



**HAL**  
open science

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

Damien Poitou

► **To cite this version:**

Damien Poitou. Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente. Energie électrique. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2009. Français. NNT : 2009INPT035G . tel-04391330

**HAL Id: tel-04391330**

**<https://theses.hal.science/tel-04391330>**

Submitted on 12 Jan 2024

**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.



# THESE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *Institut National Polytechnique de Toulouse*  
Discipline ou spécialité : *Énergétique et transferts*

---

Présentée et soutenue par *Damien POITOU*  
Le 8 décembre 2009

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

---

### JURY

FLAMANT Gilles – PROMES (Président)  
VAILLON Rodolphe – CETHIL (Rapporteur)  
VEYNANTE Denis – EM2C (Rapporteur)  
FOURNIER Richard – LAPLACE (Examinateur)  
COELHO Pedro – IST (Invité)  
CUENOT Bénédicte – CERFACS (Directrice)  
EL HAFI Mouna – RAPSODEE (Directrice)

---

**Ecole doctorale** : *Mécanique, Énergétique, Génie civil Et Procédés*  
**Unité de recherche** : *Centre de Recherche d'Albi en génie des Procédés des Solides Divisés, de l'Energie et de l'Environnement, École des Mines d'Albi*  
**Directeur(s) de Thèse** : *CUENOT Bénédicte, EL HAFI Mouna*  
**Rapporteurs** : *VAILLON Rodolphe, VEYNANTE Denis*



# THÈSE

défendue  
en vue d'obtenir le grade de

DOCTEUR DE L' INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

spécialité « Énergétique et Transferts »

par

DAMIEN POITOU

---

## MODÉLISATION DU RAYONNEMENT DANS LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DE LA COMBUSTION TURBULENTE

---

Thèse soutenue le 8 décembre 2009 devant le jury composé de :

|                  |                  |                   |              |
|------------------|------------------|-------------------|--------------|
| M.               | GILLES FLAMANT   | PROMES            | (Président)  |
| M.               | RODOLPHE VAILLON | CETHIL            | (Rapporteur) |
| M.               | DENIS VEYNANTE   | EM <sub>2</sub> C | (Rapporteur) |
| M.               | RICHARD FOURNIER | LAPLACE           | (Examineur)  |
| M.               | PEDRO COELHO     | IST               | (Invité)     |
| M. <sup>me</sup> | BÉNÉDICTE CUENOT | CERFACS           | (Directrice) |
| M. <sup>me</sup> | MOUNA EL HAFI    | RAPSODEE          | (Directrice) |

*Laboratoire d'accueil : Centre de Recherche d'Albi en génie des Procédés des Solides Divisés,  
de l'Énergie et de l'Environnement (RAPSODEE) – École des Mines d'Albi*







# REMERCIEMENTS

Alors que ce travail se termine il est temps de remercier les personnes qui m'ont accompagné durant cette période de thèse.

J'adresse mes remerciements à Monsieur Alain De Ryck pour m'avoir accueilli au sein du Centre de Recherche d'Albi en génie des Procédés des Solides Divisés, de l'Energie et de l'Environnement. Je remercie aussi Monsieur Thierry Poinot de m'avoir permis de travailler au sein de l'équipe CFD au CERFACS.

Je remercie également Messieurs Rodolphe Vaillon et Denis Veynante d'avoir été rapporteurs de ce travail et d'avoir apporté leur point de vue de spécialistes, respectivement en rayonnement et en combustion, dans une lecture approfondie de ce manuscrit. J'exprime également ma gratitude à Monsieur Gilles Flamant d'avoir présider ma soutenance ainsi qu'à Monsieur Pedro Coelho d'être venu de Lisbonne et de son intérêt porté à ce travail.

Je tiens à remercier spécialement mes directrices de thèse, Mesdames Bénédicte Cuenot et Mouna El Hafi, pour avoir proposé un sujet si riche et qui m'a captivé durant ces trois années. Je remercie Bénédicte pour sa capacité à décider des caps à suivre en ayant toujours une vision globale du sujet et sa relecture approfondie. Je remercie également Mouna pour son encadrement très humain avec beaucoup d'écoute et de discussions qui m'a appris à clarifier les idées et essayer de rendre les explications plus pédagogiques. . . Je les remercie de la confiance mutuelle qui s'est développée au fur et à mesure et qui a contribué à la réussite de ce travail. Je remercie également Monsieur Richard Fournier qui m'a souvent conduit à me poser les bonnes questions au début de ce travail et de me lancer à faire une thèse.

Un remerciement tout particulier à Paul Gaborit qui m'a pas mal aidé à démarrer en fortran, latex, . . . Un grand merci à Jorge Amaya avec qui nous avons passé des heures au téléphone et, sans qui il aurait été difficile de faire fonctionner le couplage à temps !

Merci à mes collègues de bureau : Julien (nouveau converti à France Inter ?), Germain (pas du tout converti !), Dalila et Areski. Un grand remerciement à l'équipe des gens du rayonnement. Les « anciens » que j'ai eu l'occasion de croiser : David, Patrice, Max (Tshirt TRI!!), Cyril. Un merci aux autres et aux bons moments passés à Roffiac : Jérémie DLT., Jérémie D., Vincent, Nicolas, Stéphane, Jacques, . . .

Enfin merci à l'équipe des albigeois qui a rendu cette période riche en bons moments (parfois pluvieux dirons les râleurs !) dans cette ville qui nous fut très agréable : Laurent, Ana, Clémence & Jérémie (les anciens voisins de la rue Porta), Brice (l'homme cacao) & Christelle et Étienne.

Merci à mes parents, mon Père, ma Mère et Michelle ainsi qu'à Élie d'avoir toujours été là pour m'encourager et me soutenir.

Un grand merci à celle qui a eu la patience de partager son quotidien avec la thèse. Alors que la thèse se finit un 8 décembre, c'est exactement 2 ans après le début de cette belle histoire, et qui je l'espère, durera encore longtemps . . . Merci à toi Christelle d'avoir été là avec ta patience, ta tendresse, ton écoute et toutes les choses que je ne sais pas dire mais qui font que je t'aime.

« On ne force pas les choses  
Elles partent comme elles éclosent  
Les sépales de tes roses  
Ont flambé  
On se souvient d'une nuit d'un refrain  
Un soupçon de silence incertain

On s'abîme où l'on se pose  
Les papillons osent  
Mais la mer a repris  
Les fossiles de nos folies  
Que fais-tu là ?  
Mais je sais pas  
J'passais par là  
Au coin du bois  
Y avait ma vie  
Qui m'attendait  
Depuis trois siècles  
Et me voilà  
Mais v'la-t-y pas  
Qui j'vois là-bas  
Une autre vie  
Qui m'tend les bras

On ne force pas les choses  
Elles partent comme elles éclosent  
Le calice de tes roses  
A flambé  
On n'se dit rien ça vit comme ça vient  
Ca vient ça va ça vit de bouts de rien

Ca s'immisce  
Les papillons osent  
Mais la mer a repris  
Les fossiles de nos folies  
Que fais-tu là ?  
Mais je sais pas  
J'allais par là  
Au coin du bois  
Vivre la vie  
Qui m'attendra  
Dans deux trois siècles

---

Je serai là  
Elle m'attendra  
Au coin du bois  
Cette autre vie  
Qui m'tend les bras

Et puis l'on force la chose  
Dans de vagues proses  
Une effluve de rouge rose  
A flambé  
Au coin du bois j'ai trouvé ce matin  
Une autre vie qui me tendait les mains

Comme on n'était pas grand-chose  
Les papillons se posent  
Et la mer a repris  
Les fossiles de nos folies

Je t'attendrai  
Au coin du bois  
Et puis toujours  
Tu seras là »

*Têtes raides, Les choses*

# TABLE DES MATIÈRES

|  |           |
|--|-----------|
| TABLE DES MATIÈRES   | x         |
| <b>Introduction</b>  | <b>3</b>  |
| <b>I Du rayonnement en combustion turbulente</b>   | <b>7</b>  |
| <b>1 MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE</b>  | <b>13</b> |
| 1.1 ÉQUATIONS DE L'AÉROTHERMOCHIMIE . . . . .  | 15        |
| 1.1.1 Grandeurs de la Thermochimie . . . . .   | 15        |
| 1.1.2 Cinétique chimique . . . . .   | 16        |
| 1.1.3 Équations de conservation . . . . .  | 17        |
| 1.2 MODÉLISATION DE LA TURBULENCE . . . . .  | 19        |
| 1.2.1 Les différentes approches . . . . .  | 20        |
| 1.2.2 La Simulation aux Grandes Échelles . . . . .                                       | 22        |
| 1.2.3 Équations de conservation filtrées . . . . .                                       | 22        |
| 1.3 MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE EN LES . . . . .                            | 24        |
| 1.3.1 Le modèle de flamme épaisse dynamique en LES . . . . .                             | 26        |
| 1.3.2 Modèle Final . . . . .   | 29        |
| 1.4 ASPECTS NUMÉRIQUES . . . . .   | 30        |
| 1.4.1 Le code AVBP . . . . .   | 30        |
| 1.4.2 Conditions aux limites . . . . .   | 31        |
| <b>2 MODÉLISATION DU RAYONNEMENT</b>   | <b>33</b> |
| 2.1 FORMULATION DU PROBLÈME RADIATIF . . . . .   | 33        |
| 2.1.1 Concepts essentiels et grandeurs caractéristiques . . . . .                        | 33        |
| 2.1.2 Établissement de l'équation de transport . . . . .                                 | 36        |
| 2.1.3 Absorption et émission . . . . .   | 37        |
| 2.1.4 Diffusion . . . . .  | 39        |
| 2.1.5 Formulation différentielle . . . . .   | 40        |
| 2.1.6 Formulation intégrale . . . . .  | 41        |
| 2.2 PROPRIÉTÉS SPECTRALES . . . . .  | 44        |
| 2.2.1 Introduction . . . . .   | 44        |
| 2.2.2 Les différents modèles spectraux . . . . .   | 46        |
| 2.2.3 Le modèle statistique à bandes étroites formulé en $k$ -correlés (SNBck) . . . . . | 48        |
| 2.2.4 Propriétés spectrales des particules de suie . . . . .                             | 52        |
| 2.3 MÉTHODES DE RÉOLUTION . . . . .  | 53        |
| 2.3.1 Approche intégrale . . . . .   | 53        |
| 2.3.2 Approche différentielle . . . . .  | 54        |

|            |   |            |
|------------|---|------------|
| 2.4        | LA MÉTHODE DES ORDONNÉES DISCRÈTES DANS PRISSMA . . . . .               | 55         |
| 2.4.1      | Discrétisation angulaire . . . . .                                      | 56         |
| 2.4.2      | Discrétisation spatiale . . . . .                                       | 56         |
| 2.4.3      | Discrétisation spectrale . . . . .                                      | 59         |
| 2.4.4      | Parallélisme . . . . .  | 60         |
| 2.4.5      | Limites de validité des DOM . . . . .                                   | 62         |
| <b>3</b>   | <b>ÉTUDE DU MODÈLE FS-SNBcK EN COMBUSTION</b>                           | <b>65</b>  |
| 3.1        | LIMITES DE VALIDITÉ DU MODÈLE FS-SNBcK EN COMBUSTION . . . . .          | 66         |
| 3.2        | DISCUSSIONS . . . . .   | 77         |
| 3.3        | CONCLUSION . . . . .  | 79         |
| <b>II</b>  | <b>De l'Interaction Rayonnement-Turbulence</b>                          | <b>81</b>  |
| <b>4</b>   | <b>ÉTAT DE L'ART SUR L'INTERACTION RAYONNEMENT- TURBULENCE</b>          | <b>87</b>  |
| 4.1        | LE PROBLÈME DE FERMETURE EN RANS . . . . .                              | 88         |
| 4.1.1      | Terme d'émission . . . . .  | 89         |
| 4.1.2      | Terme d'absorption . . . . .  | 90         |
| 4.1.3      | Prise en compte des différentes corrélations . . . . .                  | 91         |
| 4.2        | INFLUENCE DE LA TURBULENCE SUR LE RAYONNEMENT . . . . .                 | 92         |
| 4.2.1      | Corrélations du terme d'émission . . . . .                              | 92         |
| 4.2.2      | Validations de l'OTFA sur différentes configurations . . . . .          | 96         |
| 4.3        | INFLUENCE DU RAYONNEMENT ET DE LA TRI SUR LA COMBUSTION . . . . .       | 98         |
| 4.3.1      | Calculs basés sur des méthodes approchées pour le rayonnement . . . . . | 98         |
| 4.3.2      | Calculs basés sur la méthode de Monte Carlo . . . . .                   | 100        |
| 4.3.3      | Simulation Numérique Directe . . . . .                                  | 102        |
| 4.4        | CONCLUSION . . . . .  | 104        |
| <b>5</b>   | <b>DIAGNOSTIC DE LA TRI EN LES</b>                                      | <b>107</b> |
| 5.1        | ÉTUDE DE LA TRI EN LES . . . . .  | 107        |
| 5.2        | DISCUSSIONS . . . . .   | 119        |
| 5.2.1      | TRI complète, TRI partielle . . . . .                                   | 119        |
| 5.2.2      | Modèle spectral . . . . .   | 122        |
| 5.2.3      | Taille de Filtre . . . . .  | 123        |
| 5.2.4      | Maillage et rayonnement . . . . .                                       | 124        |
| 5.3        | CONCLUSION . . . . .  | 125        |
| <b>III</b> | <b>De l'influence du modèle de flamme épaissie sur le rayonnement</b>   | <b>127</b> |
| <b>6</b>   | <b>ÉPAISSISSEMENT ET RAYONNEMENT EN LAMINAIRE</b>                       | <b>133</b> |
| 6.1        | CONFIGURATION . . . . .   | 134        |
| 6.1.1      | Modélisation de la chimie . . . . .                                     | 135        |
| 6.1.2      | Conditions aux limites pour le rayonnement . . . . .                    | 135        |
| 6.2        | PROFILS DE FLAMME . . . . .   | 136        |
| 6.3        | INFLUENCE DE L'ÉPAISSISSEMENT SUR LES TERMES RADIATIFS . . . . .        | 136        |
| 6.4        | INFLUENCE DE L'ÉPAISSEUR OPTIQUE EN PRÉSENCE DE SUIES . . . . .         | 144        |
| 6.5        | CONCLUSION . . . . .  | 149        |

