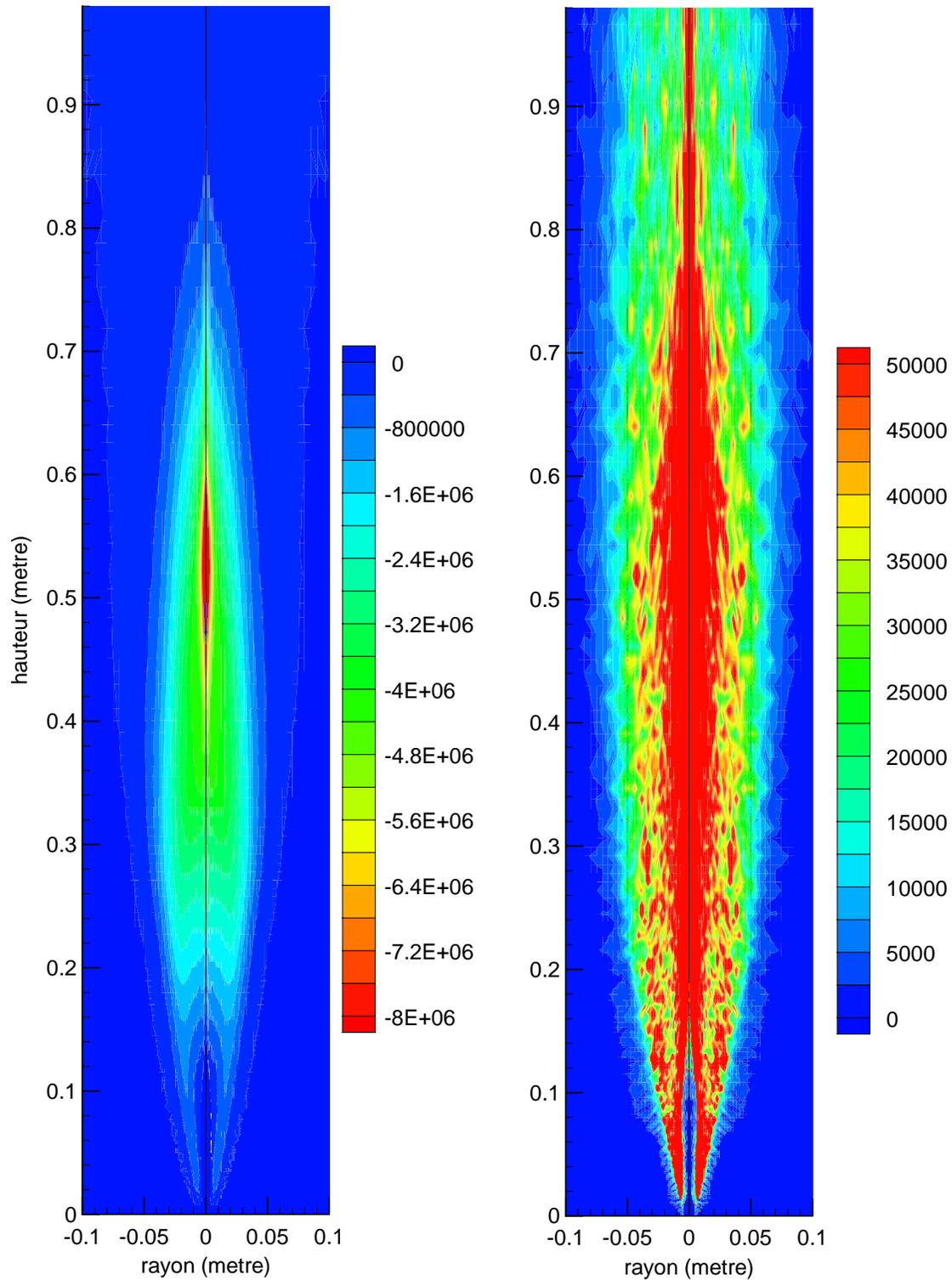


Figure 4.22: Champs de puissance radiative volumique moyenne (en W/m^3 , à gauche) et de l'écart type correspondant (en W/m^3 , à droite) obtenus en prenant en compte l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

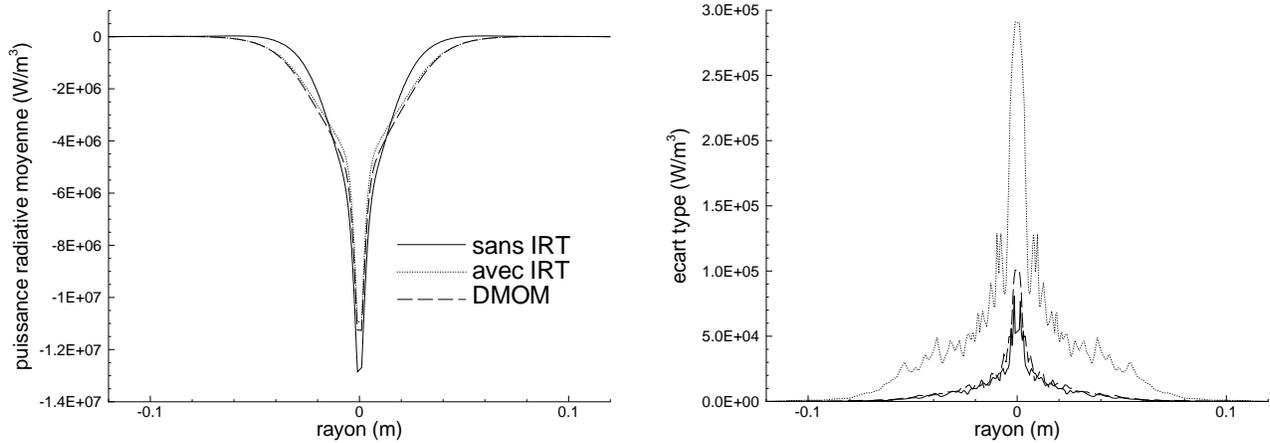


Figure 4.23: Influence de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence sur les profils radiaux de puissance radiative volumique moyenne et de l'écart type correspondant, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

aient leur maximum à la même hauteur signifie que ce décalage du flux radiatif maximal est essentiellement dû à un déplacement global de la zone d'émission de la flamme. Ce phénomène est en effet observable sur la figure 4.20. Dans la zone où les flux sont maximaux, l'augmentation du flux, due à la prise en compte de l'IRT, est à peu près de 31% (elle est d'environ 36% avec le modèle DMOM). Le flux obtenu avec IRT est beaucoup plus irrégulier que les deux autres à cause des fluctuations turbulentes du coefficient d'absorption. Enfin, comme pour les puissances radiatives volumiques, l'écart type obtenu en prenant en compte l'IRT est plus élevé (d'un facteur 4 par rapport au cas sans IRT). De la même façon que pour les calculs ne prenant pas en compte l'IRT, la convergence en $1/\sqrt{N}$ a été vérifiée lorsque l'IRT est prise en compte (voir figure 4.25).

Pour résumer et conclure sur l'effet des fluctuations turbulentes sur les transferts radiatifs, on peut dire que la turbulence a tendance à homogénéiser le champ de puissance radiative volumique. En effet, lorsque l'IRT n'est pas prise en compte, les pertes radiatives sont intenses sur une zone restreinte. En revanche, si on tient compte de l'IRT, les pertes radiatives sont moins intenses mais sur une zone beaucoup plus étendue, de sorte que globalement les pertes radiatives sont augmentées d'environ 35%.

4.3.4 Contribution des gaz et des suies

Plusieurs calculs prenant en compte de façon isolée les différents constituants participant aux transferts radiatifs, présents dans la flamme (particules de suie, H_2O et CO_2), ont été réalisés avec et sans IRT. Les résultats globaux obtenus sont résumés dans le tableau 4.8.

Si la puissance émise par le mélange est égale à la somme des puissances émises par chaque constituant (l'erreur très faible dans le cas avec IRT est une erreur d'arrondi), ce n'est évidemment pas le cas pour la puissance absorbée puisque, dans le mélange, une espèce donnée peut absorber la puissance émise par une autre espèce. Lorsque l'IRT est prise en compte, l'émission des particules de suie représente 48% de la puissance émise par la flamme, celle de H_2O 10%

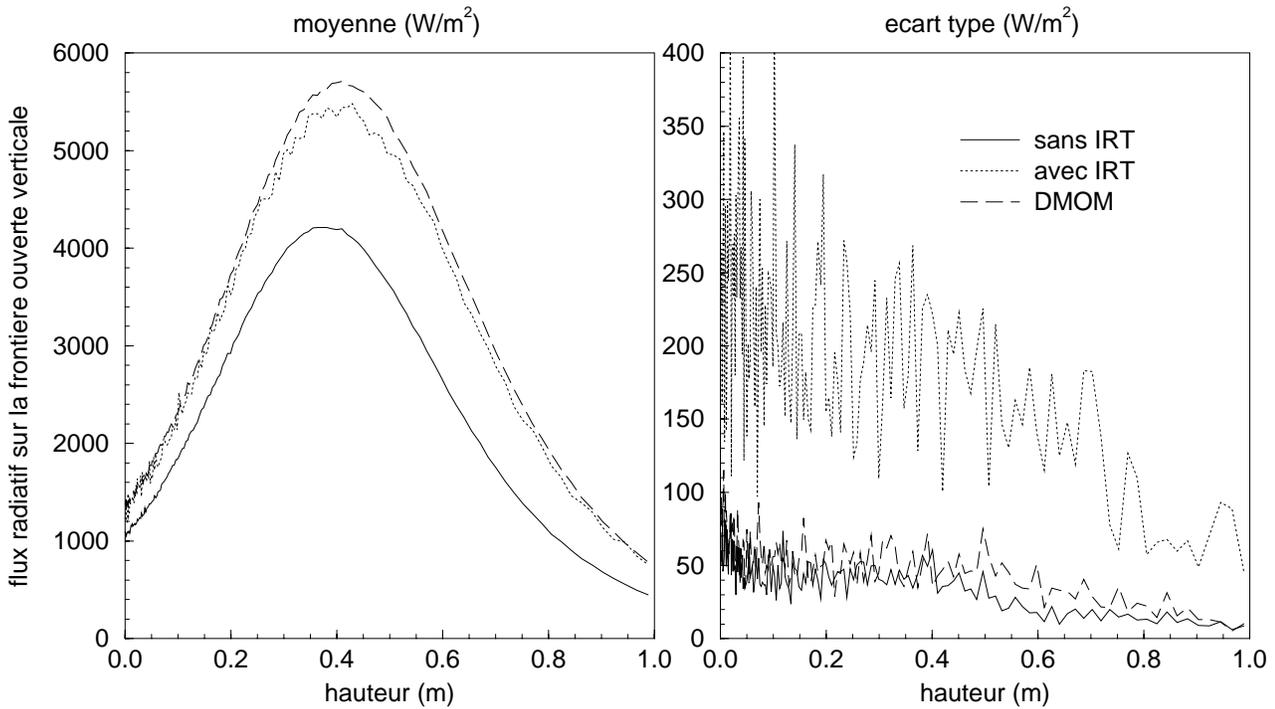


Figure 4.24: Influence de l'interaction rayonnement/turbulence sur le flux surfacique sortant par la frontière ouverte verticale (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

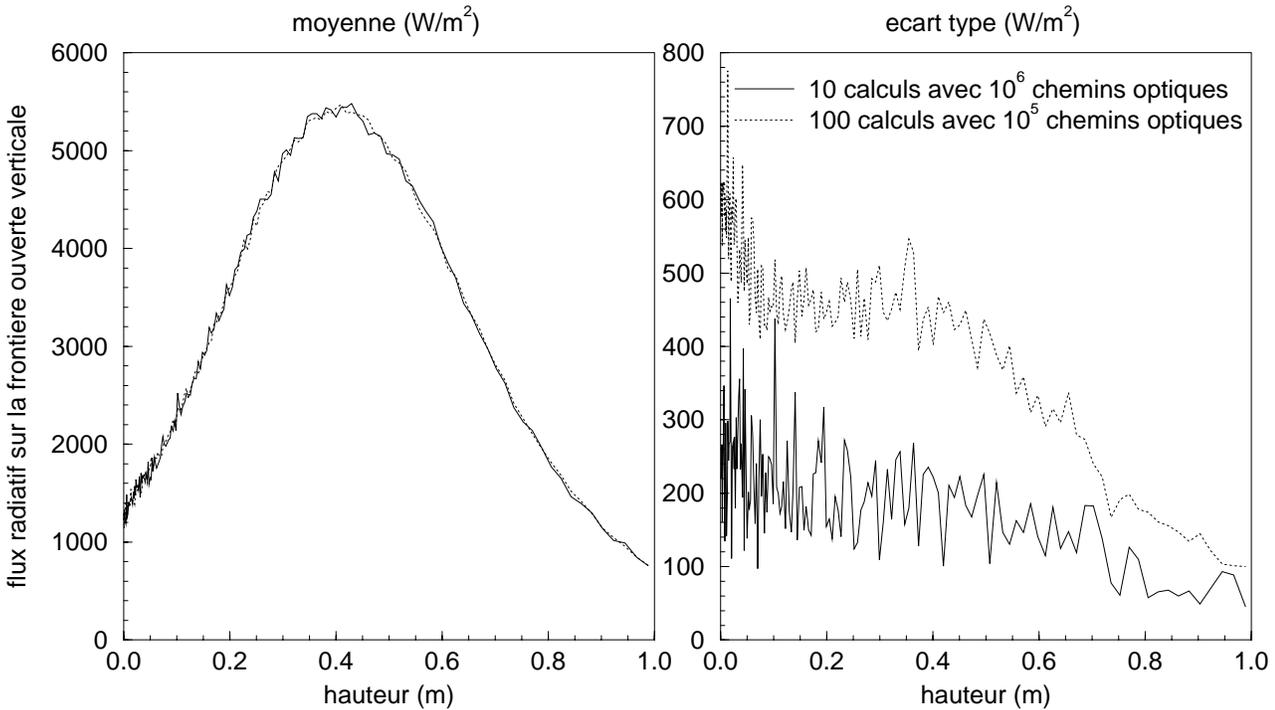


Figure 4.25: Convergence du flux surfacique sortant par la frontière ouverte verticale (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD en prenant en compte l'interaction rayonnement/turbulence).

	gaz + suies		suies seules		gaz seuls		H ₂ O seule		CO ₂ seul	
	moy.	IRT	moy.	IRT	moy.	IRT	moy.	IRT	moy.	IRT
puissance émise (W)	93,0	123,5	43,7	59,3	49,3	64,2	9,7	12,8	39,6	51,5
puissance absorbée (W)	34,3	43,3	3,4	8,0	29,8	35,7	2,3	2,5	27,3	33,0
perte radiative (W)	58,7	80,2	40,3	51,3	19,5	28,5	7,4	10,3	12,3	18,5
temps CPU (seconde)	9170	10990	9660	10670	8070	9680	8910	10380	7770	9380

Tableau 4.8: Contribution des gaz et des suies en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

et celle de CO₂ 42%. L'IRT a très peu d'influence sur cette répartition car l'augmentation de la puissance émise due à la prise en compte de l'IRT est sensiblement la même pour les 3 constituants (respectivement 36, 32 et 30%). Comme les suies sont présentes sur un volume beaucoup plus restreint que celui des gaz, cela signifie que l'émission volumique des suies est beaucoup plus intense que celle des gaz. La puissance émise par CO₂ est 4 fois supérieure à celle émise par H₂O, du fait de la bande de CO₂ à 4,3 μm (bande très intense à 2300 cm^{-1} visible sur la figure 4.26).

C'est l'espèce CO₂ qui absorbe le plus : son absorption représente 76% de l'absorption du mélange avec IRT et 83% sans IRT. Le pourcentage est un peu plus faible avec IRT car, dans ce cas, la puissance absorbée par les suies augmente de 135% par rapport au cas sans IRT (cette augmentation n'est que de 9% pour H₂O et 21% pour CO₂). Les fluctuations de fraction volumique de suie sont donc très importantes pour le calcul de l'absorption. Les suies n'absorbent qu'environ 10% de leur émission car, d'une part, la zone de présence des suies est très restreinte, d'autre part, le coefficient d'absorption est modéré sur l'ensemble du spectre. Par conséquent, l'émission des suies n'a pas lieu dans des bandes spectrales optiquement épaisses. Au contraire, CO₂ absorbe environ 70% de son émission car celle-ci a lieu dans une bande spectrale optiquement très épaisse. En effet, la zone de présence de ce gaz est étendue et le coefficient d'absorption de CO₂ est schématiquement nul sur l'ensemble du spectre excepté sur une bande spectrale où il est très élevé. Pour H₂O, la puissance absorbée ne s'élève qu'à environ 20% de la puissance émise car le coefficient d'absorption n'atteint jamais la valeur atteinte dans la bande à 4,3 μm de CO₂. Comme l'absorption est beaucoup plus importante pour les gaz que pour les suies, les suies sont responsables des deux tiers de la perte radiative par la flamme (voir tableau 4.8 et figure 4.27), bien qu'elles ne soient à l'origine que de la moitié de la puissance émise par la flamme.

La figure 4.28 confirme l'explication donnée dans la section précédente à propos de l'influence de la prise en compte de l'IRT sur la puissance émise. La diminution de la puissance émise dans la zone centrale et son augmentation dans la zone périphérique sont bien essentiellement dues aux fluctuations de température et de fraction volumique de suie. En effet, les profils radiaux de puissance radiative obtenus en ne considérant que CO₂ ou que H₂O semblent

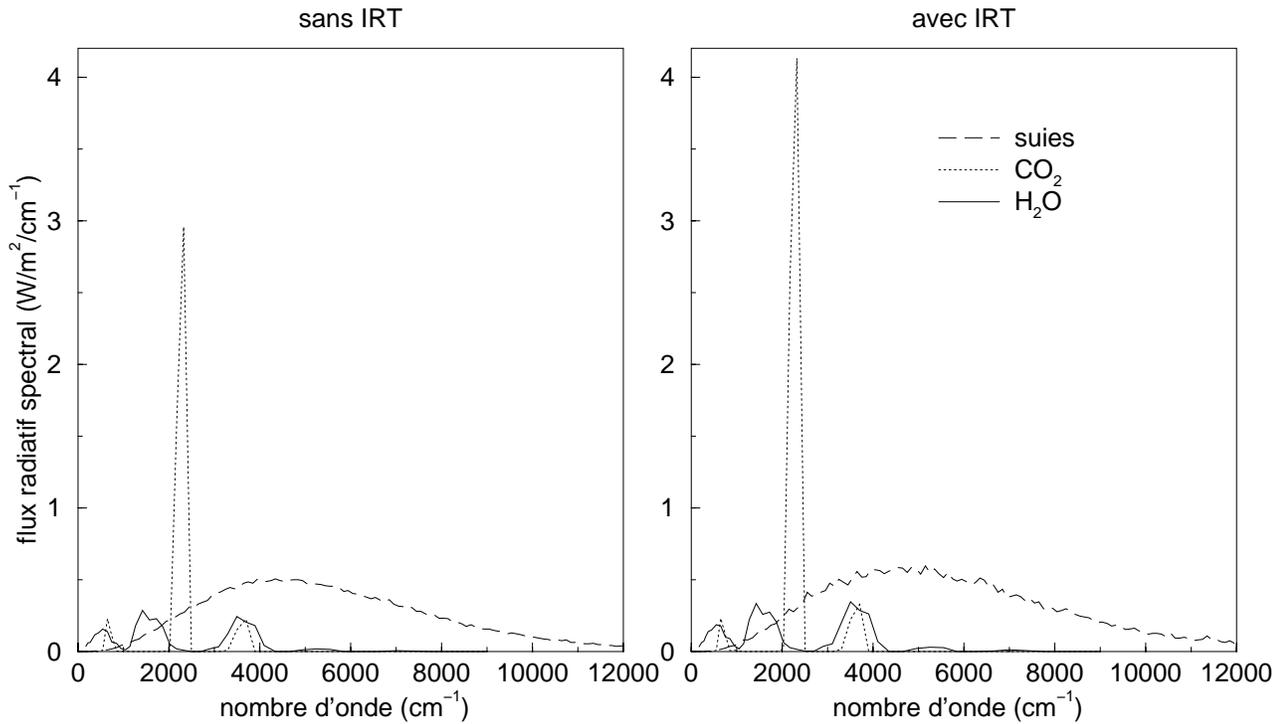


Figure 4.26: Contribution des gaz et des suies au flux spectral moyen sortant par la frontière ouverte verticale à 40 cm de hauteur, en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

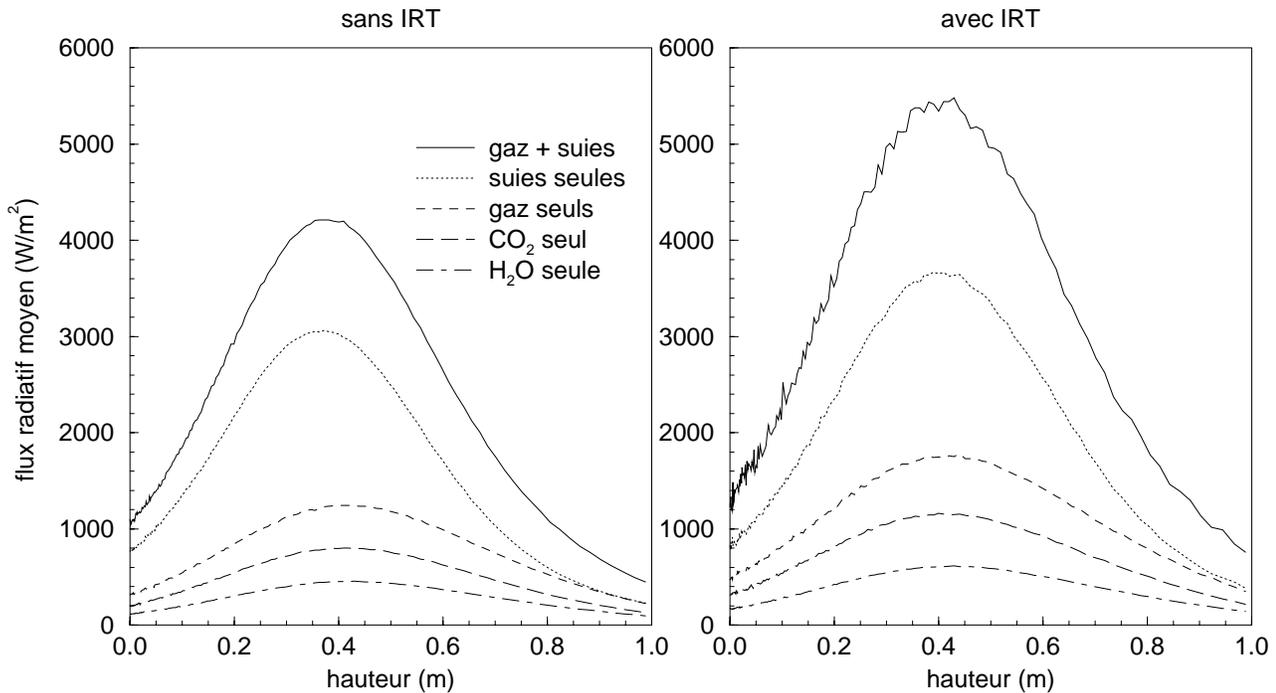


Figure 4.27: Contribution des gaz et des suies au flux total moyen sortant par la frontière ouverte verticale en fonction de la hauteur et de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

insensibles à la prise en compte de l'IRT, alors que la puissance radiative correspondant aux suies diminue en valeur absolue au centre et augmente en valeur absolue en périphérie. De plus, la puissance radiative due aux gaz est quasiment négligeable, à cette hauteur, comparée à celle des suies.

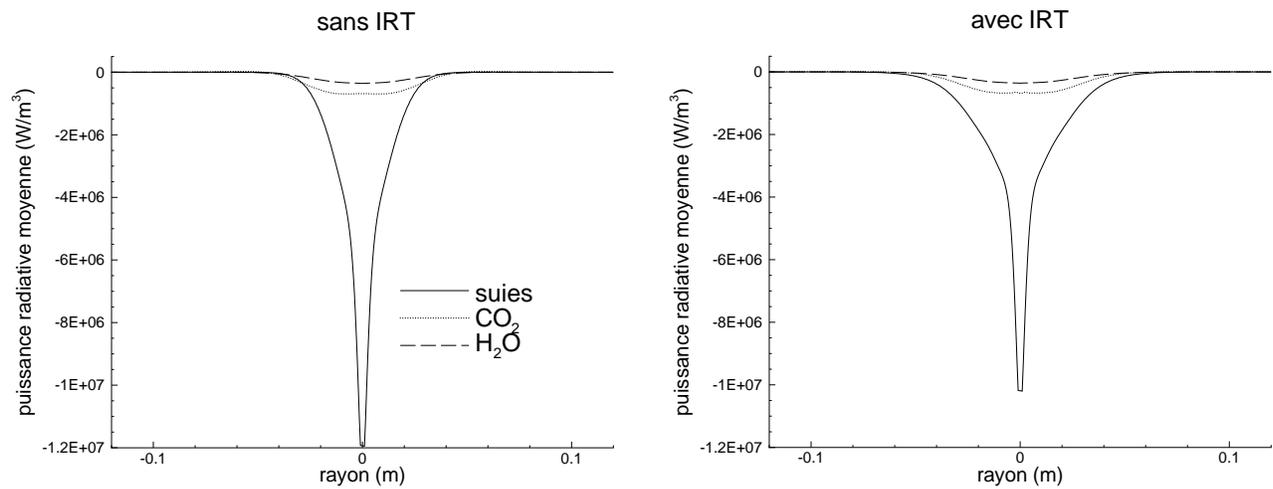


Figure 4.28: Contribution des gaz et des suies à la puissance radiative volumique moyenne à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).

Synthèse et perspectives

Synthèse

Au cours de ce travail de thèse, un outil numérique original destiné au calcul des transferts radiatifs a été développé afin de traiter des géométries tridimensionnelles complexes contenant un milieu non-gris, émetteur, absorbant, diffusant et soumis à de fortes fluctuations spatiales et temporelles de température et de concentrations. Le code correspondant a été nommé ASTRE (Approche Statistique des Transferts Radiatifs dans les Ecoulements). L'équation de transfert du rayonnement y est résolue de façon stochastique par trois approches différentes de la méthode de Monte Carlo : une formulation classique (FM) et deux approches basées sur le principe de réciprocité (ERM et ARM). Le principe de réciprocité n'est pas considéré seulement du point de vue géométrique, comme dans « the reverse Monte Carlo method » [163, 166], mais également du point de vue énergétique. C'est-à-dire qu'un chemin optique reliant deux points est parcouru dans les deux sens et que le rapport des puissances véhiculées dans les deux sens est égal au rapport des luminances des rayonnements d'équilibre en ces deux points. Comme ce code est dédié à des géométries complexes mettant en jeu un très grand nombre de mailles, il n'est actuellement pas possible, pour des raisons de volume de stockage et de temps de calcul, d'utiliser la réciprocité pour tout couple (i, j) de mailles, mais uniquement pour une maille donnée i avec des approches privilégiant l'absorption, ou privilégiant l'émission. Dans les trois méthodes, la diffusion est modélisée de façon stochastique alors que l'absorption est traitée de façon déterministe afin de réduire la variance des résultats.

Une première version du code, ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence, a été validé sur le cas test monodimensionnel, dit du « mur plan », pour lequel il existe des solutions de référence. Ce cas de validation consiste à calculer les flux radiatifs sur deux parois planes parallèles infinies, ainsi que les puissances radiatives au sein du milieu qui les sépare. Plusieurs situations impliquant, soit des milieux gris diffusants ou non, soit des mélanges non diffusants de gaz réels, ont été calculées pour différentes épaisseurs optiques et différentes conditions thermiques. Les propriétés radiatives des gaz sont modélisées par une approche CK et les corrélations spectrales sont prises en compte. Bien que ces problèmes soient monodimensionnels, tous les calculs ont été effectués avec des maillages tridimensionnels afin de tester l'aptitude du code à traiter des géométries tridimensionnelles.

Pour chaque situation thermophysique, les moyennes et écarts types donnés par les trois méthodes ont été comparés. Les avantages et inconvénients de chaque méthode ont ainsi pu être discutés. En particulier, la méthode de Monte Carlo classique est la plus adaptée aux milieux non optiquement épais caractérisés par de forts écarts de température. Au contraire, les méthodes (ARM ou ERM) utilisant le principe de réciprocité sont les plus adaptées, no-

tamment aux milieux optiquement épais ou quasi-isothermes. La méthode ERM, qui utilise le principe de réciprocité, présente également l'avantage de pouvoir calculer la puissance ou le flux en un nombre limité de points, en ne traitant que les chemins optiques utiles au calcul de la grandeur radiative en ces points. Cette méthode permet donc d'obtenir des informations locales de façon précise et avec un faible temps de calcul. Un point essentiel à souligner est que les résultats des trois méthodes sont obtenus simultanément avec un seul et même calcul. En d'autres termes, le temps de calcul nécessaire à l'obtention des résultats des trois méthodes est égal à celui nécessaire à l'obtention des résultats à partir d'une seule méthode, dans la mesure où les tâches requérant beaucoup de temps de calcul sont communes aux trois méthodes. De ce fait, la solution optimale consiste dans de nombreux cas, à retenir en chaque zone du système les résultats de la méthode qui minimise localement l'écart type.

Ensuite, une modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence a été développée et intégrée au code ASTRE. Dans cette approche, un chemin optique traverse une succession de structures turbulentes cohérentes indépendantes, supposées homogènes et isothermes. Cette modélisation très simple tient compte des échelles de longueur intégrales de la turbulence et des corrélations entre luminance incidente et coefficient d'absorption (aucune approximation de type OTFA n'est utilisée). La taille des structures turbulentes cohérentes est égale à l'échelle de longueur intégrale de la turbulence. Les propriétés thermophysiques (température, fraction volumique de suie et fractions molaires des gaz absorbants) d'une structure turbulente sont tirées au sort suivant une procédure reposant en partie sur une hypothèse de réaction brusque. Ainsi, le tirage au sort de ces différentes grandeurs est remplacé par le tirage au sort du degré d'avancement, suivant une loi de probabilité à deux valeurs (0 ou 1), et par celui de la richesse et de la fraction volumique de suie, suivant une PDF jointe bidimensionnelle conditionnée par le fait que le degré d'avancement est égal à 1. En effet, l'hypothèse de réaction brusque (appliquée à une partie des espèces) a plusieurs conséquences. D'une part, le degré d'avancement des réactions principales est soit égal à 0, soit égal à 1. D'autre part, lorsqu'il est égal à 1, la température et les fractions molaires des espèces gazeuses majoritaires sont déterminées par les conditions d'équilibre local, autrement dit, sont fixées dès lors qu'on connaît la richesse locale. En revanche, la cinétique de formation et d'oxydation des particules de suie est lente par rapport à la cinétique des réactions principales et l'hypothèse de réaction brusque ne peut pas s'appliquer aux suies.