|       |  |            |
|-------|--|------------|
| 7     | INFLUENCE DE L'ÉPAISSISSEMENT SUR LA TRI   | 151        |
| 7.1   | ÉTUDE <i>a priori</i> SUR UNE CONFIGURATION D'INTERACTION FLAMME-VORTEX                      | 151        |
| 7.1.1 | Configuration . . . . .  | 151        |
| 7.1.2 | Influence de l'épaississement sur le plissement . . . . .                                    | 153        |
| 7.1.3 | Influence du plissement sur le rayonnement . . . . .   | 155        |
| 7.2   | CONCLUSION . . . . .   | 158        |
| <br>  |  |            |
| IV    | <b>Du couplage instationnaire rayonnement-combustion turbulente en LES</b>                   | <b>159</b> |
| <br>  |  |            |
| 8     | MÉTHODOLOGIE DE COUPLAGE EN LES  | 165        |
| 8.1   | CONTEXTE . . . . .   | 165        |
| 8.2   | CONFIGURATION . . . . .  | 166        |
| 8.2.1 | Calcul LES . . . . .   | 166        |
| 8.2.2 | Modélisation de la chimie . . . . .  | 169        |
| 8.3   | STRATÉGIE ET FRÉQUENCE DE COUPLAGE . . . . .   | 170        |
| 8.3.1 | Stratégie de couplage . . . . .  | 170        |
| 8.3.2 | Synchronisation en temps physique . . . . .  | 171        |
| 8.3.3 | Synchronisation en temps CPU . . . . .   | 171        |
| 8.3.4 | Validation de la fréquence de couplage . . . . .   | 172        |
| 8.4   | PARAMÈTRES DU CALCUL RADIATIF . . . . .  | 172        |
| 8.4.1 | Modèle spectral . . . . .  | 172        |
| 8.4.2 | Quadrature angulaire . . . . .   | 177        |
| 8.5   | RÉDUCTION DE MAILLAGE POUR LE RAYONNEMENT . . . . .  | 178        |
| 8.6   | CONDITIONS AUX LIMITES RADIATIVES . . . . .  | 181        |
| 8.7   | TEMPS DE CALCUL ET SYNTHÈSE . . . . .  | 184        |
| 8.8   | CONCLUSION . . . . .   | 188        |
| <br>  |  |            |
| 9     | COUPLAGE COMBUSTION-RAYONNEMENT  | 191        |
| 9.1   | INTERFACE DE COUPLAGE . . . . .  | 192        |
| 9.1.1 | Application PALM . . . . .   | 192        |
| 9.1.2 | Branche « Bridge » . . . . .   | 192        |
| 9.1.3 | Déroulement du calcul . . . . .  | 196        |
| 9.2   | IMPACT DU RAYONNEMENT SUR LA COMBUSTION TURBULENTE . . . . .                                 | 196        |
| 9.2.1 | Comparaison aux données expérimentales . . . . .   | 196        |
| 9.2.2 | Comparaisons des grandeurs moyennes entre les simulations avec et sans rayonnement . . . . . | 201        |
| 9.3   | INTERACTION DU RAYONNEMENT ET DE LA COMBUSTION TURBULENTE . . . . .                          | 226        |
| 9.4   | CONCLUSION . . . . .   | 231        |
| <br>  |  |            |
|       | <b>Conclusions et perspectives</b>   | <b>233</b> |
|       | <br>   |            |
|       | NOTATIONS  | 237        |
|       | <br>   |            |
|       | Liste des figures  | 238        |
|       | <br>   |            |
|       | Liste des tableaux   | 246        |
|       | <br>   |            |
|       | Bibliographie  | 247        |

---

|   |            |
|---|------------|
| <b>Annexes</b>  | <b>259</b> |
| <b>A TABULATION DU MODÈLE FS-SNBCK</b>                        | <b>259</b> |
| A.1 TABULATION . . . . .                                      | 259        |
| A.1.1 Dépendance de $\kappa$ avec un seul paramètre . . . . . | 260        |
| A.1.2 Dépendance de $\kappa$ avec deux paramètres . . . . .   | 260        |
| A.1.3 Pas des paramètres $T$ et $X_i$ . . . . .               | 265        |
| A.2 INTERPOLATION . . . . .                                   | 269        |



# PRÉFACE

« Ta saloperie de feu va vous éteindre tous, toi et ton espèce, et en un rien de temps, crois-moi ! Yah ! Je remonte sur mon arbre, cette fois tu as passé les bornes, Edouard, et rappelle-toi, le brontosauve aussi avait passé les bornes, où est-il à présent ? Back to the trees ! clama-t-il en cri de ralliement. Retour aux arbres ! »

Extrait du roman « Pourquoi j'ai mangé mon père » [1] qui évoque avec humour la notion de progrès en mettant en scène une famille préhistorique vivant la plupart des inventions de l'humanité sur une génération depuis la première révolution technologique qu'est la découverte du feu. Chaque invention apportant de nouvelles ressources, elles libèrent du temps ou améliorent la sécurité et permettent une transformation de la structure sociale. Il y a les convaincus et les sceptiques : Édouard, le père, génial inventeur qui va changer la face du monde en ramenant le feu ; Vania, l'oncle réactionnaire, ennemi du progrès.

En Europe, ce n'est que tardivement - c'est-à-dire au XIX<sup>e</sup> siècle - que le « progrès » est devenue une notion économique, puis scientifique. C'est plus tardivement encore qu'elle a rejoint la notion d'innovation, au point d'y être confondue. La culture technique pré-industrielle (le système eau/bois/vent) découvert, non sans débats et désaccords, que le progrès pouvait être pensé comme une potentialité. La culture technique de la première industrialisation (système fer/charbon/vapeur) au contraire, s'est fondée sur la notion de progrès en assimilant le progrès à la science. La culture technique de la seconde industrialisation (système pétrole/électricité/alliages), qui s'est élaborée à partir des années 1880, franchit un pas supplémentaire en assimilant le progrès à l'innovation.

La combustion est aujourd'hui un des moyens principaux de conversion de l'énergie dans le monde : production de chaleur (chaudières, fours), d'électricité (centrales thermiques), transport (moteurs automobiles, aéronautiques, fusées, ...). L'utilisation du pétrole comme source d'énergie primaire a permis un développement de l'humanité sans précédent au cours du XX<sup>ème</sup> siècle. L'utilisation de 1 l de pétrole fournissant autant d'énergie que le travail de 100 hommes pendant 24 heures, l'Homme a pu se libérer progressivement du travail agricole nécessaire à sa subsistance.

Force est de constater que ce développement effréné a un poids environnemental lourd et la préservation de l'environnement sera le défi du XXI<sup>ème</sup> siècle. La programmation de l'épuisement des ressources d'une part mais surtout l'impact de l'homme dans le changement climatique posent les bases de ce défi : « Comment continuer de faire mieux en faisant plus propre avec moins de ressources ? ». La crise écologique a fait apparaître une notion nouvelle dans la définition du progrès : le développement durable. Un développement durable répond aux besoins des générations du présent sans compromettre la capacité des générations futures à répondre aux leurs.

L'étude de la combustion a pour objectif de mieux décrypter les phénomènes phy-

siques mis en jeu dans des chambres de combustion et ainsi de fournir des outils pour les améliorer. Par exemple, le travail des motoristes dans l'industrie automobile permet de disposer de véhicules avec une consommation inférieure à  $4 \text{ l}/100 \text{ km}$ . Cependant les progrès techniques ne suffisent pas à participer à la réduction des émissions des gaz à effet de serre intervenant dans le changement climatique, ils doivent être accompagnés de choix politiques éclairés visant à réduire la consommation d'énergie : protocole de Kyoto, normes environnementales et bientôt le sommet de Copenhague. L'énergie la plus propre restera toujours celle qui n'est pas consommée.

# INTRODUCTION

L'ÉTUDE DE LA COMBUSTION TURBULENTE et de ses mécanismes a pour objectif de mieux comprendre les phénomènes complexes et leurs interactions qui entrent en jeu pour pouvoir les modéliser. L'objectif final de la simulation numérique de la combustion turbulente est de simuler un système industriel complet. En effet les coûts de développement de nouveaux prototypes de turbines ou de moteurs sont très importants. Ils pourraient être sensiblement réduits par une optimisation préalable par simulation. De plus lors des simulations, un plus grand nombre d'informations sont disponibles par rapport à des mesures expérimentales, ce qui permet d'étudier la sensibilité à un paramètre donné. Pour cela il est bien sûr nécessaire que les modèles numériques soient suffisamment prédictifs.

L'amélioration des chambres de combustion peut se faire selon différents critères suivant l'objectif recherché : rendement maximal, moindres émissions polluantes ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}_x$ , ...). Il s'agit également de prédire les instabilités de combustion : un couplage entre des modes acoustiques et la combustion peut entraîner une brusque augmentation du bruit et déstabiliser la flamme jusqu'à la destruction complète de l'installation. Enfin une connaissance précise des transferts de chaleur dans les foyers industriels est importante pour des questions de dimensionnement et de refroidissement. Il est indispensable de connaître l'énergie reçue par la paroi d'un moteur pour en optimiser la durée de vie.

La simulation de la combustion turbulente connaît depuis peu un nouvel essor avec l'introduction de la Simulation aux Grandes Échelles (SGE). Cette technique permet de calculer l'évolution instationnaire de l'écoulement réactif turbulent et élargit significativement la compréhension des processus physiques contrôlant la flamme : mélange, turbulence, chimie, transferts radiatifs, ... D'importantes avancées ont été effectuées dans ce domaine et les simulations réalisées dans des configurations industrielles reproduisent de bonnes tendances. Toutefois dans les études réalisées les échanges radiatifs ne sont pas pris en compte en raison de la complexité du problème à considérer et des temps de calcul prohibitifs. Pourtant le rayonnement, même s'il affecte peu la structure de flamme elle-même, joue un rôle crucial au niveau des flux thermiques aux parois, ou lors des phases transitoires comme l'allumage ou l'extinction. De plus dès que des suies sont produites, le rayonnement redevient un processus important pour la structure de flamme. Enfin la production des espèces polluantes, comme les oxydes d'azote ( $\text{NO}_x$ ), est très sensible à la température [2, 3]. Les études réalisées [2] montrent que des différences de température de l'ordre de 50 K engendrent des différences de 100% sur les concentrations de  $\text{NO}_x$ . Il faut donc tenir compte des échanges radiatifs en combustion pour élargir le domaine de prédiction des simulations.

Cependant les physiques du rayonnement et de la combustion sont radicalement différentes. La combustion est contrôlée par des échanges locaux alors que le rayon-

nement est un mécanisme d'échange à distance. Leur couplage n'est donc pas simple. Un certain nombre d'études de l'impact du rayonnement sur la combustion ont été réalisées dans des simulations moyennées [4] qui confirment que le rayonnement peut avoir un impact significatif sur la formation des polluants. Par ailleurs, la turbulence qui caractérise les écoulements considérés introduit des fluctuations de grandeurs impliquées dans le calcul du rayonnement [4, 5, 6]. Les travaux réalisés dans ce domaine de l'interaction turbulence-rayonnement (TRI) montrent que les champs moyens de l'écoulement ne suffisent pas à calculer correctement les pertes radiatives qui sont fortement influencées par les fluctuations de température et de composition chimique, du fait de leur dépendance non linéaire à ces variables.