La version finale du code a été appliquée à une flamme turbulente de diffusion éthylène/air pour laquelle quelques résultats expérimentaux sont disponibles dans la littérature. Les propriétés radiatives spectrales des gaz et des particules de suie sont prises en compte pour traiter l'émission et l'absorption. La diffusion du rayonnement par les particules de suie est négligée. La méthode de Monte Carlo la plus adaptée au calcul des transferts radiatifs au sein de ce type de flamme (globalement non optiquement épaisse) est la formulation directe classique, ce qu'a montré l'étude préliminaire. Il n'est cependant pas possible de considérer cette flamme optiquement mince et de négliger l'absorption au sein de cette dernière, qui absorbe environ 35% de la puissance qu'elle émet. La prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence se traduit par une relative homogénéisation du champ de puissance radiative volumique : l'émission diminue là où elle est la plus intense (zone centrale peu étendue) et augmente là où elle est modérée (zone périphérique beaucoup plus étendue). Les volumes concernés par ces deux phénomènes antagonistes étant très différents, la prise en compte des fluctuations turbulentes entraîne une augmentation de 37% de la perte radiative totale de la flamme, ce qui conduit à

l'ordre de grandeur attendu. La perte radiative représente alors 32% de la puissance dégagée par la réaction de combustion, ce qui est en accord avec les valeurs données dans la littérature pour des flammes turbulentes de diffusion éthylène/air [15, 19]. Les suies et les gaz émettent chacun environ 50% de la puissance émise par la flamme, mais les suies représentent environ 70% de la perte radiative totale car l'absorption est beaucoup plus forte pour les gaz que pour les suies. Le dioxyde de carbone absorbe 70% de la puissance qu'il émet car son spectre est essentiellement constitué d'une bande très intense à $4,3 \mu\text{m}$, ce qui fait que la majorité de la puissance due à ce gaz est émise dans une bande spectrale optiquement épaisse.

Il a également été montré que les choix de la taille des structures turbulentes cohérentes et de la constante du coefficient d'absorption des suies ont une influence importante sur la perte radiative totale de la flamme. L'augmentation de la taille des structures turbulentes et la diminution de la valeur de cette constante entraînent une baisse de la perte radiative. Enfin, il a été mis en évidence que l'influence de l'émission du milieu extérieur sur la perte radiative était négligeable.

Perspectives

En ce qui concerne la méthodologie générale de calcul des transferts radiatifs, on peut imaginer construire une solution tenant compte des trois méthodes de Monte Carlo. La puissance radiative (ou le flux radiatif) serait donnée en chaque point par la méthode qui présente le plus faible écart type en ce point. Le problème est alors de s'assurer que la moyenne en ce point, donnée par cette méthode, est correcte lorsqu'on ne dispose pas de solution de référence. Un exemple de biais, dans le cas du calcul de la flamme avec la technique UD, est que la méthode ARM conduit au plus faible écart type pour les puissances radiatives dans la mesure où ces puissances sont, en valeur absolue, très sous-estimées. Autre exemple, la méthode ERM donne un écart type nul pour le calcul des flux sur les frontières car le flux moyen calculé par cette méthode est toujours égal à zéro lorsque l'émission des frontières est négligée.

A moyen terme, des moyens de calcul plus performants devraient permettre d'utiliser le principe de réciprocité entre tous les couples possibles de mailles i et j , et non pas comme actuellement, en ne considérant les résultats qu'en chaque maille, en privilégiant soit l'émission (ERM), soit l'absorption (ARM). Le gain en précision serait alors réel. En effet, on ne se contenterait plus de choisir localement la méthode qui donne le meilleur résultat pour la puissance radiative, mais il serait possible de considérer la méthode la plus adaptée au calcul de la puissance échangée entre deux mailles. Cette méthode a été appliquée par de Lataillade [5] dans une géométrie 1D comportant un nombre réduit de mailles.

Le traitement des mailles optiquement épaisses devra être amélioré en les considérant anisothermes et hétérogènes. Au lieu de tirer au sort, uniformément sur la maille, le point d'où commence la construction du chemin optique, il faudra calculer les champs 3D de température et de concentrations à l'intérieur de la maille à partir des propriétés thermophysiques des mailles voisines et la procédure de tirage au sort du point devra alors favoriser les zones les plus émettrices de la maille. Une autre solution consisterait à ne pas modifier la procédure de tirage au sort mais à ajuster la puissance véhiculée par le chemin optique en fonction de sa position de départ à l'intérieur de la maille. Une dernière solution consisterait à privilégier, lors du tirage au sort, les points dans la maille proches des facettes de celle-ci [5].

La modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence peut être améliorée en tirant au sort la taille des structures homogènes et isothermes au lieu de la considérer constante et égale à l'échelle de longueur intégrale de la turbulence définie dans une maille. Cependant, cette amélioration pose quelques problèmes (notamment au niveau des valeurs des bornes de l'intervalle de longueur à considérer et de la forme de la densité de probabilité sur cet intervalle).

La modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence pourra également être améliorée lorsque les progrès de l'informatique permettront le stockage de la PDF jointe multidimensionnelle de température, pression, fraction volumique de suie et fractions molaires de toutes les espèces gazeuses participant aux transferts radiatifs. Il ne sera alors plus nécessaire de recourir, même partiellement, à l'hypothèse de réaction brusque.

Il serait utile de développer des paramètres CK pour le monoxyde de carbone car ce dernier peut parfois être en quantité non négligeable comme c'est le cas pour la flamme étudiée (voir figure 1). Dans les applications à haute pression, ce gaz sera pris en compte car le modèle HPBM [39], pour lequel il existe des paramètres pour le monoxyde carbone, sera implanté dans le code ASTRE.

De tous les thèmes de recherche abordés dans cette thèse (résolution de l'équation de transfert du rayonnement, modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence, modélisation des propriétés radiatives du milieu . . .), la modélisation des propriétés radiatives des particules de suie est certainement celui qui est le moins bien maîtrisé et qui offre de nombreux sujets de recherche pour les années à venir. En effet, quelques interrogations subsistent encore dans ce domaine. Est-ce que la nature des particules de suie dépend du combustible et des conditions expérimentales (pression, température . . .)? De nouvelles études théoriques et expérimentales seront également nécessaires pour déterminer l'évolution, en fonction de la longueur d'onde, de l'indice optique complexe des particules de suie (pour plusieurs combustibles et différentes températures?). Enfin, de nombreuses difficultés restent à surmonter. Comment obtenir les coefficients d'absorption et de diffusion et la fonction de phase des agrégats dont la structure et la taille sont encore mal connues?

La prise en compte simultanée de la diffusion du rayonnement par des particules et de l'interaction rayonnement/turbulence pose aussi des problèmes. Si la taille et la température des particules sont tirées au sort dans chaque structure turbulente, les coefficients d'absorption et de diffusion ainsi que la fonction de phase devront être tabulés en fonction de ces deux paramètres car il n'est pas envisageable, pour des raisons de temps de calcul, de recalculer systématiquement ces trois grandeurs dans chaque tourbillon.

Pour les agrégats, la situation est plus complexe encore : il faudra tirer au sort plusieurs paramètres caractéristiques de leur structure et de leur taille comme, par exemple, le nombre de particules contenues dans un agrégat, la taille de ces particules et la dimension fractale de la structure d'un agrégat. Malgré toutes ces inconnues et toutes ces difficultés, il serait très intéressant de calculer les transferts radiatifs au sein de la flamme en prenant en compte la diffusion du rayonnement par les particules de suie, pour différentes distributions de taille, afin d'évaluer, de façon quantitative et phénoménologique, l'impact de la diffusion sur les puissances et les flux radiatifs.

Le code ASTRE sera parallélisé et vectorisé afin d'améliorer ses performances et diminuer les temps de calcul. La mise en œuvre de la parallélisation ne devrait pas poser de problème particulier et le temps de calcul devrait être divisé par le nombre de processeurs impliqués

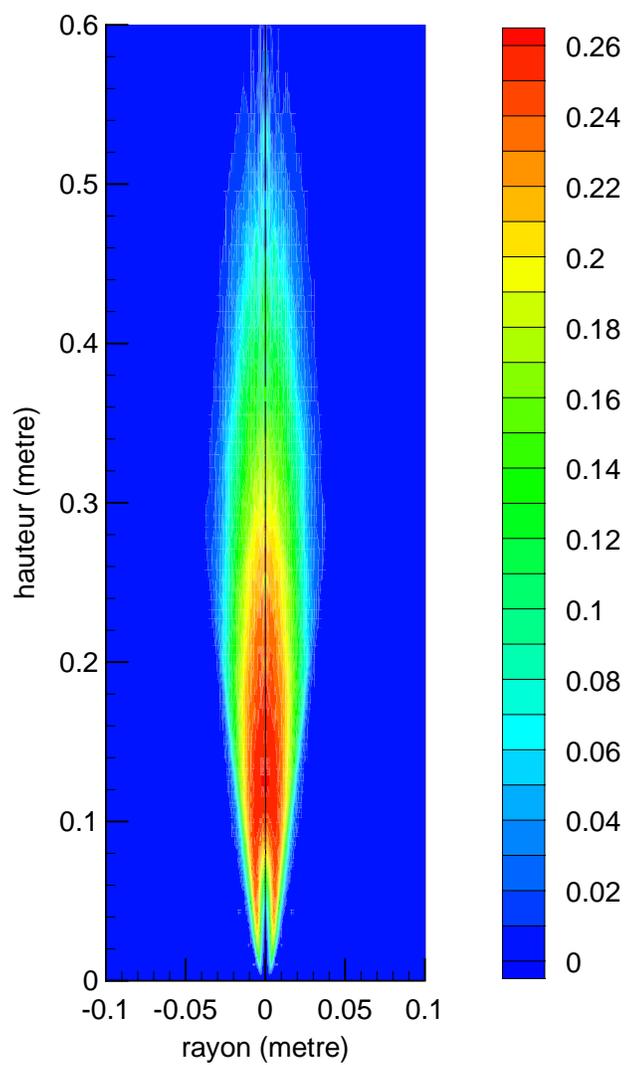


Figure 1: *Champ de fraction molaire moyenne de monoxyde de carbone issu du calcul lagrangien; $x_{CO_{max}} \simeq 0,28$.*

car les méthodes de Monte Carlo sont facilement parallélisables et très adaptées à ce type d'optimisation [164]. En effet, les chemins optiques étant tous indépendants, il est très facile de répartir leur construction sur les différents processeurs qui n'ont pas besoin de communiquer entre eux et donc de s'attendre, excepté à la fin du calcul lorsque tous les chemins optiques ont été construits. La vectorisation sera plus délicate à mettre en œuvre et il est difficile de prévoir le gain en temps de calcul. Elle concerne le cœur du code : la procédure de trajectographie. L'idée est de construire plusieurs chemins optiques en même temps afin de vectoriser les calculs géométriques, actuellement scalaires, qui requièrent d'importants temps de calcul (entre 60 et 90% du temps de calcul total selon le type de calcul).

En 2002, le code ASTRE sera modifié de façon à pouvoir effectuer des calculs avec des maillages non-structurés en vue de son couplage avec le code CEDRE (Calculs d'Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique), le code d'aérothermochimie non-structuré en cours de développement à l'ONERA. La méthodologie de couplage qui sera adoptée dépendra essentiellement du gain en temps de calcul résultant de l'optimisation du code. L'objectif sera de réaliser des calculs de transferts radiatifs, mettant en jeu peu de chemins optiques mais prenant en compte tous les phénomènes physiques le plus souvent possible, puis de lisser spatialement les résultats, plutôt que de faire seulement deux ou trois calculs détaillés et précis de transferts radiatifs et d'utiliser, aux itérations intermédiaires, des modélisations simplifiées négligeant certains phénomènes physiques. En effet, un calcul spectral, tenant compte des fluctuations turbulentes et mettant en jeu 10^5 chemins optiques, donne de meilleurs résultats (bien que moins précis) et en 100 fois moins de temps qu'un calcul gris, ne tenant pas compte des fluctuations turbulentes et mettant en jeu 10^7 chemins optiques (de plus, le lissage spatial permet d'éliminer les fluctuations statistiques importantes dues au faible nombre de chemins optiques). Cependant, il est très peu probable que les temps de calcul, même avec de faibles nombres de chemins optiques, soient suffisamment faibles pour permettre d'effectuer un calcul avec le code ASTRE à chaque itération du code CEDRE. Il faudra donc développer une technique pour prendre en compte les termes sources radiatifs à chaque itération sans les calculer à chaque itération. La méthode développée récemment par de Lataillade [5] semble très intéressante. Elle consiste à calculer les matrices de sensibilité, à l'ensemble des variables du problème (température et concentrations), des termes sources radiatifs. Le couplage avec la combustion peut ensuite se faire en écrivant les termes sources radiatifs sous la forme d'un développement de Taylor au premier ordre par rapport aux variables température et concentrations. A la fin du calcul couplé, un calcul détaillé de transferts radiatifs est effectué afin de vérifier que le calcul est resté dans le domaine de linéarité du développement de Taylor. Cette technique a été appliquée avec succès à une flamme laminaire comportant peu de suies, mais serait-elle également valable pour une flamme turbulente à haute teneur en suies ? En effet, avec les suies, les termes puits radiatifs sont, en valeur absolue, beaucoup plus importants.

Afin de valider ces différents outils numériques, une flamme turbulente de diffusion éthylène/air, pouvant être mise sous pression, est étudiée expérimentalement au centre ONERA de Palaiseau. Des mesures de vitesse par vélocimétrie laser et de température par DRASC (Diffusion Raman Anti-Stockes Cohérente), ainsi que des visualisations de l'écoulement par LIF (Laser Induced Fluorescence) sur OH ont été effectuées en 1999 et 2000 par des équipes de l'ONERA. Cette année, des mesures de fraction volumique de suie par LII (Laser Induced Incandescence) ont été réalisées par une équipe du DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt). Des mesures de flux radiatifs et de concentrations en oxyde d'azote ainsi qu'une

nouvelle campagne de mesure de fraction volumique de suie par une technique d'absorption sont prévues à court terme. A moyen terme, l'éthylène gazeux sera remplacé par du kérosène liquide afin d'étudier l'influence de la pulvérisation de celui-ci sur la production des polluants.

Annexe A

Description du générateur de nombres aléatoires

A.1 Choix du générateur de nombres aléatoires

Rappelons tout d'abord, qu'il existe deux grandes familles de générateurs de nombres aléatoires. On distingue, d'une part, les générateurs basés sur des méthodes linéaires, à savoir ceux de type LCG (Linear Congruential Generator) et de type MRG (Multiple Recursive Generator), et d'autre part, les générateurs basés sur des méthodes non-linéaires, à savoir ceux de type ICG (Inversive Congruential Generator), de type QCG (Quadratic Congruential Generator) et de type CG (Cryptographic Generator).