A l'inverse, l'effet du rayonnement sur la dynamique de la turbulence et de la flamme, durant des phases transitoires instationnaires par exemple, n'a jamais pu être abordé de façon directe et complète, par manque d'outil adapté.

**L'objectif de ce travail est de proposer un tel outil, dans le contexte de la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente dans des applications industrielles.**

Ce travail de thèse est dans le prolongement direct de la thèse de D. Joseph [2]. Cette thèse avait montré la faisabilité d'un calcul radiatif dans des géométries complexes en utilisant la méthode des ordonnées discrètes sur maillages non-structurés.

Un des premiers objectifs ici est d'identifier les différents modèles pour le calcul radiatif qui représentent un choix optimal en terme de précision/coût de calcul, et de démontrer la validité de ces choix méthodologiques.

Ainsi dans une première partie, les outils nécessaires à la description du rayonnement et de la combustion turbulente sont donnés. Un premier chapitre montre les équations et les modèles de combustion turbulente. Le chapitre suivant rappelle l'équation de transfert radiatif et les méthodes utilisées pour sa résolution. Un chapitre est ensuite dédié plus particulièrement à l'utilisation d'un modèle global pour les propriétés d'absorption des gaz dans des applications de combustion afin de réduire le temps de calcul du rayonnement.

Dans une deuxième partie, l'interaction turbulence-rayonnement sera discutée. Une étude à caractère fondamental sur l'interaction de la turbulence et du rayonnement permet de déterminer les processus physiques de la turbulence qui modifient les transferts radiatifs. Un premier chapitre présente la problématique et l'état de l'art sur cette question fondamentale à l'origine de nombreux travaux. Le chapitre suivant a pour objet d'étudier l'impact de cette interaction dans le contexte de la simulation aux grandes échelles utilisée dans ce travail.

La troisième partie aborde le problème du couplage du rayonnement avec la modélisation de la flamme turbulente. L'impact du modèle de combustion turbulente sur le calcul des échanges radiatifs est évalué, dans un premier chapitre pour une flamme laminaire puis dans un autre chapitre pour une flamme instationnaire en interaction avec une paire de tourbillons.

Après avoir validé la méthodologie du couplage, la dernière partie est consacrée à la réalisation d'un calcul couplé combustion-rayonnement dans le cadre de la simulation aux grandes échelles, objectif initial de la thèse. Le couplage dynamique de la turbulence et du rayonnement pose une difficulté technique de réalisation en raison

---

des temps de restitution très longs des calculs radiatifs. Une stratégie de couplage est proposée dans l'optique d'un optimum en précision/coût de calcul. Enfin dans un dernier chapitre, la méthode développée est appliquée à une flamme turbulente de laboratoire, qui se rapproche d'une configuration industrielle. L'impact du rayonnement sur la combustion turbulente est enfin analysé en détail.



**Première partie**

**Du rayonnement en combustion  
turbulente**



---

## Introduction

Dans cette partie l'ensemble des outils nécessaires à l'étude de l'interaction et du couplage rayonnement-combustion turbulente sont donnés. Dans un premier chapitre, les équations de la combustion sont rappelées. Les niveaux de description de la turbulence sont explicités. Enfin le modèle de combustion turbulente utilisé est présenté. Dans un deuxième chapitre, l'équation de transfert radiatif est explicitée, ainsi que ses différentes méthodes de résolution. Le modèle utilisé dans le solveur radiatif, adapté à la prise en compte de géométries complexes, est présenté plus en détails. Enfin dans un troisième chapitre, un modèle global pour les propriétés d'absorption des gaz est proposé afin de réduire le temps de calcul du rayonnement tout en conservant une précision acceptable dans l'optique d'un couplage avec la combustion turbulente.



# Sommaire

---

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Modélisation de la combustion turbulente</b>                | <b>13</b> |
| 1.1      | ÉQUATIONS DE L'AÉROTHERMOCHIMIE . . . . .                      | 15        |
| 1.2      | MODÉLISATION DE LA TURBULENCE . . . . .                        | 19        |
| 1.3      | MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE EN LES . . . . .      | 24        |
| 1.4      | ASPECTS NUMÉRIQUES . . . . .                                   | 30        |
| <b>2</b> | <b>Modélisation du rayonnement</b>                             | <b>33</b> |
| 2.1      | FORMULATION DU PROBLÈME RADIATIF . . . . .                     | 33        |
| 2.2      | PROPRIÉTÉS SPECTRALES . . . . .                                | 44        |
| 2.3      | MÉTHODES DE RÉOLUTION . . . . .                                | 53        |
| 2.4      | LA MÉTHODE DES ORDONNÉES DISCRÈTES DANS PRISSMA . . . . .      | 55        |
| <b>3</b> | <b>Étude du modèle FS-SNBcK en combustion</b>                  | <b>65</b> |
| 3.1      | LIMITES DE VALIDITÉ DU MODÈLE FS-SNBcK EN COMBUSTION . . . . . | 66        |
| 3.2      | DISCUSSIONS . . . . .  | 77        |
| 3.3      | CONCLUSION . . . . .   | 79        |

---



# MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE

1

La modélisation d'un problème de combustion vise à résoudre les équations de l'aérothermochimie [7]. Ces équations consistent à modéliser l'écoulement d'un fluide dans lequel plusieurs espèces sont transportées et réagissent ensemble en dégageant de la chaleur. De façon générale les combustibles peuvent être des milieux solides, liquides ou gazeux. Le comburant qui oxyde le carburant est généralement l'oxygène de l'air. Ainsi, l'écoulement peut faire intervenir une ou plusieurs phases. C'est par exemple le cas rencontré lors de l'injection de sprays, leur évaporation et la combustion de gouttes ou encore le transport de suies générées par une combustion incomplète d'hydrocarbures. Cette étude se limitera cependant aux systèmes monophasiques de la combustion de gaz.

Deux situations génériques, schématisées sur la Fig. 1.1, peuvent apparaître selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs. Dans les flammes *prémélangées*, les réactifs sont mélangés avant de brûler. Cette configuration est *a priori* plus efficace mais la flamme est susceptible de se propager dans la zone de mélange ce qui pose des problèmes de sécurité. Au contraire dans les flammes *non prémélangées* ou de *diffusion*, les réactifs sont introduits séparément de part et d'autre de la flamme et entrent en contact au sein de la zone réactive. Pour chacune de ces deux configurations le régime peut être *laminaire* ou *turbulent* (voir Fig. 1.2). Dans la plupart des applications, les réactifs, introduits séparément se mélangent partiellement avant de brûler, le régime est alors intermédiaire et partiellement prémélangé.

La Fig. 1.2 donne des exemples de systèmes pratiques dans chacun des cas. L'étude présentée dans le cadre de ce travail se fera dans la situation de flammes prémélangées turbulentes, plus représentatives des applications de moteurs à allumage commandé ou de turbines à gaz, dans la mesure où les réactifs, introduits séparément, se mélangent partiellement avant de brûler.

Le problème de l'aérothermochimie est décrit par un jeu d'équations « macroscopiques », ou Eulériennes, dans le paradigme des milieux continus. Les descripteurs macroscopiques du système caractérisent l'état de la « particule fluide » élémentaire. Dans ce chapitre les équations de conservation liées au problème de la combustion seront d'abord établies sous leur forme générale. La description de la turbulence est une source de difficulté car, bien que contenue dans les équations générales, elle implique des niveaux de discrétisation, spatiale et temporelle, trop fins pour être applicable à des géométries complexes. Il est donc nécessaire d'introduire une modélisation plus ou moins complexe en fonction de l'approche choisie. Cette description modélisée

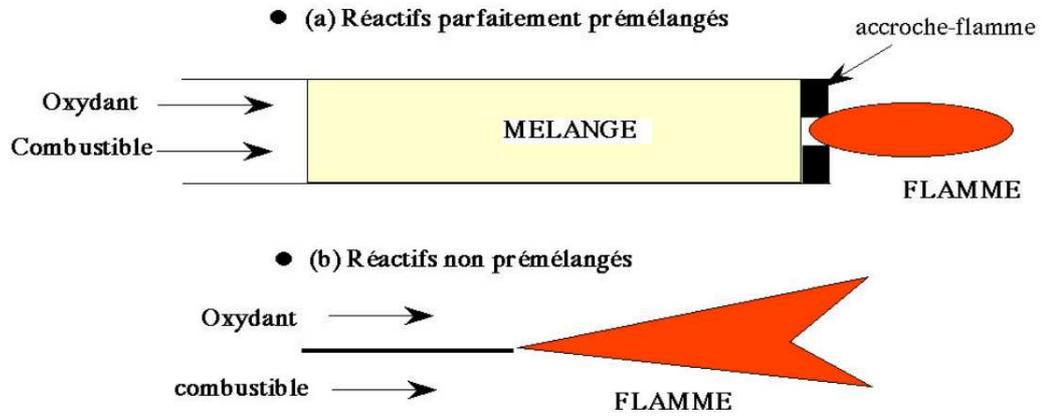


FIG. 1.1 – Flamme prémélangée (a) et flamme de diffusion (b), d'après [8]

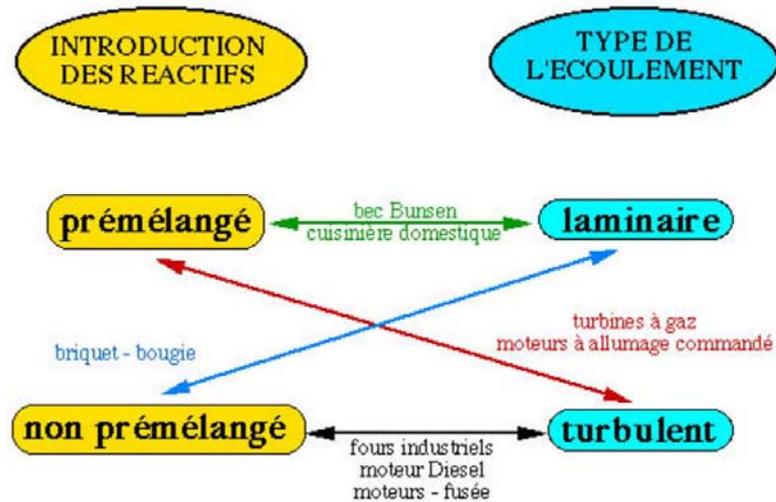


FIG. 1.2 – Systèmes pratiques classés selon le type d'injection (prémélangée ou non) et la nature laminaire ou turbulente de l'écoulement, d'après [8].

de la turbulence implique une modélisation de l'interaction combustion-turbulence. Différentes approches existent, qu'elles soient algébriques, statistiques (pdf) ou géométriques (« front tracking ») [9]. Le modèle de « flamme épaissie » utilisé dans ce travail sera présenté plus en détails. Enfin le traitement des conditions aux limites et les méthodes numériques du solveur employé (AVBP) seront brièvement présentés.

## 1.1 ÉQUATIONS DE L'AÉROTHERMOCHIMIE

Le système d'équations présenté ici pour la combustion turbulente est tel qu'il est résolu dans le solveur AVBP [10].

### 1.1.1 Grandeurs de la Thermochimie

Le modèle mathématique utilisé est constitué des équations de conservation instationnaires, écrites pour un fluide réactif hétérogène, non-isotherme compressible composé de  $K$  espèces chimiques. En considérant un mélange de masse totale  $m$ , de masse volumique  $\rho$  et de masse molaire moyenne  $W$  et en notant  $m_k$ ,  $\rho_k$  et  $W_k$ , la masse, la masse volumique de l'espèce  $k$  et sa masse molaire, la masse volumique du mélange est égale à :

$$\rho = \sum_{k=1}^K \rho_k \quad (1.1)$$

On peut alors définir pour chaque espèce du mélange, sa fraction massique  $Y_k$ , nombre sans dimension, comme :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k}{\rho} \text{ tel que } \sum_{k=1}^K Y_k = 1 \quad (1.2)$$

La masse molaire du mélange est obtenue à partir des fractions molaires d'espèces qui le composent par :

$$W = \left( \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \quad (1.3)$$

La richesse  $\phi$  du mélange est définie comme le rapport combustible ( $F$ ) sur oxydant ( $O$ ) rapporté à sa valeur stoechiométriques :

$$\phi = \left( \frac{Y_F}{Y_O} \right) / \left( \frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st} = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (1.4)$$

où  $s$  est le rapport stoechiométrique massique  $s = 1 / \left( \frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st}$ . La loi des gaz parfaits peut s'écrire :

$$\rho = \frac{PW}{RT} = \frac{P}{RT \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k}} \quad (1.5)$$

où  $P$  et  $T$  désignent respectivement la pression et la température du mélange et  $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.K^{-1}$  la constante des gaz parfaits. Pour chaque espèce, la fraction molaire  $X_k$  est également définie comme :

$$X_k = Y_k \frac{W}{W_k} \text{ tel que } \sum_{k=1}^K X_k = 1 \quad (1.6)$$

La quantité de chaleur mise en jeu pendant une transformation à pression constante (isobare) d'un système thermodynamique qui reçoit ou fournit un travail mécanique est exprimée par l'enthalpie, fonction d'état extensive. L'enthalpie massique d'une espèce  $k$  à la température  $T$  s'écrit :

$$h_k(T) = \underbrace{\Delta h_{f,k}^0(T^0)}_{\text{Enthalpie de formation}} + \underbrace{\int_{T^0}^T c_{pk} dT'}_{\text{Enthalpie sensible}} \quad (1.7)$$

où  $c_{pk}$  représente la chaleur massique de cette espèce à pression constante. La chaleur massique du mélange  $C_p$  est obtenue par la loi de mélange :

$$C_p = \sum_{k=1}^K Y_k c_{pk} \quad (1.8)$$

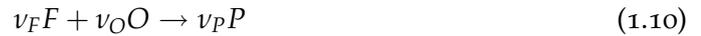
Enfin l'enthalpie massique du mélange est donnée par :

$$h = \sum_{k=1}^K Y_k h_k \quad (1.9)$$

### 1.1.2 Cinétique chimique

La combustion est le résultat de réactions fortement exothermiques issues du contact entre un combustible et un comburant. La description complète de la combustion d'un carburant requiert plusieurs centaines d'espèces et plusieurs milliers de réactions. En pratique dans la cadre de calculs sur des géométries complexes, une chimie simple est utilisée, ce qui permet de retrouver le bon comportement de la flamme en termes d'état d'équilibre et vitesse de flamme (éventuellement allumage). Ces chimies simplifiées ont en général 1 à 4 étapes et 3 à 6 espèces.

Pour une chimie simple à une étape et 3 espèces (le carburant  $F$ , l'oxydant  $O$  et le produit  $P$ ), le schéma réactif s'écrit :



où  $\nu_k$  sont les coefficients stoechiométriques de la réaction.

Le taux de consommation de l'espèce  $F$  s'écrit en utilisant une loi d'Arrhenius :

$$\dot{\omega}_F = \nu_F W_F \left( \frac{\rho Y_F}{W_F} \right)^{s_F} \left( \frac{\rho Y_O}{W_O} \right)^{s_O} A \exp \left( - \frac{T_a}{T} \right) \quad (1.11)$$

Les exposants  $s_F$ ,  $s_O$ , la constante préexponentielle  $A$  et la température d'activation  $T_a$  sont donnés par le modèle de cinétique chimique.

Le dégagement de chaleur s'exprime comme :

$$\dot{\omega}_T = Q_0 \dot{\omega}_F \quad (1.12)$$

avec  $Q_0 = - \sum_{k=1}^K \Delta \nu_k h_k^0$  la quantité de chaleur dégagée par une unité de masse de carburant consommée.

### 1.1.3 Équations de conservation

La description de l'écoulement se base sur les équations de conservation, de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la masse de chaque espèce. Les quelques éléments de thermodynamique présentés précédemment permettent de prendre en compte le terme source d'origine chimique du milieu réactif.

Dans ce qui suit, une notation condensée a été utilisée pour les opérateurs de dérivation :  $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$  et  $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ . La convention d'Einstein sur les indices répétés est également utilisée.

#### Conservation de la quantité de mouvement

$$\partial_t(\rho u_i) + \partial_j(\rho u_i u_j) = -\partial_i P + \partial_j \tau_{ij} + \sum_{k=1}^K \rho Y_k F_{k,i} \quad (1.13)$$

où  $F_{k,i}$  est la composante dans la direction  $i$  du vecteur des forces extérieures sur l'espèce  $k$ . Si la gravité est négligée et en l'absence de forces extérieures, ce terme est nul.

$\tau_{ij}$  est le tenseur des contraintes visqueuses. Dans l'approximation de Boussinesq, il est relié au tenseur des déformations par :

$$\tau_{ij} = 2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}) \quad (1.14)$$

où  $\delta_{ij}$  désigne le symbole de Kronecker. Le tenseur des déformations est donné par :

$$S_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (1.15)$$

La viscosité laminaire est calculée par la loi de Sutherland :

$$\mu = c_1 \frac{T^{1/2}}{T + c_2} \quad (1.16)$$

avec  $c_1 = 1.457 \cdot 10^{-6}$  et  $c_2 = 110,4K$ . Cette formule empirique pour la viscosité de l'air est supposée encore valable pour des mélanges de gaz dilués dans l'air. Dans des modèles de chimie simple, une loi en puissance peut être aussi utilisée :

$$\mu = \left(\frac{T}{c_1}\right)^{c_2} \quad (1.17)$$

#### Conservation de l'énergie

L'énergie totale  $E$  est définie comme la somme de l'énergie interne  $e$  et de l'énergie cinétique :  $E = e + \frac{1}{2}u_i^2$ .

$$\partial_t(\rho E) + \partial_i((\rho E + P)u_i) = \partial_j(u_i \tau_{ij}) - \partial_i q_i + \dot{\omega}_T \quad (1.18)$$

où le terme  $\dot{\omega}_T$  représente le dégagement de chaleur dû à la réaction de combustion. Le flux de chaleur  $\partial_i q_i$  représente les échanges par conduction et par rayonnement. Il est donné par :

$$\partial_i q_i = -\partial_i(\lambda \partial_i T) + \partial_i \left( \sum_{k=1}^K \rho h_k Y_k v_{d,k;i} \right) + S_r \quad (1.19)$$

Le premier terme de l'Eq. 1.19 représente le flux de conduction thermique, il est modélisé par une loi de Fourier :

$$q_{\text{thermique},i} = -\lambda \partial_i T \quad (1.20)$$

où  $\lambda$  est la conductivité thermique, définie par :

$$\lambda = \rho C_p D_T = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (1.21)$$

$D_T$  est la diffusivité thermique. Le nombre de Prandtl,  $Pr$ , est supposé indépendant de la composition du mélange.

Le deuxième terme de l'Eq. 1.19 représente l'effet Dufour où  $\mathbf{v}_{d,k}$  la vitesse de diffusion de l'espèce  $k$ . Il correspond au flux de chaleur généré par un gradient massiques et est en général négligé.

Enfin le dernier terme de l'Eq. 1.19,  $S_r$  est le terme source radiatif. Il contient toute la complexité du problème du transfert radiatif qui sera explicité au chapitre suivant. Le flux radiatif  $\mathbf{q}_r$  associé est tel que :

$$S_r = \partial_i q_{r,i} \quad (1.22)$$

### Conservation des espèces

$$\partial_t(\rho Y_k) + \partial_i(\rho Y_k u_i) = -\partial_i J_{k,i} - \dot{\omega}_k \quad (1.23)$$

où le flux de diffusion des espèces  $\mathbf{J}_k$  est donné par une loi en gradient, comme pour le flux de diffusion de la chaleur, appelée loi de Fick :

$$J_{k,i} = -\rho D_k \partial_i Y_k \quad (1.24)$$

Tout comme la diffusivité thermique  $D_T$ , la diffusivité de l'espèce  $k$ ,  $D_k$ , est proportionnelle à la viscosité laminaire :

$$\rho D_k = \frac{\mu}{Sc_k} \quad (1.25)$$

où  $Sc_k$  est le nombre de Schmidt associé à l'espèce  $k$ . Les flux de diffusion dus à l'effet Soret sont négligés.

La conservation de la masse dans un calcul multi-espèces est assurée par la relation :

$$\sum_{k=1}^K Y_k V_{k,i} = 0 \quad (1.26)$$

où  $V_{k,i}$  est la vitesse de diffusion de l'espèce  $k$  dans la direction  $i$ . En utilisant l'approximation de Hirschfelder-Curtis, ces vitesses s'expriment comme un gradient de l'espèce  $k$  :

$$Y_k V_{k,i} = D_k \frac{W_k}{W} \partial_i X_k = \frac{\mu}{S_{C_k}} \frac{W_k}{W} \partial_i X_k \quad (1.27)$$

Or la somme de cette expression sur toutes les espèces ne vérifie pas forcément l'Eq. 1.26. Une vitesse de correction  $V^c$  est alors ajoutée à la vitesse de convection pour assurer la conservation de la masse :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^K \frac{\mu}{S_{C_k}} \frac{W_k}{W} \partial_i X_k \quad (1.28)$$

Le flux de diffusion des espèces s'écrit alors :

$$J_{k,i} = -\rho D_k (\partial_i Y_k - Y_k V_i^c) \quad (1.29)$$

## 1.2 MODÉLISATION DE LA TURBULENCE

La turbulence est un régime d'écoulement de fluides visqueux dont les mécanismes internes de transfert d'énergie maintiennent une hiérarchie de structures tourbillonnaires qui s'étendent sur un intervalle continu d'échelles macroscopiques. La turbulence se développe quand le nombre de Reynolds,  $Re$  (rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses) atteint des valeurs suffisamment importantes. Il est défini comme  $Re = UL/\nu$  où  $U$  est la vitesse moyenne de l'écoulement,  $L$  une longueur caractéristique de l'écoulement et  $\nu$  la viscosité cinématique. Les propriétés de la turbulence sont associées à :

- un caractère aléatoire ;
- des phénomènes instationnaires :  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $T$  et  $P$  sont instationnaires ;
- des phénomènes non linéaires :
  - coexistence de mouvement à des échelles très différentes,
  - transfert d'énergie entre les échelles,
  - énergie répartie des grandes structures (taille fixée par la géométrie de l'écoulement  $L$ ) vers les petites structures (taille fixée par le caractère dissipatif de l'écoulement  $\eta$ ),
  - énergie des grandes structures issue de l'écoulement moyen.

La turbulence a pour effets de :

- augmenter la dissipation,
- étirer les lignes de courant,
- accroître le mélange,
- augmenter les transferts aux parois.

Les applications industrielles de combustion utilisent le plus souvent des écoulements turbulents. En effet ceux-ci accroissent considérablement le mélange et l'efficacité de la combustion est fortement augmentée. Cependant l'interaction entre la turbulence et la combustion est complexe et peut dans certains cas inhiber la combustion, voire éteindre la flamme. Cette interaction est fortement non linéaire et pose des problèmes de modélisation.

### 1.2.1 Les différentes approches

La résolution des équations de l'aérothermochimie instationnaire implique de prendre en compte la dynamique de toutes les échelles spatio-temporelles présentes. Pour représenter numériquement la totalité de ces échelles, la discrétisation doit être suffisamment fine sur un domaine suffisamment grand : les pas de discrétisation en espace ( $\Delta x$ ) et en temps ( $\Delta t$ ) de la simulation doivent être respectivement plus petits que la longueur et le temps caractéristiques associés à la plus petite échelle dynamiquement active. En même temps le domaine de simulation doit contenir suffisamment de grandes structures pour obtenir des statistiques fiables. Ce critère de rapport d'échelles peut être très contraignant et dépend du nombre de Reynolds.

Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope (T.H.I.) instationnaire, le rapport entre l'échelle la plus énergétique  $l$  et la plus petite échelle dynamiquement active  $\eta$  est évalué par ?? :

$$\frac{l}{\eta} = O\left(Re_t^{9/4}\right) \quad (1.30)$$

où  $Re_t$  est le nombre de Reynolds turbulent.  $Re_t = \frac{u'l}{\nu}$ , avec la fluctuation de vitesse  $u' = \sqrt{q}$  où  $q$  est l'énergie cinétique turbulente et  $l$ , l'échelle intégrale.

Lorsque ce critère est respecté, le système d'équation présenté au paragraphe 1.1.3 peut être directement résolu. Ce type de simulation, très coûteuse en mémoire et temps de calcul, est devenu accessible grâce aux progrès des méthodes numériques et des moyens informatiques : c'est la Simulation Numérique Directe<sup>1</sup> (S.N.D.). En utilisant des schémas numériques d'ordre élevé pour éviter d'introduire de la diffusion numérique, ces simulations permettent de réaliser de véritables « expériences numériques ». Cependant leur coût CPU très important les limite à des configurations simples et des nombres de Reynolds modérés.