Neuf générateurs de nombres aléatoires ont été testés. Notre choix s'est porté sur un générateur récent développé par Pierre L'Ecuyer et appelé MRG32k3a [189]. Il a été choisi pour les raisons suivantes :

- il a d'excellentes propriétés mathématiques (fiabilité, longue période . . .) et a passé tous les test proposés par les mathématiciens avec succès ;
- son principe est simple car il fait appel à une méthode linéaire ;
- il est peu coûteux en temps de calcul : sur une Silicon Graphics O2 possédant un seul processeur scalaire R5000 à 180 MHz, la génération de 10^7 nombres aléatoires requiert 12 secondes CPU ; il est possible de trouver des générateurs plus rapides (les temps de calcul des 9 générateurs testés varient de 4 à 60 secondes CPU) mais ils n'ont pas d'aussi bonnes propriétés mathématiques ;
- sa mise en œuvre informatique et son utilisation sont très simples (il ne s'agit que d'une dizaine de lignes de langage C) ;
- il est portable et fonctionne aussi bien sur une machine 32 bits qu'une machine 64 bits ;
- il est conseillé dans *Handbook on Simulation* [202] et est du même auteur, mais plus récent, que celui conseillé dans *Numerical Recipes* [203].

A.2 Description du générateur de nombres aléatoires utilisé

Le générateur choisi est une combinaison de deux générateurs de type MRG d'ordre 3. Un MRG d'ordre 3 est défini de la façon suivante :

$$x_n = (a_1x_{n-1} + a_2x_{n-2} + a_3x_{n-3}) \bmod m, \quad (\text{A.1a})$$

$$R_n = \frac{x_n}{m}, \quad (\text{A.1b})$$

où $\bmod m$ désigne *modulo m*. La série de nombres aléatoires compris entre 0 et 1 est donnée par la suite $\{R_n\}$. Les paramètres m_1 , m_2 , a_{11} , a_{12} , a_{13} , a_{21} , a_{22} et a_{23} , des deux générateurs combinés, sont fournis par l'auteur et ont été calculés de manière à optimiser les performances du générateur global. Pour le MRG32k3a, les valeurs de ces paramètres sont les suivantes :

$$m_1 = 2^{32} - 209, \quad a_{11} = 0, \quad a_{12} = 1403580, \quad a_{13} = -810728, \quad (\text{A.2})$$

$$m_2 = 2^{32} - 22853, \quad a_{21} = 527612, \quad a_{22} = 0, \quad a_{23} = -1370589. \quad (\text{A.3})$$

La période de ce générateur est donnée par :

$$\frac{(m_1^3 - 1)(m_2^3 - 1)}{2} \approx 2^{191} \approx 3.10^{57}. \quad (\text{A.4})$$

Cette période est suffisante pour nos applications puisqu'il faut que le carré de la quantité de nombres aléatoires générés soit très petit devant la période pour utiliser correctement un générateur de nombres aléatoires. Cela signifie qu'il ne faut pas générer plus de 10^{28} nombres aléatoires avec ce générateur. Or, nos applications nécessitent la génération d'environ 10^{10} nombres aléatoires.

L'utilisateur doit initialiser les valeurs de x_{10} , x_{11} , x_{12} , x_{20} , x_{21} et x_{22} par des entiers positifs inférieurs à m_1 pour les trois premiers et inférieurs à m_2 pour les trois suivants.

Annexe B

Etablissement des lois de tirage au sort des directions initiales des chemins optiques

B.1 Chemin optique partant d'une paroi

La probabilité $\mathcal{P}(\vec{\Delta})$ qu'un chemin optique quitte un élément de paroi dS , à la température T , dans la direction $\vec{\Delta}$, caractérisée par les angles θ et φ , est donnée par la relation :

$$\mathcal{P}(\vec{\Delta}) = f(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \frac{\varepsilon_{w\nu}(\theta, \varphi, T) L_\nu^0(T) d\nu dS \cos \theta d\Omega}{\int_{2\pi(\cos \theta > 0)} \varepsilon_{w\nu}(\theta, \varphi, T) L_\nu^0(T) d\nu dS \cos \theta d\Omega}, \quad (\text{B.1a})$$

$$= \frac{\varepsilon_{w\nu}(\theta, \varphi, T) \cos \theta d\Omega}{\int_{2\pi(\cos \theta > 0)} \varepsilon_{w\nu}(\theta, \varphi, T) \cos \theta d\Omega}, \quad (\text{B.1b})$$

où $f(\theta, \varphi)$ désigne la PDF jointe de θ et φ , θ l'angle entre la direction $\vec{\Delta}$ et la normale à la paroi et $d\Omega$ l'angle solide élémentaire centré autour de la direction $\vec{\Delta}$. $dS \cos \theta$ représente la surface apparente qui est vue depuis un point situé dans l'angle solide $d\Omega$ donné par :

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (\text{B.2})$$

Comme θ et φ sont statistiquement indépendants, la PDF $f(\theta, \varphi)$ est égale au produit des PDF $f_\theta(\theta)$ et $f_\varphi(\varphi)$, soit :

$$f(\theta, \varphi) = f_\theta(\theta) f_\varphi(\varphi). \quad (\text{B.3})$$

Si on suppose que l'émissivité de la paroi $\varepsilon_{w\nu}$ est isotrope, soit :

$$\varepsilon_{w\nu}(\theta, \varphi, T) = \varepsilon_{w\nu}(T), \quad (\text{B.4})$$

la probabilité $\mathcal{P}(\vec{\Delta})$ peut alors s'écrire :

$$\mathcal{P}(\vec{\Delta}) = f_{\theta}(\theta)d\theta f_{\varphi}(\varphi)d\varphi = \frac{\cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta}, \quad (\text{B.5a})$$

$$= 2 \cos \theta \sin \theta d\theta \frac{1}{2\pi} d\varphi. \quad (\text{B.5b})$$

On en déduit l'expression des fonctions de distribution cumulées :

$$g_{\theta}(\theta) = \int_0^{\theta} f_{\theta}(t)dt = \int_0^{\theta} 2 \cos t \sin t dt = 1 - \cos^2 \theta, \quad (\text{B.6a})$$

$$g_{\varphi}(\varphi) = \int_0^{\varphi} f_{\varphi}(t)dt = \int_0^{\varphi} \frac{1}{2\pi} dt = \frac{\varphi}{2\pi}, \quad (\text{B.6b})$$

qui prennent des valeurs comprises entre 0 et 1.

Le tirage au sort de la direction d'émission $\vec{\Delta}$ consiste à tirer au sort une valeur des fonctions $g_{\theta}(\theta)$ et $g_{\varphi}(\varphi)$. Soient R_{θ} et R_{φ} , deux nombres aléatoires, tirés au sort uniformément dans l'intervalle $[0; 1]$, représentant respectivement une valeur possible des fonctions $g_{\theta}(\theta)$ et $g_{\varphi}(\varphi)$. Les angles θ et φ s'expriment en fonction de ces deux nombres aléatoires par les relations :

$$\theta = \arccos(\sqrt{1 - R_{\theta}}), \quad (\text{B.7a})$$

$$\varphi = 2\pi R_{\varphi}. \quad (\text{B.7b})$$

Comme R_{θ} est un nombre aléatoire uniformément réparti dans l'intervalle $[0; 1]$, il en est de même pour $1 - R_{\theta}$. Les relations qui sont utilisées pour déterminer les angles θ et φ , caractérisant la direction $\vec{\Delta}$, sont donc les suivantes :

$$\theta = \arccos(\sqrt{R_{\theta}}), \quad (\text{B.8a})$$

$$\varphi = 2\pi R_{\varphi}. \quad (\text{B.8b})$$

B.2 Chemin optique partant d'un volume

La probabilité $\mathcal{P}(\vec{\Delta})$ qu'un chemin optique sorte d'un élément de volume dV , à la température T , dans la direction $\vec{\Delta}$, caractérisée par les angles θ et φ , est donnée par la relation :

$$\mathcal{P}(\vec{\Delta}) = f_{\theta}(\theta)d\theta f_{\varphi}(\varphi)d\varphi = \frac{\kappa_{\nu} L_{\nu}^0(T) d\nu dV d\Omega}{\int_{4\pi} \kappa_{\nu} L_{\nu}^0(T) d\nu dV d\Omega}, \quad (\text{B.9a})$$

$$= \frac{\sin \theta}{\int_0^{\pi} \sin \theta d\theta} d\theta \frac{1}{2\pi} d\varphi, \quad (\text{B.9b})$$

$$= \frac{\sin \theta}{2} d\theta \frac{1}{2\pi} d\varphi. \quad (\text{B.9c})$$

On en déduit l'expression des fonctions de distribution cumulées :

$$g_{\theta}(\theta) = \frac{1 - \cos \theta}{2}, \quad (\text{B.10a})$$

$$g_{\varphi}(\varphi) = \frac{\varphi}{2\pi}. \quad (\text{B.10b})$$

Il découle de ces relations celles des angles θ et φ :

$$\theta = \arccos(1 - 2R_{\theta}), \quad (\text{B.11a})$$

$$\varphi = 2\pi R_{\varphi}, \quad (\text{B.11b})$$

où R_{θ} et R_{φ} sont des nombres aléatoires tirés au sort uniformément dans l'intervalle $[0 ; 1]$.

Annexe C

Cas de validation

C.1 Présentation du cas du mur plan

On considère un milieu semi-transparent non diffusant compris entre deux parois planes parallèles infinies distantes de L . Ce milieu est caractérisé par des champs de température, de concentrations et de pression ne dépendant que de la direction Ox normale aux parois considérées (voir figure C.1). Les parois sont isothermes et ont des propriétés radiatives isotropes. On suppose que la propagation du rayonnement est rectiligne (on néglige les hétérogénéités spatiales de l'indice optique du milieu). Dans ces conditions, les flux radiatifs et la puissance radiative volumique sont donnés par des expressions analytiques qui ne dépendent que de x .

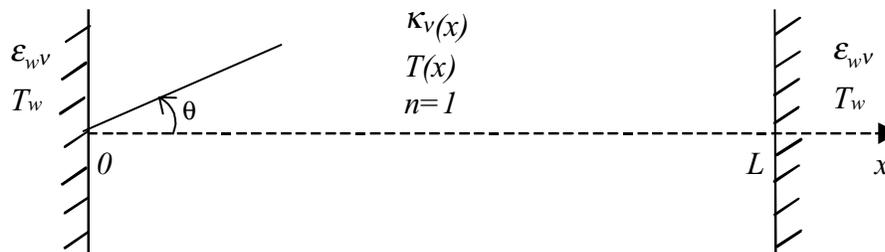


Figure C.1: Géométrie monodimensionnelle du mur plan

Si on considère de plus, comme indiqué sur la figure C.1, que les deux parois ont des températures T_w et des émissivités $\epsilon_{w\nu}$ égales et que les champs de température $T(x)$ et de coefficient d'absorption monochromatique $\kappa_\nu(x)$ sont symétriques par rapport au plan $x = L/2$, alors les flux radiatifs pariétaux sont égaux sur les deux parois et, en particulier, les flux radiatifs incident et partant. Si de plus, on suppose que l'indice optique n du milieu est égal à 1, on montre [23] que l'expression du flux radiatif surfacique pariétal est alors :

$$\phi^R = \phi^R(0) = \phi^R(L) = \int_0^\infty [\phi_\nu^i - \phi_\nu^p] d\nu, \quad (\text{C.1a})$$

$$= \int_0^\infty \left[\frac{\phi_\nu^p - \epsilon_{w\nu} \pi L_\nu^0(T_w)}{1 - \epsilon_{w\nu}} - \phi_\nu^p \right] d\nu, \quad (\text{C.1b})$$

où ϕ_ν^p est le flux surfacique monochromatique partant d'une paroi :

$$\phi_\nu^p = \frac{1}{1 - [(1 - \varepsilon_{w\nu})\tau_\nu^{0L}]^2} \left\{ \varepsilon_{w\nu}\pi L_\nu^0(T_w) + (1 - \varepsilon_{w\nu}) \left[\int_0^L \pi L_\nu^0(T(x)) \frac{\partial \tau_\nu^{0x}}{\partial x} dx \right. \right. \\ \left. \left. + \tau_\nu^{0L} \left(\varepsilon_{w\nu}\pi L_\nu^0(T_w) + (1 - \varepsilon_{w\nu}) \int_0^L \pi L_\nu^0(T(x)) \frac{\partial \tau_\nu^{0x}}{\partial x} dx \right) \right] \right\}. \quad (\text{C.2})$$

Dans cette équation, τ_ν^{0x} désigne la transmittivité monochromatique hémisphérique, de la tranche de gaz comprise entre 0 et x , dont l'expression est :

$$\tau_\nu^{0x} = 2E_3 \left[\int_0^x \kappa_\nu(x') dx' \right]. \quad (\text{C.3})$$

Les fonctions intégro-exponentielles $E_n(t)$ sont définies de la façon suivante :

$$E_n(t) = \int_0^1 \mu^{n-2} e^{-\frac{t}{\mu}} d\mu. \quad (\text{C.4})$$

On fait intervenir ces fonctions car elles présentent l'avantage d'être tabulées. Dans l'équation (C.3), μ est égal à $\cos\theta$ (voir figure C.1).

Sous les mêmes hypothèses, on montre également [23] que la puissance radiative volumique s'écrit :

$$P^R(x) = \int_0^\infty \kappa_\nu(x) \phi_\nu^p \left\{ 2E_2 \left[\int_0^x \kappa_\nu(x') dx' \right] + 2E_2 \left[\int_x^L \kappa_\nu(x') dx' \right] \right\} d\nu \\ + \pi \int_0^\infty \kappa_\nu(x) \int_0^x \kappa_\nu(x') L_\nu^0(T(x')) 2E_1 \left[\int_{x'}^x \kappa_\nu(x'') dx'' \right] dx' d\nu \quad (\text{C.5}) \\ + \pi \int_0^\infty \kappa_\nu(x) \int_x^L \kappa_\nu(x') L_\nu^0(T(x')) 2E_1 \left[\int_x^{x'} \kappa_\nu(x'') dx'' \right] dx' d\nu \\ - 4\pi \int_0^\infty \kappa_\nu(x) L_\nu^0(T(x)) d\nu.$$

On constate que le flux radiatif surfacique pariétal et la puissance radiative volumique s'écrivent sous la forme d'expressions analytiques complexes faisant intervenir de nombreuses intégrales. Le calcul de ces grandeurs est donc numérique. Par conséquent, on dispose d'une solution semi-analytique. Dans le chapitre 2, cette solution est appelée « référence solution ».

C.2 Configuration choisie

Bien que le problème considéré soit monodimensionnel, nous avons testé les trois variantes de la méthode de Monte Carlo en le traitant avec une géométrie tridimensionnelle parallélépipédique. Pour simuler les parois infinies, les quatre faces latérales du parallélépipède ont des conditions limites de type « symétrie » (voir figure C.2) : chaque chemin optique atteignant l'une de ces quatre faces y subit une réflexion spéculaire totale, comme sur un miroir parfait.