Pour simuler un écoulement turbulent dans des géométries complexes à des nombres de Reynolds élevés il est nécessaire d'utiliser des maillages qui ne respectent pas le critère de la DNS. Deux approches sont alors possibles (Fig. 1.3 à 1.5) :

- La Simulation des Équations Moyennées au sens de Reynolds<sup>2</sup>, fournit une solution moyenne de l'écoulement en modélisant toutes les échelles de la turbulence. Cette approche est très utilisée dans l'industrie en raison de sa rapidité pour des nombres de Reynolds élevés. Cependant, elle est peu prédictive et ne fournit pas d'informations instationnaires.

Dans cette approche, la solution exacte  $\mathbf{u}$  est décomposée comme la somme de sa moyenne statistique  $\langle \mathbf{u} \rangle$  et d'une fluctuation aléatoire  $\mathbf{u}'$  :

$$\mathbf{u} = \langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}' \quad (1.31)$$

Pour des écoulements stationnaires en moyenne, la moyenne statistique est associée à une moyenne temporelle d'après le principe d'ergodicité :

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \bar{\mathbf{u}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{u} dt \quad (1.32)$$

<sup>1</sup>D.N.S. pour « Direct Numerical Simulation »

<sup>2</sup>R.A.N.S pour « Reynolds Averaged Numerical Simulation »

- La Simulation aux Grandes Échelles<sup>3</sup> (S.G.E) donne accès à des variables filtrées dans des écoulements complexes instationnaires à des  $Re$  élevés. Seules les plus grandes échelles de l'écoulement (*i.e.* les modes basses fréquences) sont résolues. Les mouvements des échelles non résolues sont représentés par un *modèle de sous maille* dont le rôle est de reproduire l'effet de ces mouvement de petite échelle sur les grandes échelles. Une *longueur de coupure* est définie entre les petites et les grandes échelles. Un point fort de cette approche repose sur l'hypothèse de Kolmogorov selon laquelle les micro échelles turbulentes ont un comportement dissipatif universel. En effet, si l'écoulement atteint un nombre de Reynolds suffisamment grand l'équilibre des structures de micro échelle ne dépend pas des conditions particulières de l'écoulement, et la méthode peut donc être indépendante de l'écoulement étudié. Ce travail se place exclusivement dans le cadre de LES car ces simulations permettent de résoudre une partie des structures tourbillonnaires (cf Fig. 1.3) et d'étudier des phénomènes instationnaires à l'échelle de temps de la turbulence (allumage, extinction, instabilités de combustion, ...).

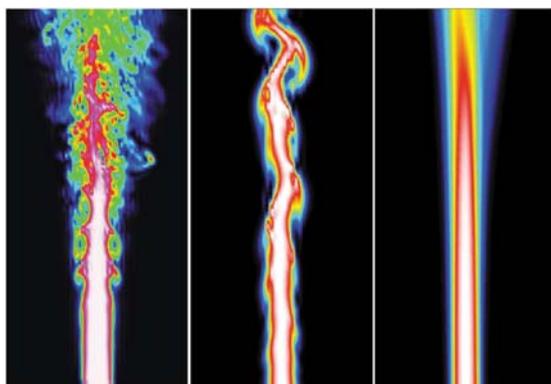


FIG. 1.3 – Modélisation d'une flamme 1) DNS, 2) LES, 3) RANS, Remerciements Laurent Gicquel.

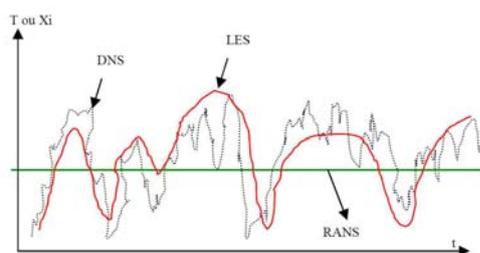


FIG. 1.4 – Évolution d'une grandeur turbulente en DNS, LES et RANS, d'après [8].

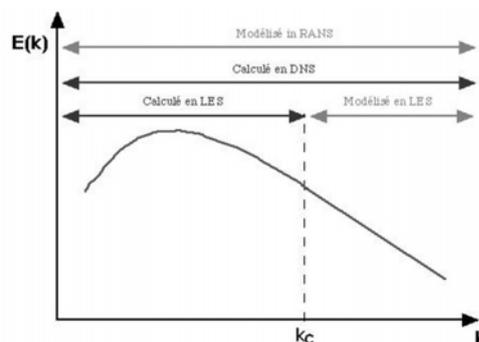


FIG. 1.5 – Spectre d'énergie pour une THI avec les approches DNS, LES et RANS, d'après [8].

### 1.2.2 La Simulation aux Grandes Échelles

La séparation des échelles est réalisée par l'application d'un filtre passe-haut en échelles (*i.e.* passe-bas en fréquences). Mathématiquement ce filtrage est réalisé dans

<sup>3</sup>L.E.S. pour « Large Eddies Simulation »

l'espace physique comme un produit de convolution. La partie résolue d'une variable spatio-temporelle  $\bar{\mathbf{u}}$  est définie formellement par la relation :

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{u}(\mathbf{x})G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')d\mathbf{x}' \quad (1.33)$$

où  $G$  est le filtre à une certaine longueur de coupure  $\Delta_c = 1/k_c$ . Plusieurs types de filtres sont possibles : le filtre boîte dans l'espace physique, le filtre gaussien et le filtre porte dans l'espace spectral (voir [11] pour plus de détails sur le filtrage). En pratique c'est le filtre boîte qui est utilisé et le filtrage est réalisé par le maillage lui-même.

Selon le type de filtre utilisé (filtre boîte ou gaussien) l'opération de filtrage peut ne pas être idempotente ( $\overline{\bar{\mathbf{u}}} \neq \bar{\mathbf{u}}$  et  $\overline{\mathbf{u}'} \neq 0$ ) et ne pas commuter strictement avec les opérateurs de dérivation spatiale ou temporelle. Ce type d'erreur est la plupart du temps négligé. Il est communément admis que les erreurs dues au schéma d'intégration numérique sont du même ordre de grandeur.

Enfin pour éviter de faire apparaître des corrélations de type  $\overline{\rho'\mathbf{u}'}$ , difficiles à modéliser le filtrage de Favre est choisi :

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\overline{\rho\mathbf{u}}}{\bar{\rho}} \quad (1.34)$$

Les fluctuations se calculent à partir de la valeur filtrée :

$$\mathbf{u}'' = \mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}} \quad (1.35)$$

On garde ainsi une forme conservative des équations de conservation dans des écoulements à densité variable, forme sur laquelle sont basés les principaux codes de calcul. Les valeurs expérimentales mesurées doivent être filtrées et traitées pour calculer des moyennes de Favre pour permettre une comparaison à des résultats de LES [12].

### 1.2.3 Équations de conservation filtrées

L'opération de filtrage des équations de conservation instationnaires utilisant les Eq. 1.33 et 1.34 conduit aux équations suivantes où les termes ayant comme exposant  $t$  désignent les composantes sous-maille :

– **Conservation de la quantité de mouvement :**

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{u}_i + \partial_j(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)) = -\partial_i\bar{P} - \partial_j(\tilde{\tau}_{ij} + \tilde{\tau}_{ij}^t) \quad (1.36)$$

– **Conservation de l'énergie :**

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{E}) + \partial_i((\bar{\rho}\tilde{E} + \bar{P})\tilde{u}_i) = \partial_j(\tilde{u}_i(\tilde{\tau}_{ij} + \tilde{\tau}_{ij}^t)) - \partial_i(\tilde{q}_{th,i} + \tilde{q}_{th,i}^t) + \bar{S}_r + \bar{\omega}_T \quad (1.37)$$

– **Conservation des espèces :**

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{Y}_k) + \partial_i(\bar{\rho}\tilde{Y}_k\tilde{u}_i) = -\partial_i(\tilde{J}_{k,i} + \tilde{J}_{k,i}^t) - \bar{\omega}_k \quad (1.38)$$

Les termes de diffusion moléculaire filtrés, comme dans le cas non filtré, sont modélisés par :

– **Tenseur des contraintes visqueuses filtrées :**  $\tilde{\tau}_{ij} = 2\mu(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{S}_{ll})$   
avec  $\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i\tilde{u}_j + \partial_j\tilde{u}_i)$

- **Flux de diffusion thermique filtré** :  $\widetilde{q}_{th,i} = -\lambda \partial_i \widetilde{T}$
- **Flux de diffusion d'espèce filtré** :  $\widetilde{J}_{k,i} = -\bar{\rho} \left( D_k \partial_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{Y}_k \widetilde{V}_i^c \right)$

Il faut noter que certains termes de type  $\overline{\Phi}$  ont été remplacés par  $\widetilde{\Phi}$ , comme par exemple dans l'expression du tenseur des contraintes visqueuses filtré où  $\widetilde{u}_i$  remplace  $\overline{u}_i$  qui n'est pas accessible avec les variables filtrées au sens de Favre. L'effet de cette approximation sur les termes visqueux a été validé par Erlebacher [13].

Le filtrage fait apparaître des corrélations d'ordre deux qu'il faut modéliser pour fermer le système :

- Le **tenseur des contraintes de Reynolds sous maille** :  $\widetilde{\tau}_{ij}^t = -\bar{\rho}(\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j)$   
La partie isotrope du tenseur  $\widetilde{\tau}_{ij}^t$  est négligée et la partie anisotrope est modélisée par une hypothèse de viscosité turbulente de type Boussinesq :

$$\widetilde{\tau}_{ij}^t \approx 2\mu_t \left( \widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{S}_{ll} \right) \quad (1.39)$$

La viscosité turbulente  $\mu_t$  est estimée par un modèle type WALE [14, 15] dans le solveur utilisé. Cette valeur est également utilisée dans le calcul des corrélations vitesse-température et vitesse-fraction massique.

- Le **flux de diffusion thermique sous-maille** :  $\widetilde{q}_{th,i}^t = \widetilde{u}_i \widetilde{T} - \widetilde{u}_i \widetilde{T}$

$$\widetilde{q}_{th,i}^t \approx -\frac{\mu_t}{Pr^t} \partial_i \widetilde{T} \text{ avec } 0,7 \lesssim Pr^t \lesssim 0,9 \quad (1.40)$$

- Le **flux de diffusion des espèces de sous-maille** :  $\widetilde{J}_{k,i}^t = \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k$

$$\widetilde{J}_{k,i} \approx -\bar{\rho} \left( \frac{\mu_t}{Sc_k^t} \partial_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{Y}_k \widetilde{V}_i^{c,t} \right) \text{ avec } 0,7 \lesssim Sc_k^t \lesssim 0,9 \quad (1.41)$$

avec la vitesse de correction turbulente  $\widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^K \frac{\mu_t}{Sc_k^t} \frac{W_k}{W} \partial_i \widetilde{X}_k$

Enfin des termes sources filtrés apparaissent dans l'équation de l'énergie :

- Le **terme source chimique**  $\overline{\dot{\omega}}_T$ , modélisé par une loi d'Arrhenius en exponentielle doit être modifié, En effet :

$$\overline{\nu_F W_F \left( \frac{\rho Y_F}{W_F} \right)^{S_F} \left( \frac{\rho Y_F}{W_F} \right)^{S_F} A \exp \left( -\frac{T_a}{T} \right)} \neq \nu_F W_F \left( \frac{\widetilde{\rho Y}_F}{W_F} \right)^{S_F} \left( \frac{\widetilde{\rho Y}_F}{W_F} \right)^{S_F} A \exp \left( -\frac{T_a}{\widetilde{T}} \right) \quad (1.42)$$

La loi d'Arrhenius étant fortement non linéaire, le terme  $\overline{\dot{\omega}}$  fait apparaître des corrélations croisées ( $\widetilde{Y}'_F \widetilde{Y}'_O, \widetilde{Y}'_F \widetilde{T}', \dots$ ), qui nécessitent une modélisation pour définir la relation de fermeture. Ces corrélations correspondent à l'interaction sous-maille entre la combustion et la turbulence. La modélisation de ce terme sera explicitée dans la section 1.3.

- Le **terme source radiatif**  $\overline{S}_r$ . Il est obtenu en résolvant l'équation de transfert radiatif qui sera présentée dans le chapitre suivant. La résolution du transfert radiatif dépend des champs de température et de concentration, avec une dépendance là aussi non linéaire :

$$\overline{S_r(T, Y_k)} \neq S_r(\widetilde{T}, \widetilde{Y}_k) \quad (1.43)$$

Une partie importante de ce travail de thèse a consisté à évaluer l'impact du filtrage de la LES ainsi que l'impact du modèle de combustion sur le terme source radiatif  $\overline{S}_r$ .

### 1.3 MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE EN LES

Dans le cas d'une flamme prémélangée, l'épaisseur du front de flamme est de l'ordre de 0,1 à 1 mm ce qui est bien plus petite que la taille des mailles LES. Ainsi, l'interaction du terme source chimique avec la turbulence est importante au niveau sous-maille et ne peut être négligée. Les modèles de combustion turbulente s'attachent essentiellement à proposer des relations de fermeture du terme source chimique  $\bar{\omega}_T$  qui représente cette interaction. Les principales classes de modèles pour la LES sont résumées ci dessous.

#### Modèles algébriques

Un exemple de modèle basé sur la loi d'Arrhenius est le modèle de combustion de Magnussen [16]. Ce modèle tente de prendre en compte la turbulence en stipulant que le taux de réaction observé est le maximum du taux de réaction chimique  $\omega^{kin}$ , basé sur une loi d'Arrhenius des grandeurs filtrées, et du taux de mélange turbulent  $\omega^{mix}$ , basé sur l'énergie cinétique de sous maille  $q^{sgs}$  et sur son taux de dissipation  $\epsilon^{sgs}$  :

$$\begin{aligned}\bar{\omega}_T &= \max(\omega^{kin}, \omega^{mix}) \\ 1/\omega^{mix} &= \frac{q^{sgs}}{\epsilon^{sgs}} = C_D \bar{\Delta} \sqrt{2q^{sgs}}\end{aligned}\quad (1.44)$$

Cette modélisation est grossière car elle omet que dans une flamme prémélangée la combustion n'est pas contrôlée par les temps de mélange mais par la turbulence qui impose le plissement de la flamme.

#### Modèles statistiques

Les approches statistiques (ou modèles pdf) ont pour objectif de décrire de façon statistique les propriétés des états intermédiaires dans le front de flamme. La densité de probabilité d'avoir une fraction massique  $Y$  en  $\mathbf{x}$  à  $t$  dans l'intervalle  $dY$  autour de  $Y^*$  est donnée par  $\bar{P}(Y^*; \mathbf{x}, t)dY$ , où  $Y^*$  est une réalisation de la variable aléatoire  $Y$ . Ces pdf vérifient les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\int_Y \bar{P}(Y^*; \mathbf{x}, t)dY &= 1 \\ \int_Y Y^* \bar{P}(Y^*; \mathbf{x}, t)dY &= \overline{Y(\mathbf{x}, t)} \\ \int_Y (Y^* - \bar{Y})^2 \bar{P}(Y^*; \mathbf{x}, t)dY &= \overline{Y^2(\mathbf{x}, t)}\end{aligned}\quad (1.45)$$

Dans le cas d'un écoulement multi-espèces et pour tenir compte de la statistique de température, une densité de probabilité mixte (« joint pdf ») est introduite :  $\bar{P}(Y_1^*, \dots, Y_K^*, T; \mathbf{x}, t)$ . Ainsi la valeur moyenne d'une fonction  $f(\mathbf{x}, t)$  est calculée comme :

$$\overline{f(\mathbf{x}, t)} = \int_{Y_1} \dots \int_{Y_K} \int_T f(\mathbf{x}, t) \bar{P}(Y_1^*, \dots, Y_K^*, T; \mathbf{x}, t) dY_1 \dots dY_K dT \quad (1.46)$$

Dans la cas de flamme de diffusion avec une chimie simple, la pdf mixte peut être exprimée en pdf conditionnelles par rapport à la pdf de la fraction de mélange. De façon générale, les modèles à pdf se répartissent en deux classes (voir [7, 9] pour plus de détails) :

- les modèles à pdf présumée, ces modèles supposent une forme pour la pdf de la fraction de mélange, généralement à l'aide de fonctions bêta,
- les modèles qui résolvent une équation de transport pour la pdf à partir de l'équation de la variable de progrès.

### Modèles géométriques

Le principe est de considérer que la flamme, assimilable à une interface infiniment mince (approximation de flammelettes), peut être décrite de façon cinématique (voir [17] pour plus de détails). L'interface est suivie au moyen d'une variable  $G$  et se situe au niveau d'une isoligne  $G = G^*$ . La variable filtrée, au sens de Favre,  $\tilde{G}$  est transportée par l'équation :

$$\begin{aligned} \partial_t(\bar{\rho}\tilde{G}) + \partial_i(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{G}) &= -S^{sgs} - \partial_i G^{sgs} \\ S^{sgs} &= \overline{\rho_0 s_L^0 |\nabla G|} \\ G^{sgs} &= \bar{\rho} [\mathbf{u}\tilde{G} - \tilde{\mathbf{u}}\tilde{G}] \end{aligned} \quad (1.47)$$

Le terme  $G^{sgs}$  est associé au transport turbulent de  $G$ , il est très souvent modélisé par une loi de diffusion :

$$G^{sgs} = -\frac{\bar{\rho}v_t}{Sc^G} \nabla \tilde{G} \quad (1.48)$$

Le terme  $S^{sgs}$  est associé au déplacement du front de flamme et à la vitesse de flamme turbulente. Menon [18] propose une formule inspirée des modèles RANS :

$$S^{sgs} \simeq \rho_0 \bar{s}_T |\nabla \tilde{G}| \quad (1.49)$$

où  $s_T$  est la vitesse turbulente sous maille. La relation de fermeture est étant généralement du type :

$$\frac{\bar{s}_T}{s_L} = 1 + \alpha \left( \frac{\overline{u'}}{s_L} \right)^n \quad (1.50)$$

où  $\overline{u'}$  est une estimation de l'échelle de turbulence de sous maille. Il n'existe pas de relation universelle pour définir cette quantité qui dépend beaucoup du régime de combustion, la nature des réactifs, ...

Le modèle de flamme utilisé dans la suite de ce travail pour les flammes prémélangées est le modèle de flamme épaissie, originellement proposé par Butler et O'Rourke [19]. Il repose sur une résolution explicite du front de flamme décrit par une loi d'Arrhenius. Ce front de flamme est épaissi de façon contrôlée afin de pouvoir être résolu sur le maillage de la LES et un modèle de sous maille lui est adjoint pour rendre compte de la surface de flamme non résolue. Ce modèle est présenté en détail dans le paragraphe suivant.

### 1.3.1 Le modèle de flamme épaissie dynamique en LES

Ce modèle a pour origine les travaux de Butler et O'Rourke [19]. Il repose sur la résolution de la structure interne du front de flamme suivant une loi d'Arrhenius qui peut s'écrire dans le cas d'une chimie simple :

$$\dot{\omega}_F = AY_F Y_O \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (1.51)$$

**Flamme laminaire :** Pour une flamme laminaire, régie par le système d'équations du paragraphe 1.2.3, des grandeurs caractéristiques comme la vitesse de flamme laminaire  $s_l^0$  et l'épaisseur de flamme laminaire  $\delta_l^0$  sont définies. Il est possible de montrer que [7] :

$$\begin{aligned} s_l^0 &\propto \sqrt{D\dot{\omega}_F} \\ \text{et } \delta_l^0 &\propto \frac{D}{s_l^0} \end{aligned} \quad (1.52)$$

Dans le régime de flammelettes, qui est celui rencontré dans la plupart des applications, la plus petite taille caractéristique est fixée par l'épaisseur du front de flamme. C'est donc  $\delta_l^0$  qui fixe la taille du maillage  $\Delta_{DNS}$  en DNS. En LES,  $\delta_l^0$  est d'un ordre de grandeur inférieur à la taille du maillage. Une propriété particulière de la flamme de prémélange est alors utilisée : en multipliant la diffusivité moléculaire par  $F$ , et en divisant le terme source  $\dot{\omega}_F$  par  $F$ , la structure de flamme est épaissie tout en conservant ses propriétés globales telle que la vitesse de flamme  $s_l^0$ . Ainsi en remplaçant  $D$  par  $FD$  et  $\dot{\omega}_F$  par  $\frac{\dot{\omega}_F}{F}$  pour une flamme laminaire la flamme est  $F$  fois plus épaisse, voir Fig. 1.6, mais se propage à la même vitesse (cf Eq. 1.52).

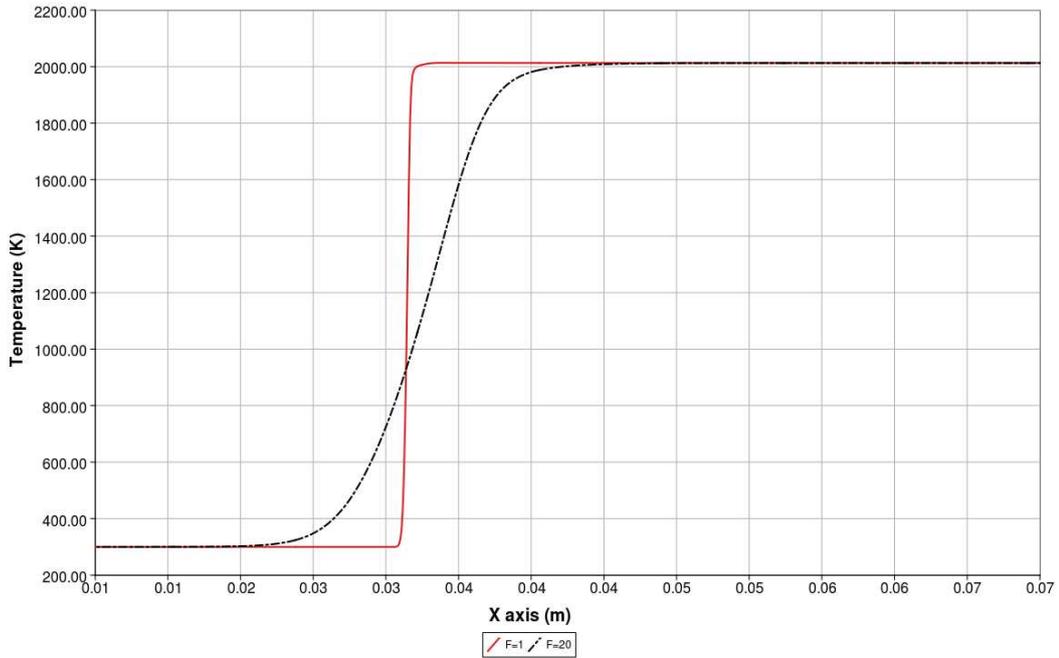


FIG. 1.6 – Exemple de profils de température pour une flamme laminaire de méthane sans épaississement et pour un épaississement de  $F = 20$ .

Ainsi, le problème de résolution du front de flamme posé par la LES est surmonté en appliquant cette transformation sur le front de flamme. Pour un maillage LES, où  $\Delta_{LES} = F\Delta_{DNS}$ , le choix est fait de résoudre une flamme  $F$  fois plus épaisse que la flamme réelle et qui sera donc résolue sur le maillage de la LES :

$$\frac{F\delta_l^0}{\Delta_{LES}} = \frac{\delta_l^0}{\Delta_{DNS}} \simeq 10 \text{ à } 20 \quad (1.53)$$

L'épaississement  $F$  est choisi tel qu'il y ait une dizaine de points dans le front de flamme.

**Flamme turbulente** : Dans le cas d'une flamme de prémélange turbulente, l'efficacité de la combustion est directement liée à la surface d'échange entre les gaz frais et les gaz brûlés : plus la surface de flamme est importante, plus le dégagement de chaleur l'est. Or, comme l'illustre la Fig. 1.7, la flamme épaissie perd de sa capacité à se plisser, une partie de la surface de flamme n'étant plus explicitement résolue.

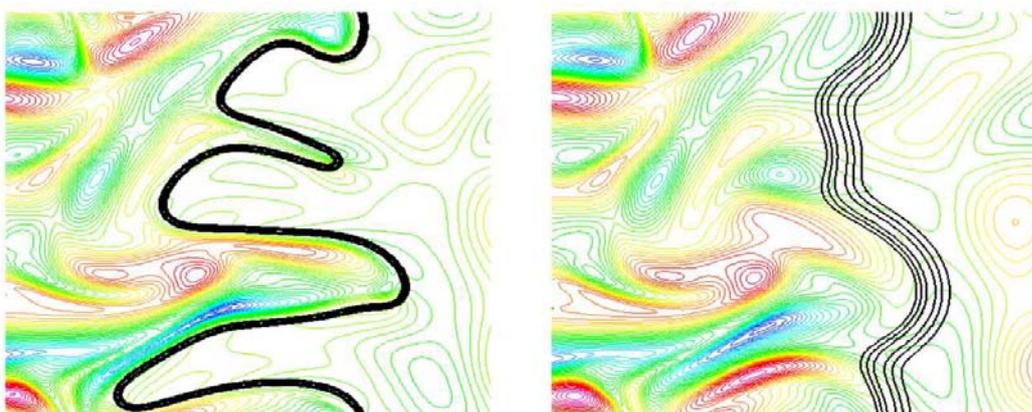


FIG. 1.7 – Influence de l'épaississement dans l'interaction combustion-turbulence ( $F = 1$  et  $F = 5$ ). Le taux de réaction est représenté en noir le long du front de flamme, superposé au champ de vitesse. La turbulence augmente le plissement de la flamme et donc la vitesse de réaction. L'épaississement réduit le plissement et ainsi la vitesse de réaction, ce qui est compensé par la fonction d'efficacité. D'après [7].