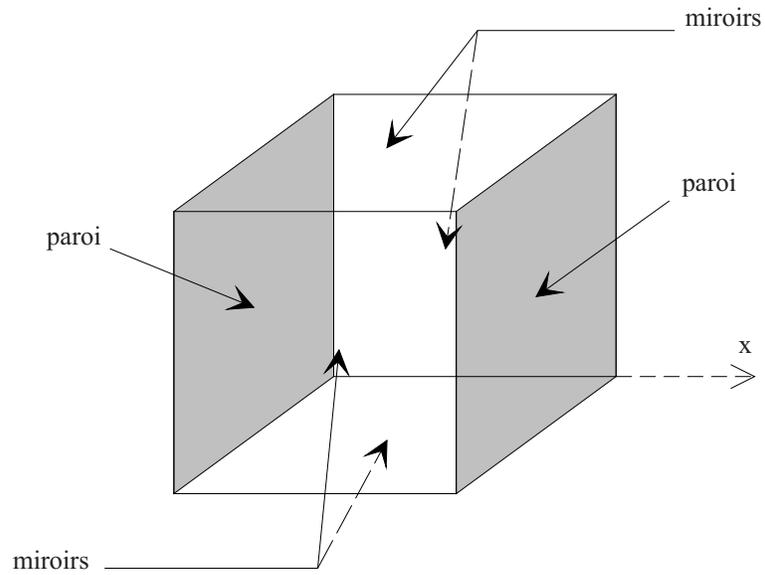


Figure C.2: Géométrie tridimensionnelle choisie

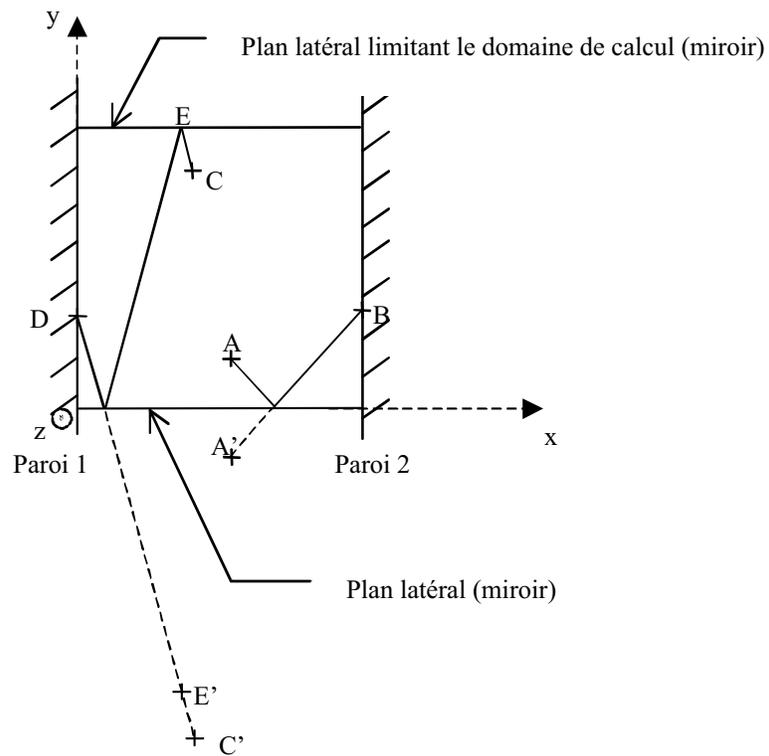


Figure C.3: Rôle des miroirs sur les plans latéraux

De cette façon, les chemins optiques allant de A à B et de C à D jouent le même rôle, du point de vue radiatif, que ceux allant de A' à B et de C' à D (voir figure C.3). Ainsi, malgré la limitation du domaine de calcul par les faces latérales, l'application des conditions limites de type « symétrie » rend le problème traité équivalent à celui d'un milieu semi-transparent compris entre deux parois infinies dans les directions y et z . Les conditions aux limites appliquées sur les parois (faces perpendiculaires à la direction Ox , voir figure C.2) tiennent compte de l'émission, de l'absorption et de la réflexion isotrope du rayonnement.

Comme le problème est monodimensionnel, une discrétisation suivant la seule direction Ox suffit pour obtenir la solution. Cependant, afin de tester l'aptitude du code à construire les chemins optiques dans un maillage tridimensionnel, le parallélépipède a été discrétisé dans les trois directions. Soient N_x , N_y et N_z le nombre de discrétisations respectivement dans les directions x , y et z . Chaque section (à x fixé) du maillage comporte $N_y \times N_z$ mailles donnant lieu à autant de valeurs de la puissance radiative volumique dissipée. De la même façon, $N_y \times N_z$ valeurs du flux radiatif pariétal sont obtenues sur chaque paroi. On peut donc, pour chaque section (à x fixé) et chaque paroi, calculer la valeur moyenne et l'écart type, sur $N_y \times N_z$ valeurs, de la puissance radiative volumique et du flux radiatif surfacique. Par conséquent, les résultats en flux et en puissance sont présentés sous la forme de ces deux grandeurs statistiques dans les chapitres 2 et 3.

Annexe D

Justification de l'approche hybride

L'objectif de cette annexe est d'établir que l'approche hybride proposée (diffusion traitée stochastiquement et absorption traitée de façon déterministe) est consistante avec l'une des formes de l'équation décrivant les transferts radiatifs avec diffusion. Pour cela, considérons un milieu semi-transparent émetteur, absorbant, diffusant, hétérogène et anisotherme. Soit un volume V_i de ce milieu émettant radiativement la puissance totale P_i^e donnée par les équations (2.7b) et (2.7c). La puissance spectrale émise par un élément de volume dV_i (centré autour du point source B) dans la direction $\vec{\Delta}$ (autour de laquelle est centré l'angle solide élémentaire $d\Omega_i$) et transmise jusqu'au point F_M est par définition égale à :

$$P_\nu(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M) = \kappa_{i\nu} L_\nu^0(T_i) dV_i d\Omega_i d\nu \exp\left(-\sum_{m=1}^M \beta_{m\nu} l_m\right) \prod_{h=1}^{N_r} (1 - \varepsilon_{wh\nu}), \quad (\text{D.1})$$

où $\beta_{m\nu}$ est le coefficient d'extinction (absorption + diffusion) de la maille m traversée par le chemin optique reliant le point B au point F_M . M et N_r désignent respectivement le nombre de mailles traversées et le nombre de réflexions (sur des parois d'émissivité $\varepsilon_{wh\nu}$) subies par le chemin optique entre les points B et F_M . Nous allons montrer que l'algorithme Monte Carlo décrit dans la section 3.1 satisfait cette relation.

D'après cet algorithme, l'estimation statistique de cette puissance est donnée par la relation :

$$\widetilde{P}_\nu(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M) = \sum_{n=1}^{\widetilde{N}_{i\nu}(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M)} \frac{P_i^e}{N_i} \exp\left(-\sum_{m=1}^M \kappa_{m\nu} l_m\right) \prod_{h=1}^{N_r} (1 - \varepsilon_{wh\nu}), \quad (\text{D.2a})$$

$$= \widetilde{N}_{i\nu}(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M) \frac{P_i^e}{N_i} \exp\left(-\sum_{m=1}^M \kappa_{m\nu} l_m\right) \prod_{h=1}^{N_r} (1 - \varepsilon_{wh\nu}), \quad (\text{D.2b})$$

où $\widetilde{N}_{i\nu}(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M)$ représente le nombre de chemins optiques générés aléatoirement depuis le volume V_i , caractérisés par le nombre d'onde ν , le point source B et la direction initiale $\vec{\Delta}$, et n'ayant pas changé de direction par diffusion entre les points B et F_M . Ces chemins optiques ont en revanche changé de direction par réflexions sur les parois si N_r est différent de zéro.

Lorsque N_i est suffisamment grand, $\widetilde{N}_{i\nu}(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M)$ devient égal au produit de N_i par

les probabilités \mathcal{P} associées aux différents tirages au sort, soit :

$$N_{i\nu}(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M) = N_i \mathcal{P}(B) \mathcal{P}(\vec{\Delta}) \mathcal{P}(\nu) \mathcal{P} \left(\sum_{m=1}^M \sigma_{m\nu} l_m < E_d \right). \quad (\text{D.3})$$

La dernière probabilité de l'équation (D.3) est la probabilité pour que le chemin optique ne subisse aucun changement de direction par diffusion entre les points B et F_M . En utilisant les équations (2.7a) et (2.7b) pour expliciter les probabilités de tirer au sort ν , B et $\vec{\Delta}$ et l'équation (3.5), la relation (D.3) devient :

$$N_{i\nu}(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M) = N_i \frac{dV_i}{V_i} \frac{d\Omega_i}{4\pi} \frac{\kappa_{i\nu} L_\nu^0(T_i) d\nu}{\int_0^{+\infty} \kappa_{i\nu} L_\nu^0(T_i) d\nu} \mathcal{P} \left(R_d < \exp \left(- \sum_{m=1}^M \sigma_{m\nu} l_m \right) \right), \quad (\text{D.4a})$$

$$= \frac{N_i}{P_i^e} \kappa_{i\nu} L_\nu^0(T_i) dV_i d\Omega_i d\nu \exp \left(- \sum_{m=1}^M \sigma_{m\nu} l_m \right). \quad (\text{D.4b})$$

En combinant les équations (D.2b), (D.4b) et (D.1), il vient :

$$\lim_{N_i \rightarrow +\infty} \widetilde{P}_\nu(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M) = P_\nu(\vec{\Delta}, B \rightarrow F_M). \quad (\text{D.5})$$

L'algorithme Monte Carlo, sur lequel s'appuie les trois méthodes développées, tend donc vers la bonne solution puisque l'expression (D.2b) converge vers la formule (D.1) à la limite des grands nombres. Ceci montre qu'il est correct de traiter la diffusion de manière stochastique et l'absorption de façon déterministe dans un algorithme Monte Carlo car l'absorption et la diffusion sont deux événements statistiquement indépendants.

Bibliographie

- [1] Y. JOUMANI. *Transferts radiatifs dans les moteurs à propergol solide*. Thèse de doctorat, Université de Valenciennes et du Hainaut Cambresis (2001).
- [2] R. DUVAL. *Transferts radiatifs dans les moteurs à propergol solide*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (soutenance prévue en mars 2002).
- [3] B. ZAMUNER et F. DUPOIRIEUX. *Numerical simulation of soot formation in a turbulent flame with a Monte Carlo PDF approach and detailed chemistry*. *Combustion Science and Technology*, 158 (2000), pp. 407–438.
- [4] E. VARIN. *Etude et développement du modèle de combustion turbulente PEUL - Application à la prédiction de la formation des suies dans les foyers aéronautiques*. Thèse de doctorat, Université de Rouen (1998).
- [5] A. DE LATAILLADE. *Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans des systèmes en combustion*. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, France (2001).
- [6] R. S. BARLOW, N. S. A. SMITH, J.-Y. CHEN et R. W. BILGER. *Nitric oxide formation in dilute hydrogen jet flames : isolation of the effects of radiation and turbulence-chemistry submodels*. *Combustion and Flame*, 117 (1999), pp. 4–31.
- [7] M. D. SMOOKE, C. S. MCENALLY, L. D. PFEFFERLE, R. J. HALL et M. B. COLKET. *Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame*. *Combustion and Flame*, 117 (1999), pp. 117–139.
- [8] R. SAID, A. GARO et R. BORGHI. *Soot formation modeling for turbulent flames*. *Combustion and Flame*, 108 (1997), pp. 71–86.
- [9] Y. R. SIVATHANU et J. P. GORE. *Effects of surface properties on radiative transfer in a cylindrical tube with a nonparticipating media*. *Journal of Heat Transfer*, 119 (1997), pp. 495–501.
- [10] Y. R. SIVATHANU et J. P. GORE. *Coupled radiation and soot kinetics calculations in laminar acetylene/air diffusion flames*. *Combustion and Flame*, 97 (1994), pp. 161–172.
- [11] T. DAGUSE, T. CROONENBROEK, J. C. ROLON, N. DARABIHA et A. SOUFIANI. *Study of radiative effects on laminar counterflow $H_2/O_2/N_2$ diffusion flames*. *Combustion and Flame*, 106 (1996), pp. 271–287.
- [12] T. DAGUSÉ. *Effets du rayonnement thermique sur la structure de flammes laminaires de diffusion ou de prémélange en phase gazeuse*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (1996).

- [13] J. W. HARTICK, M. TACKE, G. FRÜCHTEL, E. P. HASSEL et J. JANICKA. *Interaction of turbulence and radiation in confined diffusion flames*. Dans *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1996).
- [14] K. J. YOUNG et J. B. MOSS. *Modeling sooting turbulent jet flames using an extended flamelet technique*. *Combustion Science and Technology*, 105 (1995), pp. 33–53.
- [15] C. R. KAPLAN, S. W. BAEK, E. S. ORAN et J. L. ELLZEY. *Dynamics of a strongly radiating unsteady ethylene jet diffusion flame*. *Combustion and Flame*, 96 (1994), pp. 1–21.
- [16] R. J. HALL et A. VRANOS. *Efficient calculations of gas radiation from turbulent flames*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 37 (1994), pp. 2745–2750.
- [17] A. VRANOS et R. J. HALL. *Influence of radiative loss on nitric oxide formation in counterflow diffusion flames at high pressure*. *Combustion and Flame*, 93 (1993), pp. 230–238.
- [18] J. P. GORE et G. M. FAETH. *Structure and radiation properties of luminous turbulent acetylene/air diffusion flames*. *Journal of Heat Transfer*, 110 (1988), pp. 173–181.
- [19] J. P. GORE et G. M. FAETH. *Structure and spectral radiation properties of turbulent ethylene/air diffusion flames*. Dans *Twenty-first Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1986).
- [20] S. MAZUMDER et M. F. MODEST. *A probability density function approach to modeling turbulence-radiation interactions in nonluminous flames*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42 (1999), pp. 971–991.
- [21] W. KREBS, R. KOCH, B. GANZ, L. EIGENMANN et S. WITTIG. *Effect of temperature and concentration fluctuations on radiative heat transfer in turbulent flames*. Dans *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1996).
- [22] B. R. ADAMS et P. J. SMITH. *Modeling effects of soot and turbulence-radiation coupling on radiative transfer in turbulent gaseous combustion*. *Combustion Science and Technology*, 109 (1995), pp. 121–140.
- [23] J. TAINE et J.-P. PETIT. *Transferts thermiques*. 3^e éd. Dunod (to be published).
- [24] R. SIEGEL et J. R. HOWELL. *Thermal radiation heat transfer*. 3^e éd. Taylor and Francis, Washington, DC (1992).
- [25] H. C. HOTTEL et A. F. SAROFIM. *Radiative transfer*. McGraw-Hill, New York (1967).
- [26] M. F. MODEST. *Radiative heat transfer*. McGraw-Hill, New York (1993).
- [27] M. Q. BREWSTER. *Thermal radiative transfer and properties*. John Wiley and Sons, New York (1992).
- [28] J. TAINE et A. SOUFIANI. *Gas IR radiative properties: from spectroscopic data to approximate models*. *Advances in Heat Transfer*, 33 (1999), pp. 295–414.
- [29] V. GOUTIÈRE, F. LIU et A. CHARETTE. *An assessment of real-gas modelling in 2D enclosures*. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64 (2000), pp. 299–326.

-
- [30] L. PIERROT, A. SOUFIANI et J. TAINE. *Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in H_2O , CO_2 , and H_2O-CO_2 mixtures at high temperature*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 62 (1999), pp. 523–548.
- [31] J. TAINE, A. SOUFIANI, P. RIVIÈRE et M.-Y. PERRIN. *Recent developments in modeling the infrared radiative properties of hot gases*. Dans *Eleventh International Heat Transfer Conference*, tm. 1. Taylor and Francis (1998).
- [32] N. LALLEMANT, A. SAYRE et R. WEBER. *Evaluation of emissivity correlations for $H_2O-CO_2-N_2$ /air mixtures and coupling with solution methods of the radiative transfer equation*. Progress in Energy and Combustion Science, 22 (1996), pp. 543–574.
- [33] T. H. SONG. *Comparison of engineering models of nongray behavior of combustion products*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 36 (1993), pp. 3975–3982.
- [34] R. VISKANTA et M. P. MENGÜÇ. *Radiation heat transfer in combustion systems*. Progress in Energy and Combustion Science, 13 (1987), pp. 97–160.
- [35] A. SOUFIANI et E. DJAVDAN. *A comparison between weighted-sum-of-gray-gases and statistical narrow-band radiation models for combustion applications*. Combustion and Flame, 97 (1994), pp. 240–250.
- [36] H. BEDIR, J. S. T' IEN et H. S. LEE. *Comparison of different radiation treatments for a one-dimensional diffusion flame*. Combustion Theory and Modelling, 1 (1997), pp. 395–404.
- [37] F. LIU, G. J. SMALLWOOD et O. L. GÜLDER. *Application of statistical narrowband model to three-dimensional absorbing-emitting-scattering media*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 13 (1999), pp. 285–291.
- [38] F. LIU, O. L. GÜLDER et G. J. SMALLWOOD. *Non-grey gas radiative transfer analyses using the statistical narrow-band model*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 41 (1998), pp. 2227–2236.
- [39] L. PIERROT. *Développement, étude critique et validation de modèles de propriétés radiatives infrarouges de CO_2 et H_2O à haute température. Applications au calcul des transferts dans des chambres aéronautiques et à la télédétection*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (1997).
- [40] A. SOUFIANI et J. TAINE. *Spectrally correlated radiative transfer in real 3D axisymmetrical systems*. Dans *International Symposium on Transport Phenomena*. Begell House (1993).
- [41] L. ZHANG, A. SOUFIANI et J. TAINE. *Spectral correlated and non-correlated radiative transfer in a finite axisymmetric system containing an absorbing and emitting real gas-particle mixture*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 31 (1988), pp. 2261–2272.
- [42] W. MALKMUS. *Random Lorentz band model with exponential-tailed S^{-1} line intensity distribution function*. Journal of the Optical Society of America, 57 (1967), pp. 323–329.
- [43] R. GOODY. *A statistical model for water vapour absorption*. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 78 (1952), pp. 165–169.
- [44] R. M. GOODY et Y. L. YUNG. *Atmospheric radiation*. 2^e édn. Oxford University Press (1989).
- [45] S. J. YOUNG. *Nonisothermal band model theory*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 18 (1977), pp. 1–28.

- [46] D. K. EDWARDS et A. BALAKRISHNAN. *Thermal radiation by combustion gases*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 16 (1973), pp. 25–40.
- [47] D. K. EDWARDS. *Molecular gas band radiation*. Advances in Heat Transfer, 12 (1976), pp. 115–193.
- [48] P. RIVIÈRE, A. SOUFIANI et J. TAINÉ. *Correlated- k and fictitious gas methods for H_2O near $2.7 \mu m$* . Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 48 (1992), pp. 187–203.
- [49] P. RIVIÈRE, A. SOUFIANI et J. TAINÉ. *Correlated- k fictitious gas model for H_2O infrared radiation in the Voigt regime*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 53 (1995), pp. 335–346.
- [50] G. A. DOMOTO. *Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases: the inverse transmission function*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 14 (1974), pp. 935–942.
- [51] A. A. LACIS et V. OINAS. *A description of the correlated k distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres*. Journal of Geophysical Research, 96 (1991), pp. 9027–9063.
- [52] R. GOODY, R. WEST, L. CHEN et D. CRISP. *The correlated- k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 42 (1989), pp. 539–550.
- [53] P. RIVIÈRE, D. SCUTARU, A. SOUFIANI et J. TAINÉ. *A new CK data basis suitable from 300 to 2500 K for spectrally correlated radiative transfer in CO_2 - H_2O - N_2 gas mixtures*. Dans *Tenth International Heat Transfer Conference*, tm. 2. Taylor and Francis, Brighton, UK (1994).
- [54] F. LIU, G. J. SMALLWOOD et O. L. GÜLDER. *Application of the statistical narrow-band correlated- k method to low-resolution spectral intensity and radiative heat transfer calculations - effects of the quadrature scheme*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 43 (2000), pp. 3119–3135.
- [55] F. LIU, G. J. SMALLWOOD et O. L. GÜLDER. *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*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 68 (2001), pp. 401–417.
- [56] A. DE LATAILLADE, J.-L. DUFRESNE, M. EL HAFI, V. EYMET et R. FOURNIER. *A net exchange Monte Carlo approach to radiation in optically thick systems*. accepted for publication in Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (2002).
- [57] O. J. KIM et T. H. SONG. *Implementation of the weighted sum of gray gases model to a narrow band: application and validity*. Numerical Heat Transfer, Part B, 30 (1996), pp. 453–468.
- [58] S. S. YANG et T. H. SONG. *An improved WSGGM-based narrow band model for the CO_2 $4.3 \mu m$ band*. International Journal of Thermal Science, 38 (1999), pp. 228–238.
- [59] O. J. KIM et T. H. SONG. *Data base of WSGGM-based spectral model for radiation properties of combustion products*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 64 (2000), pp. 379–394.
- [60] O. MARIN et R. O. BUCKIUS. *Wideband correlated- k method applied to absorbing, emitting, and scattering media*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 10 (1996), pp. 364–371.

-
- [61] O. MARIN et R. O. BUCKIUS. *Wide band correlated-k approach to thermal radiative transport in nonhomogeneous media*. Journal of Heat Transfer, 119 (1997), pp. 719–729.
- [62] K. C. TANG et M. Q. BREWSTER. *K-distribution analysis of gas radiation with nongray, emitting, absorbing, and anisotropic scattering particles*. Journal of Heat Transfer, 116 (1994), pp. 980–985.
- [63] K. C. TANG et M. Q. BREWSTER. *Analysis of molecular gas radiation : real gas property effects*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 13 (1999), pp. 460–466.
- [64] M. F. MODEST. *The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer*. Journal of Heat Transfer, 113 (1991), pp. 650–657.
- [65] W. L. GROSSHANDLER. *Radiative heat transfer in nonhomogeneous gases : a simplified approach*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 23 (1980), pp. 1447–1459.
- [66] M. K. DENISON et B. W. WEBB. *A spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers*. Journal of Heat Transfer, 115 (1993), pp. 1004–1012.
- [67] M. K. DENISON et B. W. WEBB. *The spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media*. Journal of Heat Transfer, 117 (1995), pp. 359–365.
- [68] M. K. DENISON et B. W. WEBB. *The spectral-line weighted-sum-of-gray-gases model for H_2O/CO_2 mixtures*. Journal of Heat Transfer, 117 (1995), pp. 788–792.
- [69] L. PIERROT, P. RIVIÈRE, A. SOUFIANI et J. TAINE. *A fictitious-gas-based absorption distribution function global model for radiative transfer in hot gases*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 62 (1999), pp. 609–624.
- [70] P. RIVIÈRE, A. SOUFIANI, M.-Y. PERRIN, H. RIAD et A. GLEIZES. *Air mixture radiative property modelling in the temperature range 10000-40000K*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 56 (1996), pp. 29–45.
- [71] D. LAREDO et D. W. NETZER. *The dominant effect of alumina on nearfield plume radiation*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 50 (1993), pp. 511–530.
- [72] K. C. TANG et M. Q. BREWSTER. *Numerical analysis of radiative heat transfer in an aluminum distributed combustion region*. Numerical Heat Transfer, Part A, 22 (1992), pp. 323–342.
- [73] D. L. PARRY et M. Q. BREWSTER. *Optical constants of Al_2O_3 smoke in propellant flames*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 5 (1991), pp. 142–149.
- [74] D. V. WALTERS et R. O. BUCKIUS. *Normal spectral emission from nonhomogeneous mixtures of Al_2O_3 particulate*. Journal of Heat Transfer, 113 (1991), pp. 174–184.
- [75] D. K. EDWARDS et D. S. BABIKIAN. *Radiation from a nongray scattering, emitting and absorbing solid rocket motor plume*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 4 (1990), pp. 446–453.
- [76] W. L. KONOPKA, R. A. REED et V. S. CALIA. *Measurements of infrared optical properties of Al_2O_3 rocket particles*. Progress in Astronautics and Aeronautics, 91 (1984), pp. 180–197.
- [77] A. B. PLUCHINO et D. E. MASTURZO. *Emissivity of Al_2O_3 particles in a rocket plume*. AIAA Journal, 19 (1981), pp. 1234–1237.

- [78] E. J. MULARZ et M. C. YUEN. *An experimental investigation of radiative properties of aluminium oxide particles*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 12 (1972), pp. 1553–1568.
- [79] C. E. CHOI et S. W. BAEK. *Numerical analysis of a spray combustion with nongray radiation using weighted sum of gray gases model*. Combustion Science and Technology, 115 (1996), pp. 297–315.
- [80] J. ABRAHAM et V. MAGI. *Application of the discrete ordinates method to compute radiant heat loss in a diesel engine*. Numerical Heat Transfer, Part A, 31 (1997), pp. 597–610.
- [81] C. F. BOHREN et D. R. HUFFMAN. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley, New York (1983).
- [82] D. BAILLIS et J.-F. SACADURA. *Thermal radiation properties of dispersed media: theoretical prediction and experimental characterization*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 67 (2000), pp. 327–363.
- [83] B. L. DROLEN et C. L. TIEN. *Independent and dependent scattering in packed-sphere systems*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1 (1987), pp. 63–68.
- [84] K. C. SMYTH et C. R. SHADDIX. *The elusive history of $\tilde{m} = 1.57 - 0.56i$ for the refractive index of soot*. Combustion and Flame, 107 (1996), pp. 314–320.
- [85] W. H. DALZELL et A. F. SAROFIM. *Optical constants of soot and their application to heat-flux calculations*. Journal of Heat Transfer, 91 (1969), pp. 100–104.
- [86] S. C. LEE et C. L. TIEN. *Optical constants of soot in hydrocarbon flames*. Dans *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1981).
- [87] C. E. BATTEN. *Spectral optical constants of soots from polarized angular reflectance measurements*. Applied Optics, 24 (1985), pp. 1193–1199.
- [88] H. CHANG et T. T. CHARALAMPOPOULOS. *Determination of the wavelength dependence of refractive indices of flame soot*. Proc. Royal Society London, Ser. A, 430 (1990), pp. 577–591.
- [89] T. T. CHARALAMPOPOULOS et H. CHANG. *In situ optical properties of soot particles in the wavelength range from 340 nm to 600 nm*. Combustion Science and Technology, 59 (1988), pp. 401–421.
- [90] M. BEN HAMADI, P. VERVISCH et A. COPPALLE. *Radiation properties of soot from premixed flat flame*. Combustion and Flame, 68 (1987), pp. 57–67.
- [91] Z. G. HABIB et P. VERVISCH. *On the refractive index of soot at flame temperature*. Combustion Science and Technology, 59 (1988), pp. 261–274.
- [92] S. S. KRISHNAN, K. C. LIN et G. M. FAETH. *Optical properties in the visible of overfire soot in large buoyant turbulent diffusion flames*. Journal of Heat Transfer, 122 (2000), pp. 517–524.
- [93] J. S. WU, S. S. KRISHNAN et G. M. FAETH. *Refractive indices at visible wavelengths of soot emitted from buoyant turbulent diffusion flames*. Journal of Heat Transfer, 119 (1997), pp. 230–237.
- [94] U. O. KÖYLÜ et G. M. FAETH. *Spectral extinction coefficients of soot aggregates from turbulent diffusion flames*. Journal of Heat Transfer, 118 (1996), pp. 415–421.

-
- [95] T. L. FARIAS, M. G. CARVALHO, U. O. KÖYLÜ et G. M. FAETH. *Computational evaluation of approximate Rayleigh-Debye-Gans/fractal-aggregate theory for the absorption and scattering properties of soot*. Journal of Heat Transfer, 117 (1995), pp. 152–159.
- [96] Y. R. SIVATHANU, J. P. GORE, J. M. JANSSEN et D. W. SENSER. *A study of in situ specific absorption coefficients of soot particles in laminar flat flames*. Journal of Heat Transfer, 115 (1993), pp. 653–658.
- [97] U. O. KÖYLÜ et G. M. FAETH. *Structure of overfire soot in buoyant turbulent diffusion flames at long residence times*. Combustion and Flame, 89 (1992), pp. 140–156.
- [98] U. O. KÖYLÜ et G. M. FAETH. *Optical properties of overfire soot in buoyant turbulent diffusion flames at long residence times*. Journal of Heat Transfer, 116 (1994), pp. 152–159.
- [99] U. O. KÖYLÜ et G. M. FAETH. *Optical properties of soot in buoyant laminar diffusion flames*. Journal of Heat Transfer, 116 (1994), pp. 971–979.
- [100] G. M. FAETH et U. O. KÖYLÜ. *Soot morphology and optical properties in nonpremixed turbulent flame environments*. Combustion Science and Technology, 108 (1995), pp. 207–229.
- [101] U. O. KÖYLÜ, G. M. FAETH, T. L. FARIAS et M. G. CARVALHO. *Fractal and projected structure properties of soot aggregates*. Combustion and Flame, 100 (1995), pp. 621–633.
- [102] U. O. KÖYLÜ, C. S. MCENALLY, D. E. ROSNER et L. D. PFEFFERLE. *Simultaneous measurements of soot volume fraction and particle size / microstructure in flames using a thermophoretic sampling technique*. Combustion and Flame, 110 (1997), pp. 494–507.
- [103] D. W. MACKOWSKI, R. A. ALTENKIRCH et M. P. MENGÜÇ. *Extinction and absorption coefficients of cylindrically-shaped soot particles*. Combustion Science and Technology, 53 (1987), pp. 399–410.
- [104] D. W. MACKOWSKI, R. A. ALTENKIRCH, M. P. MENGÜÇ et K. SAITO. *Radiative properties of chain-agglomerated soot formed in hydrocarbon diffusion flames*. Dans *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1988).
- [105] T. L. FARIAS, M. G. CARVALHO et U. O. KÖYLÜ. *Radiative heat transfer in soot-containing combustion systems with aggregation*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 41 (1998), pp. 2581–2587.
- [106] S. HAYASHI, Y. HISAEDA, Y. ASAKUMA, H. AOKI, T. MIURA, H. YANO et Y. SAWA. *Simulation of soot aggregates formed by benzene pyrolysis*. Combustion and Flame, 117 (1999), pp. 851–860.
- [107] P. MITCHELL et M. FRENKLACH. *Monte Carlo simulation of soot aggregation with simultaneous surface growth - Why primary particles appear spherical*. Dans *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1998).
- [108] J. DE RIS. *Fire radiation - A review*. Dans *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1979).
- [109] J. H. KENT et D. R. HONNERY. *A soot formation rate map for a laminar ethylene diffusion flame*. Combustion and Flame, 79 (1990), pp. 287–298.
- [110] C. R. KAPLAN, C. R. SHADDIX et K. C. SMYTH. *Computations of enhanced soot production in time-varying CH₄/air diffusion flames*. Combustion and Flame, 106 (1996), pp. 392–405.