Pour modéliser le défaut de plissement de la contribution sous-maille et retrouver la bonne vitesse de flamme turbulente, la fonction d'efficacité  $\zeta$  est introduite. Elle est fonction de l'épaisseur de flamme non épaissie ( $\delta_l^0$ ), de l'épaisseur de flamme épaissie ( $\delta_l^1$ ), d'une échelle de filtrage de l'ordre de grandeur de la flamme épaissie ( $\Delta_c$ ) et de la fluctuation de vitesse turbulente à cette échelle ( $u'_{\Delta_c}$ ). Les détails sur la fonction d'efficacité sont donnés dans [20, 21].

Dans le contexte LES, l'équation de transport du carburant filtrée s'écrit :

$$\partial_t(\bar{\rho}\tilde{Y}_F) + \partial_i(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_F) + \partial_i Y_i^{sgs} = \overline{\nabla \cdot (\rho D \nabla Y_F)} + \bar{\omega}_F \quad (1.54)$$

Trois termes de cette équation nécessitent une fermeture :

- Le terme source chimique  $\bar{\omega}_f = AY_F Y_O \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right)$ ,
- Le transport turbulent sous-maille  $Y_i^{sgs} = \bar{\rho}(u_i \tilde{Y}_F - \tilde{u}_i \tilde{Y}_F)$ ,
- le terme de diffusion  $\overline{\nabla \cdot (\rho D \nabla Y_F)}$ .

L'équation de transport du carburant pour une flamme turbulente en DNS (équation non filtrée), s'écrit en utilisant le modèle épaissi :

$$\partial_i(\rho Y_F) + \partial_i(\rho u_i Y_F) = \nabla \cdot (\rho F \xi D \nabla Y_F) + \frac{\xi A}{F} Y_F Y_O \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (1.55)$$

Cette équation doit être ensuite filtrée sur un maillage de LES en choisissant  $F$ . Pour un  $F$  donné tous les paramètres nécessaires pour calculer  $\xi$  sont fixés.

Le front de flamme ayant été épaissi avant le filtrage, les gradients de fraction massique, température, densité, *etc* ont déjà une taille caractéristique supérieure à  $\Delta_{LES}$  et il peut être écrit :

$$\widetilde{Y}_F \simeq Y_F, \widetilde{Y}_O \simeq Y_O, \widetilde{T} \simeq T \text{ et } \bar{\rho} \simeq \rho$$

Ainsi, le terme source filtré est calculé par :

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\xi A}{F} Y_F Y_O \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right)} &\simeq \overline{\frac{\xi A}{F} \widetilde{Y}_F \widetilde{Y}_O \exp\left(-\frac{T_a}{\widetilde{T}}\right)} \\ &= \frac{\xi A}{F} \widetilde{Y}_F \widetilde{Y}_O \exp\left(-\frac{T_a}{\widetilde{T}}\right) \end{aligned} \quad (1.56)$$

et les fluctuations sous-maille peuvent être négligées car elles sont prises en compte *via* la fonction d'efficacité.

Les autres termes non linéaires sont traités de la même façon :

$$\begin{aligned} \overline{\nabla \cdot (\rho F \xi D \nabla Y_F)} &\simeq \overline{\nabla \cdot (\bar{\rho} F \xi D \nabla \widetilde{Y}_F)} \\ &= \nabla \cdot (\bar{\rho} F \xi D \nabla \widetilde{Y}_F) \end{aligned} \quad (1.57)$$

$$Y^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u}_i \widetilde{Y}_F - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_F)$$

$$\text{avec } \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_F = \frac{\overline{\rho u_i Y_F}}{\bar{\rho}} \simeq \frac{\overline{\rho(u_i + u_i'') Y_F}}{\bar{\rho}} = \widetilde{u}_i \widetilde{T}_F + \widetilde{u}_i'' \widetilde{Y}_F = \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_F \quad (1.58)$$

donc  $Y^{sgs} = 0$  dans le front de flamme

**Comportement du modèle hors de la flamme :** L'introduction de l'épaississement a pour conséquence de modifier la diffusivité moléculaire ( $D \rightarrow F \xi D$ ) et la diffusivité thermique ( $\lambda \rightarrow F \xi \lambda$ ). Le transport turbulent résolu hors du front de flamme est faux si le modèle d'épaississement est appliqué partout. Le mélange turbulent (estimé par  $\nabla \cdot (\bar{\rho} F \xi D \nabla \widetilde{Y}_F)$ , terme de diffusion) n'est pas correct en dehors de la zone réactive. Il en va de même pour le terme de diffusion de la chaleur (qui est s'écrit  $\nabla \cdot (F \xi \lambda \nabla \widetilde{T})$ ) dans l'équation de l'énergie.

En introduisant l'épaississement, le mélange turbulent et la diffusion de la chaleur turbulente ne peuvent être correctement calculés dans les zones non réactives. La justification du modèle de flamme épaissi n'étant valable que dans les zones réactives, l'opération d'épaississement ne devra être appliquée que dans les zones réactives. C'est le modèle d'épaississement dynamique développé par Colin *et al.*, où  $F$  n'est appliqué que dans la flamme repérée par un senseur [20, 21].

### 1.3.2 Modèle Final

**Hors de la zone réactive**, les termes de sous mailles ont été présentés au paragraphe 1.2.3.

**Dans les zones réactives**, les termes de diffusion laminaire et turbulente d'espèces et de température sont donnés par le modèle de flamme épaissie :

$$\begin{aligned}\tilde{q}_i &= -\zeta F \lambda \partial_i \tilde{T} \\ \tilde{q}_i^t &= 0 \\ \tilde{J}_{k,i} &= -\zeta F \bar{\rho} \left( D_k \partial_i \tilde{Y}_k - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \\ \tilde{J}_{k,i}^t &= 0\end{aligned}\quad (1.59)$$

Le taux de réaction filtré pour l'espèce k est donné par :

$$\bar{\omega}_k = \frac{\zeta}{F} \tilde{\omega}_k = \frac{\zeta}{F} \nu_k W_k \left( \frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_F}{W_F} \right) \left( \frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_O}{W_O} \right) A \exp \left( -\frac{T_a}{\tilde{T}} \right) \quad (1.60)$$

Le taux de dégagement de chaleur s'écrit toujours  $\bar{\omega}_T = Q_0 \bar{\omega}_F$ .

L'équation de conservation de la quantité de mouvement n'est pas affectée par le modèle de flamme épaissie. Les deux fermetures, dans et hors de la zone réactive, sont regroupées dans le modèle final :

– **Conservation de la quantité de mouvement :**

$$\partial_t(\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \partial_j(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\partial_i \bar{P} - \partial_j(\tilde{\tau}_{ij} + \tilde{\tau}_{ij}^t) \quad (1.61)$$

– **Conservation de l'énergie :**

$$\begin{aligned}\partial_t(\bar{\rho} \tilde{E}) + \partial_i((\bar{\rho} \tilde{E} + \bar{P}) \tilde{u}_i) &= \partial_j(\tilde{u}_i(\tilde{\tau}_{ij} + \tilde{\tau}_{ij}^t)) \\ &+ \partial_i \left( \left[ g \frac{\mu C_p}{Pr} + \bar{f} \frac{\mu^t C_p}{Pr^t} \right] \partial_i \tilde{T} \right) \\ &+ Q_0 \frac{\zeta}{F} \tilde{\omega}_F + \bar{S}_r\end{aligned}\quad (1.62)$$

– **Conservation des espèces :**

$$\begin{aligned}\partial_t(\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \partial_i(\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_i) &= \partial_i \left( \left[ g \frac{\mu}{Sc_k} + \bar{f} \frac{\mu^t}{Sc_k^t} \right] \partial_i \tilde{Y}_k - \bar{\rho} \tilde{Y}_k (\tilde{V}_i^c + \tilde{V}_i^{c,t}) \right) \\ &- \frac{\zeta}{F} \tilde{\omega}_k\end{aligned}\quad (1.63)$$

où  $f(x, t)$  est une fonction indicatrice qui vaut 1 dans les zones réactives et 0 ailleurs,  $\bar{f} = 1 - f$ , et la fonction  $g = 1 + f \times (F\zeta - 1)$  vaut  $F\zeta$  dans les zones réactives et 0 ailleurs. Les vitesses de correction laminaire et turbulente sont données par :

$$\tilde{V}_i^c + \tilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^K \left[ g \frac{\mu}{Sc_k} + \bar{f} \frac{\mu^t}{Sc_k^t} \right] \frac{W_k}{W} \partial_i X_k \quad (1.64)$$

Les termes en  $\bar{f}$  représentent les flux résolus à partir des grandeurs filtrées. Les termes en  $g$  représentent les flux turbulents, modélisés pour décrire les échelles sous mailles. Dans le terme  $g$  on distingue la contribution des zones réactives  $f \times (F\zeta - 1)$ , faisant intervenir le modèle de flamme épaissie et celle des zones non réactives sans épaississement.

## 1.4 ASPECTS NUMÉRIQUES

### 1.4.1 Le code AVBP

Le solveur LES, AVBP<sup>4</sup>, a été développé conjointement entre le CERFACS et l'IFP pour simuler la combustion dans des chambres de combustion industrielles. Il résout les équations de conservation compressibles tridimensionnelles pour : la quantité de mouvement, l'énergie et les espèces.

Le solveur est basé sur une méthode aux volumes finis de type « cell-vertex » et une intégration temporelle explicite. Parmi les schémas d'intégration dans AVBP, on citera :

- **Schéma Lax-Wendroff** : Intégration temporelle Runge–Kutta du deuxième ordre, discrétisation spatiale centrée du deuxième ordre.
- **Schéma TTGC** : Intégration temporelle Runge–Kutta du troisième ordre, discrétisation spatiale centrée du troisième ordre. Très précis pour les maillages non structurés, adapté pour les études LES dans les géométries complexes, ce schéma est cependant environ deux fois moins rapide que le schéma Lax-Wendroff.

Les schémas de discrétisation sont associés à des conditions aux limites de type NSCBC (voir 1.4.2).

AVBP est parallélisé en utilisant une décomposition par sous-domaines et utilise les bibliothèques MPI. Cette parallélisation s'est montrée très efficace sur des machines massivement parallèles avec un speed-up de 4078 (*i.e.* s'exécutant 4078 fois plus vite qu'un calcul mono-processeur) sur 4096 processeurs de la machine IBM BlueGene/L [22].

Le pas de temps est déterminé par la valeur minimale du temps acoustique (condition de « Courant-Friedrichs-Lewy », CFL), et du temps diffusif (Fourier) (la chimie est toujours plus lente) [23]. Le pas de temps acoustique est calculé en utilisant le temps nécessaire à une onde acoustique pour se propager entre deux noeuds voisins à la vitesse  $|\mathbf{u}| + c_s$  (où  $c_s$  est la vitesse du son) :

$$\Delta t_{max} \leq \text{CFL} \min \left( \frac{\Delta}{|\mathbf{u}| + c_s} \right) \quad (1.65)$$

où  $\Delta$  représente la taille du maillage.

Le temps diffusif est proportionnel au temps nécessaire pour traverser une cellule (critère de Fourier) :

$$\Delta t_{max} \leq F_0 \min \left( \frac{\Delta^2}{\nu + \nu^t} \right) \quad (1.66)$$

où  $F_0$  est le nombre de Fourier et dans lequel les deux coefficients de diffusion laminaires et turbulents sont pris en compte.

La mise en place d'un calcul LES requiert une certaine méthodologie. La solution initiale ne doit pas être trop éloignée d'une solution physique pour assurer la stabilité des schémas numériques. La première étape consiste donc à calculer le champ de vitesse de l'écoulement pour un gaz homogène à basse température, c'est la solution « à froid ». Une fois la solution à froid convergée, elle est « allumée ». Deux techniques

<sup>4</sup><http://www.cerfacs.fr/avbp>

sont possibles pour l'allumage : soit une quantité d'énergie  $\Delta E$  est déposée en un point du domaine  $\Delta x$  pendant un durée  $\Delta t$ , correspondant à un allumage par bougie par exemple. Cette technique est utilisée pour étudier des problèmes spécifiques d'allumage et reste assez difficile à mettre en place. Soit les gaz sont simplement remplacés par des gaz chauds dans le volume supposé en aval de la flamme. Durant toute la mise en place du calcul le schéma utilisé est le schéma Lax-Wendroff, plus stable et plus robuste pour les phases transitoires. Une « solution initiale » de qualité, est ainsi obtenue pour le calcul avec le schéma TTGC pour résoudre de façon plus fine les structures de l'écoulement.