- [111] M. P. MENGÜÇ et R. VISKANTA. *A sensitivity analysis for radiative heat transfer in a pulverized coal-fired furnace*. Combustion Science and Technology, 51 (1987), pp. 51–74.
- [112] B. PORTERIE et J. C. LORAUD. *The prediction of some compartment fires. Part 1 : mathematical model and numerical method*. Numerical Heat Transfer, Part A, 39 (2001), pp. 139–153.
- [113] Y. LIU et B. ROGG. *Prediction of radiative heat transfer in laminar flames*. Combustion Science and Technology, 118 (1996), pp. 127–145.
- [114] R. O. BUCKIUS et C. L. TIEN. *Infrared flame radiation*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 20 (1977), pp. 93–106.
- [115] S. F. SON et M. Q. BREWSTER. *Radiation-augmented combustion of homogeneous solids*. Combustion Science and Technology, 107 (1995), pp. 127–154.
- [116] F. EL AMMOURI. *Etude théorique des transferts couplés conductif, convectif et radiatif dans des écoulements gazeux hétérogènes et turbulents ; mesure du flux conductif par déviation de faisceau laser*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (1993).
- [117] F. KRITZSTEIN. *Etude théorique et expérimentale des effets de la turbulence sur le rayonnement infrarouge des gaz. Application à un écoulement turbulent dans un canal*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (1993).
- [118] P. MIGNON. *Etude théorique du couplage convection turbulente-rayonnement dans un écoulement de gaz dans un canal. Thermodégradation de la paroi*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (1992).
- [119] M. E. KOUNALAKIS, J. P. GORE et G. M. FAETH. *Turbulence/radiation interactions in nonpremixed hydrogen/air flames*. Dans *Twenty-second Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1988).
- [120] A. SOUFIANI. *Etudes théoriques et expérimentales des transferts couplés par convection laminaire ou turbulente et rayonnement dans un milieu gazeux à température élevée*. Thèse de doctorat, Université d'Orsay (1987).
- [121] T. H. SONG et R. VISKANTA. *Interaction of radiation with turbulence : application to a combustion system*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1 (1987), pp. 56–62.
- [122] A. SOUFIANI. *Temperature turbulence spectrum for high temperature radiating gases*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 5 (1991), pp. 489–494.
- [123] M. COANTIC et O. SIMONIN. *Radiative effects on turbulent temperature spectra and budgets in the planetary boundary layer*. Journal of Atmospheric Sciences, 41 (1984), pp. 2629–2651.
- [124] O. SIMONIN. *Influence du transfert radiatif sur la turbulence de température : application à la couche limite planétaire*. Thèse de doctorat, Université Paris VI (1981).
- [125] V. P. KABASHNIKOV. *Thermal radiation of turbulent flows in the case of large fluctuations of the absorption coefficient and the Planck function*. Journal of Engineering Physics, 49 (1985), pp. 778–784.
- [126] V. P. KABASHNIKOV et G. I. MYASNIKOVA. *Thermal radiation in turbulent flows - Temperature and concentration fluctuations*. Heat Transfer - Soviet Research, 17 (1985), pp. 116–125.

-
- [127] S.-M. JENG, M.-C. LAI et G. M. FAETH. *Nonluminous radiation in turbulent buoyant axisymmetric flames*. Combustion Science and Technology, 40 (1984), pp. 41–53.
- [128] J. P. GORE, S.-M. JENG et G. M. FAETH. *Spectral and total radiation properties of turbulent carbon monoxide/air diffusion flames*. AIAA Journal, 25 (1987), pp. 339–345.
- [129] K. J. SYED, C. D. STEWART et J. B. MOSS. *Modelling soot formation and thermal radiation in buoyant turbulent diffusion flames*. Dans *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1990).
- [130] Y. NAGANO et C. KIM. *A two-equation model for heat transport in wall turbulent shear flows*. Journal of Heat Transfer, 110 (1988), pp. 583–589.
- [131] C. K. G. LAM et K. A. BREMHORST. *A modified form of the $k - \epsilon$ model for predicting wall turbulence*. Journal of Fluids Engineering, 103 (1981), pp. 456–460.
- [132] J. R. HOWELL. *Thermal radiation in participating media: the past, the present, and some possible futures*. Journal of Heat Transfer, 110 (1988), pp. 1220–1229.
- [133] L. TESSÉ. *Etude des transferts radiatifs dans une flamme de diffusion turbulente à haute teneur en suie*. Rapport de stage de 3ème année et de dea, Ecole Centrale Paris - option Thermique (1997).
- [134] F. C. LOCKWOOD et N. G. SHAH. *A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures*. Dans *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1981).
- [135] J. C. HENSON et W. M. G. MALALASEKERA. *Comparison of the discrete transfer and Monte Carlo methods for radiative heat transfer in three-dimensional nonhomogeneous scattering media*. Numerical Heat Transfer, Part A, 32 (1997), pp. 19–36.
- [136] H. K. VERSTEEG, J. C. HENSEN et W. MALALASEKERA. *Approximation errors in the heat flux integral of the discrete transfer method - Part 2: participating media*. Numerical Heat Transfer, Part B, 36 (1999), pp. 409–432.
- [137] M. FAIRWEATHER, W. P. JONES et R. P. LINDSTEDT. *Predictions of radiative transfer from a turbulent reacting jet in a cross-wind*. Combustion and Flame, 89 (1992), pp. 45–63.
- [138] N. W. BRESSLOFF, J. B. MOSS et P. A. RUBINI. *CFD prediction of coupled radiation heat transfer and soot production in turbulent flames*. Dans *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute (1996).
- [139] B. OLSOMMER, M. VON SPAKOVSKY et D. FAVRAT. *Transfert de chaleur par rayonnement dans un four d'incinération industriel: application de la méthode des zones*. Revue Générale de Thermique, 36 (1997), pp. 125–134.
- [140] A. C. RATZEL et J. R. HOWELL. *Two-dimensional radiation in absorbing-emitting media using the P_N approximation*. Journal of Heat Transfer, 105 (1983), pp. 333–340.
- [141] M. P. MENGÜÇ et R. VISKANTA. *Radiative transfer in three-dimensional rectangular enclosures containing inhomogeneous, anisotropically scattering media*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 33 (1985), pp. 533–549.

- [142] W. A. FIVELAND. *Discrete ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures*. Journal of Heat Transfer, 106 (1984), pp. 699–706.
- [143] W. A. FIVELAND. *Three-dimensional radiative heat transfer solutions by the discrete ordinates method*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2 (1988), pp. 309–316.
- [144] W. A. FIVELAND et J. P. JESSEE. *Comparison of discrete ordinates formulations for radiative heat transfer in multidimensional geometries*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 9 (1995), pp. 47–54.
- [145] R. VAILLON, M. LALLEMAND et D. LEMONNIER. *Radiative heat transfer in orthogonal curvilinear coordinates using the discrete ordinates method*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 55 (1996), pp. 7–17.
- [146] M. SAKAMI, A. CHARETTE et V. LE DEZ. *Radiative heat transfer in three-dimensional enclosures of complex geometry by using the discrete ordinates method*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 59 (1998), pp. 117–136.
- [147] M. A. RAMANKUTTY et A. L. CROSBIE. *Modified discrete ordinates solution of radiative transfer in three-dimensional rectangular enclosures*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 60 (1998), pp. 103–134.
- [148] M. SAKAMI et A. CHARETTE. *Application of a modified discrete ordinates method to a two-dimensional enclosures of irregular geometry*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 64 (2000), pp. 275–298.
- [149] G. D. RAITHYBY et E. H. CHUI. *A finite volume method for predicting radiant heat transfer in enclosures with participating media*. Journal of Heat Transfer, 112 (1990), pp. 415–423.
- [150] J. C. CHAI, H. S. LEE et S. V. PATANKAR. *Finite volume method for radiation heat transfer*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 8 (1994), pp. 419–425.
- [151] J. Y. MURTHY et S. R. MATHUR. *Finite volume method for radiative heat transfer using unstructured meshes*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 12 (1998), pp. 313–321.
- [152] S. H. KIM et K. Y. HUH. *A new angular discretization scheme of the finite volume method for 3-D radiative heat transfer in absorbing, emitting and anisotropically scattering media*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 43 (2000), pp. 1233–1242.
- [153] J. LIU, H. M. SHANG et Y. S. CHEN. *Development of an unstructured radiation model applicable for two-dimensional planar, axisymmetric, and three-dimensional geometries*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 66 (2000), pp. 17–33.
- [154] Z. TAN et J. R. HOWELL. *New numerical method for radiation heat transfer in nonhomogeneous participating media*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 4 (1990), pp. 419–424.
- [155] P.-F. HSU, Z. TAN et J. R. HOWELL. *Radiative transfer by the YIX method in nonhomogeneous, scattering and nongray media*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 7 (1993), pp. 487–495.
- [156] M. M. RAZZAQUE, J. R. HOWELL et D. E. KLEIN. *Coupled radiative and conductive heat transfer in a two-dimensional rectangular enclosure with gray participating media using finite elements*. Dans *JSME Thermal Engineering Joint Conference Proceedings*. ASME, Y. Mori and W. Yang (eds.) (1983).

-
- [157] S. P. BURNS, J. R. HOWELL et D. E. KLEIN. *Finite element solution for radiative heat transfer with nongray, nonhomogeneous radiative properties*. Dans *Proc. 30th National Heat Transfer Conf.*, tm. 13. ASME HTD-315 (1995).
- [158] J. R. HOWELL et M. PERLMUTTER. *Monte Carlo solution of thermal transfer through radiant media between gray walls*. *Journal of Heat Transfer*, 86 (1964), pp. 116–122.
- [159] A. HAJI-SHEIKH et E. M. SPARROW. *Probability distributions and error estimates for Monte Carlo solutions of radiation problems*. *Progress in Heat and Mass Transfer*, 2 (1969), pp. 1–12.
- [160] A. HAJI-SHEIKH. *Monte Carlo methods*. Dans *Handbook of Numerical Heat Transfer*, chap. 16. Wiley Interscience, New-York (1988), pp. 673–722.
- [161] P. J. BURNS et D. V. PRYOR. *Vector and parallel Monte Carlo radiative heat transfer simulation*. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 16 (1989), pp. 97–124.
- [162] J. D. MALTBY et P. J. BURNS. *Performance, accuracy and convergence in a three-dimensional Monte Carlo radiative heat transfer simulation*. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 19 (1991), pp. 191–209.
- [163] D. V. WALTERS et R. O. BUCKIUS. *Monte Carlo methods for radiative heat transfer in scattering media*. Dans *Annual Review of Heat Transfer*, rédacteur C.-L. TIEN, tm. 5, chap. 3. CRC Press, Boca Raton (1994), pp. 131–176.
- [164] J. R. HOWELL. *The Monte Carlo method in radiative heat transfer*. *Journal of Heat Transfer*, 120 (1998), pp. 547–560.
- [165] J. T. FARMER et J. R. HOWELL. *Monte Carlo strategies for radiative transfer in participating media*. *Advances in Heat Transfer*, 31 (1998), pp. 1–97.
- [166] D. V. WALTERS et R. O. BUCKIUS. *Rigorous development for radiation heat transfer in nonhomogeneous absorbing, emitting and scattering media*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35 (1992), pp. 3323–3333.
- [167] R. FOURNIER. *Rayonnement thermique dans les gaz : analyse du couplage avec la convection naturelle*. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, France (1994).
- [168] M. CHERKAOUI, J.-L. DUFRESNE, R. FOURNIER, J.-Y. GRANDPEIX et A. LAHELLEC. *Monte Carlo simulation of radiation in gases with a narrow-band model and a net-exchange formulation*. *Journal of Heat Transfer*, 118 (1996), pp. 401–407.
- [169] M. CHERKAOUI, J.-L. DUFRESNE, R. FOURNIER, J.-Y. GRANDPEIX et A. LAHELLEC. *Radiative net-exchange formulation within one-dimensional gas enclosures with reflective surfaces*. *Journal of Heat Transfer*, 120 (1998), pp. 275–278.
- [170] L. L. HOUSE et L. W. AVERY. *The Monte Carlo technique applied to radiative transfer*. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 9 (1969), pp. 1579–1591.
- [171] N. SHAMSUNDAR, E. M. SPARROW et R. P. HEINISCH. *Monte Carlo radiation solutions - Effect of energy partitioning and number of rays*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16 (1973), pp. 690–694.

- [172] M. KOBAYAMA. *Reduction of computing time and improvement of convergence stability of the Monte Carlo method applied to radiative heat transfer with variable properties*. Journal of Heat Transfer, 111 (1989), pp. 135–140.
- [173] W. R. MARTIN et G. C. POMRANING. *Monte Carlo analysis of the backscattering of radiation from a sphere to a plane*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 43 (1990), pp. 115–126.
- [174] K. KUDO, H. TANIGUCHI, A. KURODA, M. OHTAKA et H. KAKOTA. *Improvement of analytical method on radiative heat transfer in nongray media by Monte Carlo method*. Heat Transfer - Japanese Research, 22 (1993), pp. 559–572.
- [175] S. T. SURZHNIKOV et J. R. HOWELL. *Monte Carlo simulation of radiation in scattering volumes with line structure*. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 12 (1998), pp. 278–281.
- [176] W. J. YANG, H. TANIGUCHI et K. KUDO. *Radiative heat transfer by the Monte Carlo method*. Advances in Heat Transfer, 27 (1995), pp. 1–215.
- [177] S. MARUYAMA et T. AIHARA. *Radiation heat transfer of arbitrary three-dimensional absorbing, emitting and scattering media and specular and diffuse surfaces*. Journal of Heat Transfer, 119 (1997), pp. 129–136.
- [178] Y. R. SIVATHANU et J. P. GORE. *A discrete probability function method for the equation of radiative transfer*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 49 (1993), pp. 269–280.
- [179] J. T. FARMER et J. R. HOWELL. *Hybrid Monte Carlo/diffusion methods for enhanced solution of radiative transfer in optically thick nongray media*. Radiative Heat Transfer: Current Research, ASME HTD 276 (1994), pp. 203–212.
- [180] J. T. FARMER et J. R. HOWELL. *Monte Carlo algorithms for predicting radiative transfer in optically thick participating media*. Dans *Tenth International Heat Transfer Conference*, tm. 2. Taylor and Francis, Brighton, UK (1994).
- [181] H. A. J. VERCAMMEN et G. F. FROMENT. *An improved zone method using Monte Carlo techniques for the simulation of radiation in industrial furnaces*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 23 (1980), pp. 329–337.
- [182] S. W. BAEK, D. Y. BYUN et S. J. KANG. *The combined Monte Carlo and finite volume method for radiation in a two-dimensional irregular geometry*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 43 (2000), pp. 2337–2344.
- [183] A. SOUFIANI et J. TAINE. *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* . International Journal of Heat and Mass Transfer, 40 (1997), pp. 987–991.
- [184] Z. ZHANG et O. A. EZEKOYE. *Soot production rate calculations at elevated pressure in a methane-air jet diffusion flame*. Combustion Science and Technology, 137 (1998), pp. 323–346.
- [185] S. DEMBELE et J. X. WEN. *Investigation of a spectral formulation for radiative heat transfer in one-dimensional fires and combustion systems*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 43 (2000), pp. 4019–4030.
- [186] J. Y. MURTHY et S. R. MATHUR. *Radiative heat transfer in axisymmetric geometries using an unstructured finite volume method*. Numerical Heat Transfer, Part B, 33 (1998), pp. 397–416.

-
- [187] J. R. HOWELL et M. PERLMUTTER. *Monte Carlo solution of radiant heat transfer in a nongrey nonisothermal gas with temperature dependent properties*. A.I.Ch.E. Journal, 10 (1964), pp. 562–567.
- [188] J. LIU et S. N. TIWARI. *Investigation of radiative transfer in nongray gases using a narrow band model and Monte Carlo simulation*. Journal of Heat Transfer, 116 (1994), pp. 160–166.
- [189] P. L'ECUYER. *Good parameter sets for combined multiple recursive random number generators*. Operations Research, 47 (1999), pp. 159–164. Available at <http://www.iro.umontreal.ca/~lecuyer/papers.html> (files combmrg2.ps and combmrg2.c).
- [190] M. N. ÖZISIK et C. E. SIEWERT. *On the normal-mode expansion technique for radiative transfer in a scattering, absorbing and emitting slab with specularly reflecting boundaries*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 12 (1969), pp. 611–620.
- [191] C. C. LIU et M. N. ÖZISIK. *Hemispherical reflectivity and transmissivity of an absorbing, isotropically scattering slab with a reflecting boundary*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 16 (1973), pp. 685–690.
- [192] A. COPPALLE et D. JOYEUX. *Temperature and soot volume fraction in turbulent diffusion flames: measurements of mean and fluctuating values*. Combustion and Flame, 96 (1994), pp. 275–285.
- [193] D. JOYEUX. *Etudes expérimentales et numériques de la production des suies dans les flammes de diffusion turbulentes*. Thèse de doctorat, Université de Rouen (1993).
- [194] R. BORGHI. *Turbulent combustion modelling*. Progress in Energy and Combustion Science, 14 (1988), pp. 245–292.
- [195] P. GILBANK. *Contribution à la modélisation de la combustion turbulente dans le cas d'une stabilisation par accroche-flammes*. Thèse de doctorat, Université Paris VI (1989).
- [196] P. CAILLAU. *Modélisation et simulation de la combustion turbulente par une approche probabiliste eulérienne lagrangienne*. Thèse de doctorat, Université de Rouen (1994).
- [197] S. B. POPE. *PDF methods for turbulent reactive flows*. Progress in Energy and Combustion Science, 11 (1985), pp. 119–192.
- [198] R. BORGHI et M. DESTRIAU. *La combustion et les flammes*. Editions Technip, Paris (1995).
- [199] F. RAVET, C. BAUDOIN et J.-L. SCHULTZ. *Modélisation numérique des écoulements réactifs dans les foyers de turboréacteurs*. Revue Générale de Thermique, 36 (1997), pp. 5–16.
- [200] F. RAVET et L. VERVISCH. AIAA Paper 98-1027 (1998).
- [201] P. CHASSAING. *Turbulence en mécanique des fluides*. Cépaduès-Editions, Toulouse (2000).
- [202] P. L'ECUYER. *Random number generation*. Dans *Handbook on Simulation*, rédacteur J. BANKS, chap. 4. Wiley (1998), pp. 93–137. Disponible à l'adresse internet <http://www.iro.umontreal.ca/~lecuyer/papers.html> (fichier handsim.ps).
- [203] Dans *Numerical Recipes in FORTRAN 77: the Art of Scientific Computing*, chap. 7. Cambridge University Press. Disponible à l'adresse internet <http://www.nr.com>.

Table des figures

1	Influence de la prise en compte des fluctuations turbulentes sur la fraction volumique de suie, dans une flamme turbulente de diffusion éthylène/air, pour différentes hauteurs au-dessus du brûleur (figure issue de [8]).	3
2	Influence de la prise en compte des transferts radiatifs sur la température et la fraction volumique de suie à 10 cm de hauteur dans une flamme turbulente de diffusion éthylène-azote/air (figure issue de [15]).	4
1.1	Evolution du flux le long du chemin optique.	8
1.2	Système tridimensionnel quelconque.	10
1.3	Evolution en fonction de la température du spectre en coefficient d'absorption de CO_2 : $x_{\text{CO}_2} = 0,02$; $x_{\text{N}_2} = 0,98$; $p = 1$ atm (figure obtenue à partir de figures issues de [28]).	13
1.4	Evolution en fonction de la pression du spectre en émissivité d' H_2O pour un produit $x_{\text{H}_2\text{O}}p\ell$ constant: $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,5$; $x_{\text{N}_2} = 0,5$; $T = 800$ K (figure issue de [28]).	14
1.5	Photographie obtenue par TEM (Transmission Electron Microscopy) d'agrégats de suie collectés dans une flamme de diffusion turbulente acétylène/air (photo issue de [97]).	22
1.6	Evolution de la constante multiplicative A définie par l'équation (1.30) en fonction du nombre d'onde.	24
2.1	Coupled elementary cells.	40
2.2	Principle of the calculation of the radiative power in the cell q in the FM (the emitted power is calculated analytically).	44
2.3	Principle of the calculation of the radiative power in the cell q in the ERM.	44
2.4	Principle of the calculation of the radiative power in the cell q in the ARM.	45
2.5	Influence of the total number N of optical paths on mean power and on standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 1, FM-NUD).	50
2.6	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 1, NUD).	51
2.7	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 1, UD).	53
2.8	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 2).	54
2.9	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 3).	54
2.10	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 4).	55
2.11	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 5).	55

2.12	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 6).	58
2.13	Mean power value and standard deviation over $N_y N_z$ values of \tilde{P} (case 7).	58
3.1	Changement de direction par diffusion d'un chemin optique.	65
3.2	Géométrie 1D du mur plan en milieu gris diffusant de façon isotrope.	67
4.1	Domaine de calcul et maillage utilisés pour calculer la flamme.	77
4.2	Comparaison des champs de température (en K) issus de deux calculs eulériens avec (à gauche) et sans (à droite) prise en compte des transferts radiatifs.	80
4.3	Champs d'énergie cinétique turbulente moyenne (à gauche) et de son taux moyen de dissipation (à droite) issus du calcul eulérien; $\langle k \rangle_{max} \simeq 25 \text{ m}^2/\text{s}^2$ et $\langle \epsilon_k \rangle_{max} \simeq 10^5 \text{ m}^2/\text{s}^3$	83
4.4	Evolutions en fonction de la richesse des températures de trois particules fluides typiques suivies lors du calcul lagrangien.	84
4.5	Courbe d'équilibre de température retenue.	85
4.6	Courbes d'équilibre de fractions molaires d' H_2O et de CO_2 retenues.	85
4.7	Courbe d'équilibre de fraction molaire de CO retenue.	86
4.8	Evolutions en fonction de la richesse des fractions volumiques de suie des trois particules fluides dont les évolutions de température sont représentées sur la figure 4.4.	86
4.9	Profils radiaux, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, de température moyenne, de fraction volumique moyenne de suie et de fractions molaires moyennes de H_2O et de CO_2 reconstruits à partir de la PDF $f_t(r, f_V)$ obtenue lors de la simulation lagrangienne.	88
4.10	Champs de température moyenne (en K, à gauche) et de fraction volumique moyenne de suie (à droite) reconstruits à partir de la PDF $f_t(r, f_V)$ obtenue lors de la simulation lagrangienne; $\langle T \rangle_{max} \simeq 1800 \text{ K}$ et $\langle f_V \rangle_{max} \simeq 1,9 \text{ ppm}$	89
4.11	Champs de fraction molaire moyenne de H_2O (à gauche) et de CO_2 (à droite) reconstruits à partir de la PDF $f_t(r, f_V)$ obtenue lors de la simulation lagrangienne; $\langle x_{\text{H}_2\text{O}} \rangle_{max} \simeq 0,12$ et $\langle x_{\text{CO}_2} \rangle_{max} \simeq 0,10$	90
4.12	Profil de température considéré au sein du milieu extérieur situé au-dessus des frontières ouvertes 9 et 10.	91
4.13	Définition de l'échelle de longueur intégrale Λ de la turbulence.	94
4.14	Champs de puissance radiative volumique moyenne (en W/m^3 , à gauche) et de l'écart type correspondant (en W/m^3 , à droite), obtenus avec la méthode FM-NUD (calcul réalisé avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	102
4.15	Champs de puissance radiative volumique moyenne (en W/m^3 , à gauche) et de l'écart type correspondant (en W/m^3 , à droite), obtenus avec la méthode ERM-NUD (calcul réalisé avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	103
4.16	Profils radiaux, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, de la puissance radiative volumique moyenne et de l'écart type correspondant, obtenus avec les deux méthodes donnant les meilleurs résultats (calcul réalisé avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	104

4.17	Flux surfacique moyen, sortant par la frontière ouverte verticale, et écart type correspondant, obtenus avec les différentes méthodes (calculs réalisés avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	104
4.18	Convergence du flux surfacique sortant par la frontière ouverte verticale (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	105
4.19	Influence de l'émissivité du milieu extérieur sur le flux radiatif surfacique moyen et l'écart type correspondant, sur la frontière ouverte verticale (résultats ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	107
4.20	Comparaison des champs de puissance émise volumique moyenne (en W/m^3) sans (à gauche) et avec (à droite) prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence, obtenus analytiquement.	110
4.21	Influence de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence sur les profils radiaux de puissances émise et absorbée, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	111
4.22	Champs de puissance radiative volumique moyenne (en W/m^3 , à gauche) et de l'écart type correspondant (en W/m^3 , à droite) obtenus en prenant en compte l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	112
4.23	Influence de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence sur les profils radiaux de puissance radiative volumique moyenne et de l'écart type correspondant, à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	113
4.24	Influence de l'interaction rayonnement/turbulence sur le flux surfacique sortant par la frontière ouverte verticale (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	114
4.25	Convergence du flux surfacique sortant par la frontière ouverte verticale (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD en prenant en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	114
4.26	Contribution des gaz et des suies au flux spectral moyen sortant par la frontière ouverte verticale à 40 cm de hauteur, en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	116
4.27	Contribution des gaz et des suies au flux total moyen sortant par la frontière ouverte verticale en fonction de la hauteur et de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	116
4.28	Contribution des gaz et des suies à la puissance radiative volumique moyenne à 50 cm de hauteur au-dessus du brûleur, en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	117
1	Champ de fraction molaire moyenne de monoxyde de carbone issu du calcul lagrangien ; $x_{CO_{max}} \simeq 0,28$.	123

C.1	Géométrie monodimensionnelle du mur plan	133
C.2	Géométrie tridimensionnelle choisie	135
C.3	Rôle des miroirs sur les plans latéraux	135

Liste des tableaux

2.1	Benchmark cases.	50
2.2	Flux averaged over the two walls and, in parentheses, corresponding standard deviation.	52
2.3	Best approaches for radiative power and wall flux calculations.	57
3.1	Présentation des différents cas de validation en flux.	68
3.2	Comparaison des flux obtenus par les méthodes de Monte Carlo directe (FM) et réciproques (ERM et ARM) avec ceux donnés par la solution de référence de Lii et Özisik [191] dans le cas du mur plan pour différentes conditions.	69
3.3	Comparaison des flux obtenus par les méthodes de Monte Carlo directe (FM) et réciproque (ARM) avec ceux donnés par une méthode des ordonnées discrètes 1D [1] dans le cas du mur plan pour différentes conditions.	70
3.4	Comparaison des puissances radiatives volumiques (en W/m^3) obtenues par la méthode de Monte Carlo réciproque (ERM) avec celles issues de l'approximation conductive dans le cas du mur plan optiquement épais.	72
4.1	Conditions imposées sur les frontières du domaine pour effectuer le calcul aérothermochimique de la flamme.	77
4.2	Conditions imposées sur les frontières du domaine pour effectuer le calcul de transferts radiatifs au sein de la flamme.	88
4.3	Comparaison des résultats obtenus avec les trois méthodes associées chacune aux deux techniques de répartition (les deux calculs ont été réalisés avec 10^7 chemins optiques sans prendre en compte l'interaction rayonnement/turbulence).	100
4.4	Influence de l'émissivité du milieu extérieur situé derrière les frontières ouvertes (résultats ne prenant pas en compte l'interaction rayonnement/turbulence obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	105
4.5	Influence de la prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence sur les résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques.	106
4.6	Influence de la constante K_s du coefficient d'absorption des suies en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	108
4.7	Influence de la taille des tourbillons dans la modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	109

4.8	Contribution des gaz et des suies en fonction de la prise en compte ou non de l'interaction rayonnement/turbulence (résultats obtenus avec la méthode FM-NUD et 10^7 chemins optiques).	115
-----	---	-----

Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo

Résumé : Un nouvel outil numérique, destiné au calcul des transferts radiatifs dans les chambres de combustion, a été développé. L'équation de transfert du rayonnement est résolue de façon stochastique par trois approches différentes de la méthode de Monte Carlo : une formulation classique et deux approches originales basées sur le principe de réciprocité, qui n'est pas considéré seulement du point de vue géométrique, mais aussi du point de vue énergétique. Afin de réduire la variance des résultats, l'absorption est calculée de façon déterministe. Les propriétés radiatives des gaz sont traitées de façon corrélée par un modèle CK.

Des calculs de validation, en milieux diffusants ou non, ont montré que l'approche classique est plus adaptée aux milieux non optiquement épais caractérisés par de forts écarts de température, alors que les deux autres méthodes sont plus adaptées aux milieux optiquement épais ou quasi-isothermes. Les résultats des trois approches sont obtenus simultanément avec un seul calcul. Le temps de calcul est égal à celui nécessaire à l'obtention des résultats à partir d'une seule méthode. La solution optimale consiste à retenir, en chaque maille, le meilleur des trois résultats.

La modélisation de l'interaction rayonnement/turbulence repose sur le découpage d'un chemin optique en une succession de structures turbulentes cohérentes indépendantes, supposées homogènes, isothermes et de tailles égales à l'échelle de longueur intégrale de la turbulence. Ce modèle a été appliqué à une flamme turbulente de diffusion contenant des suies. La prise en compte de l'interaction rayonnement/turbulence se traduit par une relative homogénéisation du champ de puissance radiative volumique et par une augmentation de 37% de la perte radiative totale de la flamme. La contribution des suies à cette perte est de 65%. La taille des structures turbulentes cohérentes et la constante du coefficient d'absorption des suies ont une influence importante sur cette perte.

Mots-clés : Transfert radiatif - Rayonnement thermique - Flamme turbulente - Combustion turbulente - Interaction rayonnement/turbulence - Suie - Méthode de Monte Carlo - Principe de réciprocité

Monte Carlo modeling of radiative transfer in turbulent sooty flames

Abstract : A new numerical tool, designed to calculate radiative transfer in combustion chambers, has been developed. The radiative transfer equation is solved stochastically by three different approaches of the Monte Carlo method : a conventional forward formulation and two original approaches based on the reciprocity principle, considered from both points of view of the reverse path and the exchanged power. In order to reduce the variance of the results, absorption is calculated in a deterministic way. Gas radiative properties are treated in a correlated manner by a CK model.

Validation calculations, in non-scattering or scattering media, have shown that the conventional approach is the most suitable for optically thin or semi-transparent media characterized by large differences in temperature whereas the two other methods are the most suitable for optically thick or nearly isothermal media. The results given by the three approaches are obtained simultaneously with only one calculation. In terms of computation time, it is not more expensive to obtain the results from the three methods than to obtain the results from only one given approach. The optimal solution consists in choosing the best of the three results for each mesh.

Turbulence/radiation interaction modeling is based on the division of an optical path into a succession of independent coherent turbulent structures supposed to be homogeneous and isothermal. The structure size is equal to the turbulence integral length scale. This model has been applied to a sooty diffusion turbulent flame. The use of this model leads to a relative homogenization of the volumic radiative power field and to a 37% increase of the total radiative loss of the flame. The soot contribution to this loss is equal to 65%. The coherent turbulent structure size and the constant of the soot absorption coefficient have an important influence on this loss.

Keywords : Radiative transfer - Thermal radiation - Turbulent flame - Turbulent combustion - Turbulence/radiation interaction - Soot - Monte Carlo method - Reciprocity principle