### 1.4.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour calculs instationnaires compressibles requièrent plus d'attention que dans le contexte incompressible. Des ondes acoustiques se propageant dans l'écoulement dans les deux sens, les conditions d'entrée et de sortie ne sont pas de simples conditions de Dirichlet ou Von Neumann (*i.e.* à valeur imposée).

Une technique pour spécifier les conditions aux limites d'un système hyperbolique consiste à utiliser des relations basées sur l'analyse des différentes ondes qui traversent le domaine. Cette méthode quand elle est étendue aux équations de Navier-Stokes est appelée « Navier Stokes Characteristic Boundary Conditions » (NSCBC) [24]. L'évolution des variables de l'écoulement sur les frontières est décomposée en termes dûs aux ondes acoustiques entrantes et sortantes. Le point clef de cette méthode est que les ondes quittant le domaine sont bien calculées par le schéma numérique et doivent rester stables, tandis que les ondes entrant dans le domaine ne peuvent pas être calculées et doivent être spécifiées par des relations intégrant les conditions aux limites. Plus de détails sont donnés dans [7].

Une autre point important pour les LES concerne les conditions sur les parois solides. En effet prendre en compte les forts gradients proches parois de façon correcte est une condition très exigeante sur la résolution du maillage, et on préfère utiliser des lois de paroi s'appliquant pour la dynamique et la thermique [25, 10].

Concernant la thermique, la loi utilisée correspond à une condition de mur refroidi (« Wall Law Loss »). Au lieu de spécifier une température de paroi  $T_{wall}$ , une température extérieure  $T_{ref}$  et une résistance thermique de paroi sont spécifiées. La perte thermique à la paroi est décrite par :

$$q_{wall} = R_{wall}^{-1}(T_{ref} - T_{wall}) \quad (1.67)$$

Comme pour la dynamique, le profil de température à la paroi est estimé par une loi logarithmique.

La prise en compte du rayonnement peut avoir une influence sur les lois de parois thermiques qui jusque là ont été définies sans rayonnement. Cette question a fait l'objet du travail de thèse de Jorge Amaya (pour plus de détails voir [26]), qui propose une prise en compte simple du rayonnement dans les lois de parois thermiques. Ces résultats sont utilisés dans ce travail de thèse.



# MODÉLISATION DU RAYONNEMENT

# 2

Le rayonnement thermique est le mode de transfert thermique associé au transport d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique. Il est nécessaire de s'attacher à une bonne description des transferts radiatifs dès lors que l'on observe des gradients de température importants dans un milieu ayant un fort pouvoir d'absorption : ce qui est le cas en combustion pour les produits issus de la combustion d'hydrocarbures tels que  $H_2O$ ,  $CO_2$  et  $CO$  à haute température.

De par la nature corpusculaire de la lumière, la théorie des quantas, l'équation de transfert radiatif appartient à la famille des équations de transport (souvent appelées équations cinétiques ou plus généralement équation de Boltzmann). La résolution des échanges énergétiques par rayonnement se fait en résolvant l'équation de transfert radiatif<sup>1</sup> (E.T.R.). Celle-ci décrit le transport des photons et leurs interactions avec le milieu environnant. Il est alors possible d'exprimer le terme source radiatif intervenant dans l'équation de l'énergie du système fluide.

La formulation de l'ETR sera détaillée à partir de l'équation de Boltzmann et des concepts essentiels du rayonnement. La description des propriétés d'absorption des gaz qui rend compte des propriétés moléculaires des gaz fait appel à des modèles spectraux dont les différents types seront présentés. Les principales méthodes de résolution de l'ETR seront présentées. Enfin plus de détails seront donnés sur le solveur radiatif employé.

## 2.1 FORMULATION DU PROBLÈME RADIATIF

Les concepts essentiels du transfert radiatif sont brièvement rappelés. Partant de l'équation de Boltzmann l'équation de transfert radiatif est établie, sous sa forme différentielle et intégrale.

### 2.1.1 Concepts essentiels et grandeurs caractéristiques

L'interprétation des mécanismes d'échanges énergétiques par rayonnement est délicate même pour des configurations simples en apparence. Les raisons sont liées d'une part à la difficulté conceptuelle d'échanges à distance et d'autre part à l'intégration angulaire. Un certain nombre de grandeurs photométriques sont définies. Afin de décrire le transport des photons, certains concepts sont rappelés.

---

<sup>1</sup>R.T.E pour Radiative Transfer Equation

## Les grandeurs descriptives du rayonnement

Nous définissons ici les grandeurs descriptives du rayonnement :

**La luminance** permet de caractériser le rayonnement en un point ; c'est une fonction de la position  $\mathbf{x}$ , du temps  $t$ , de la direction de propagation  $\mathbf{u}$  et de la fréquence  $\nu$ .

Soit  $dS$  une surface élémentaire fictive, centrée en  $\mathbf{x}$ , de normale  $\mathbf{n}$  et  $d\Omega$  un angle solide élémentaire autour de la direction  $\mathbf{u}$  (cf. Fig. 2.1). La luminance rayonnée en un point  $P(\mathbf{x})$  dans la direction  $\mathbf{u}$  à la fréquence  $\nu$ , notée  $L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$  est la densité de flux énergétique monochromatique  $d\phi_\nu(\mathbf{u}, t)$  qui traverse la surface  $dS$  pendant un temps  $dt$  autour de l'instant  $t$  :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \frac{d\phi(\mathbf{u}, t)}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Omega dt dS} \quad (2.1)$$

Elle s'exprime en  $W.m^{-2}.sr^{-1}.Hz^{-1}$ .

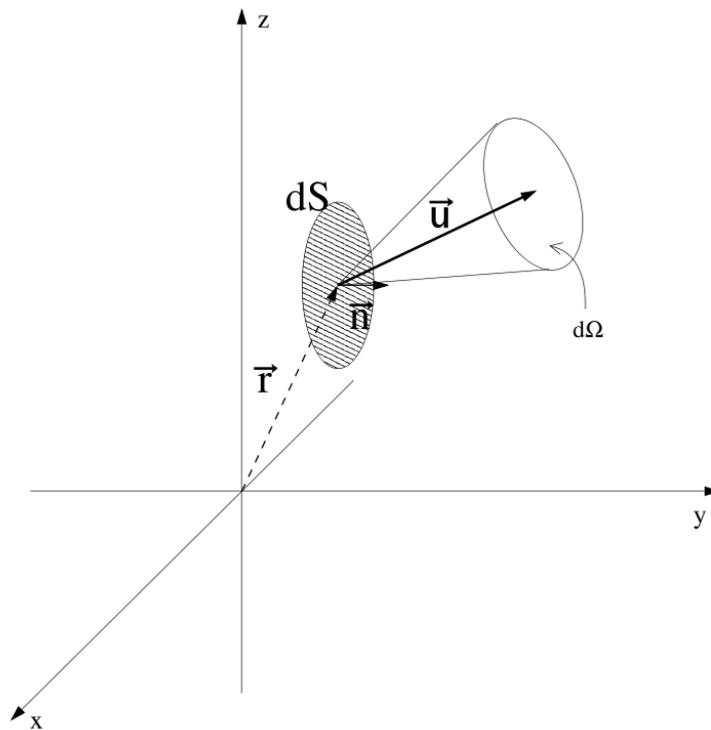


FIG. 2.1 – La luminance.

Des grandeurs intégrales (*i.e.* intégrées sur les directions) sont également définies. Une fois intégrées sur les fréquences, ces grandeurs sont des grandeurs macroscopiques qui ne dépendent plus que de la position dans l'espace physique ( $\mathbf{x}$ ) ce qui correspond à l'échelle des équations de la combustion. Ces deux intégrations sont les deux difficultés du problème radiatif : l'intégration angulaire dans l'angle solide et la contribution de toutes les fréquences.

**Le rayonnement incident monochromatique** permet de prendre en compte l'influence de la luminance qui provient de tout l'angle solide en un point donné :

$$G_\nu(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) d\Omega \quad (2.2)$$

Il s'exprime en  $W.m^{-2}.Hz^{-1}$ .

**Le flux radiatif monochromatique**, comme la luminance le flux net radiatif est une grandeur vectorielle qui caractérise le flux d'énergie rayonné en un point.

$$\mathbf{q}_{r,\nu}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega \quad (2.3)$$

**L'éclairement surfacique monochromatique à la paroi** En un point  $P(\mathbf{x}_w)$  à la paroi de normale  $\mathbf{n}_w$  l'éclairement surfacique s'écrit comme :

$$H_\nu(\mathbf{x}_w) = \int_{2\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) |\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{u}| d\Omega \quad (2.4)$$

Ces trois grandeurs intégrales sont importantes car elles permettent d'exprimer toutes les grandeurs recherchées en transfert radiatif à l'échelle macroscopique.

### Quelques concepts essentiels

Afin de pouvoir détailler les termes source de l'équation de la luminance obtenue à partir de l'Eq. 2.7, quatre concepts utiles à la description des échanges radiatifs sont détaillés :

**La cavité fermée isotherme** Au sein de toute cavité fermée isotherme, le rayonnement est homogène et isotrope ; la luminance en tout point et dans toute direction est égale à la luminance de Planck (luminance du rayonnement d'équilibre) :

$$L_\nu^0(\mathbf{x}, \nu) = B(T, \nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu c}{k_b T}\right) - 1} \quad (2.5)$$

où  $h$  est la constante de Planck et  $k_b$ , la constante de Boltzmann.

**L'hypothèse d'équilibre thermodynamique local (E.T.L.).** Cette hypothèse est vérifiée dans les applications visées. D'un point de vue radiatif, cette hypothèse a comme conséquence que les propriétés radiatives de tout élément géométrique  $dG$  sont indépendantes de son environnement. En particulier si  $dG$  est à la température  $T$ , ses propriétés sont les mêmes que s'il était à l'équilibre, plongé au sein d'une cavité fermée isotherme à la même température  $T$ .

**Le concept de corps noir** On appelle corps noir tout système  $\Sigma$  délimité par une surface  $S$  (réelle ou fictive) qui vérifie la propriété suivante : tout photon qui pénètre dans  $\Sigma$  en traversant  $S$  ne peut retraverser  $S$  en sens inverse et subit donc une absorption par  $\Sigma$ . En se réfléchissant de paroi en paroi, les photons se verront absorbés et réémis continuellement sur les parois internes de  $\Sigma$ , jusqu'à ce que l'objet atteigne l'équilibre thermique.

**Le principe de réciprocité** Si  $G_i$  et  $G_j$  sont deux éléments géométriques d'un système quelconque, le chemin optique  $\Gamma(G_i, G_j)$  support de l'échange radiatif peut être parcouru de  $i$  en  $j$  ou de  $j$  en  $i$ . A l'ETL, si  $G_i$  et  $G_j$  sont isothermes à la même température, alors la puissance nette échangée entre ces deux éléments est nulle :  $\Phi_\nu(G_i, G_j) = 0$  (cf. second principe de la thermodynamique).

Utilisant ces concepts et les grandeurs photométriques, les termes source intervenant dans l'équation de la luminance vont pouvoir être détaillés, conduisant à l'équation de transfert radiatif.

### 2.1.2 Établissement de l'équation de transport

La physique du rayonnement fait appel à la description de la lumière utilisant à la fois une description ondulatoire, formalisée dans les travaux de Maxwell, et une description corpusculaire, démontrée par Einstein en 1905 lors de ses travaux sur l'effet photoélectrique. Chaque quanta d'énergie, appelé photon, transporte une énergie propre  $\epsilon = h\nu$  qui est fonction de sa fréquence  $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{c}{\lambda}$ .

La nature corpusculaire de la lumière justifie une approche différente de celle utilisée en mécanique des fluides dans le paradigme des milieux continus (*approche macroscopique*). Aussi les photons ne sont pas décrits de façon individuelle (*approche microscopique*), mais de façon probabiliste en tenant compte de la distribution de vitesse des corpuscules (*approche mésoscopique*), on parle alors du paquet de photons.

On note  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{v}$  la fonction de distribution qui représente le nombre de corpuscules (de photons) dans un volume élémentaire  $d\mathbf{x}$  autour du point  $\mathbf{x}$  et dans un élément  $d\mathbf{v}$  autour de  $\mathbf{v}$  dans l'espace des vitesses. Si  $N$  est le nombre total de particules, alors  $\frac{1}{N}f$  est la densité de probabilité de présence de photons dans l'espace des phases (espace des positions  $\mathbf{x}$ , espace des vitesses  $\mathbf{v}$ ).

Dans le cas de photons, le transport est non accéléré entre deux collisions et les interactions sont supposées quasi-ponctuelles et quasi-statiques. Cela revient à supposer qu'en dessous de l'échelle définie, les interactions possibles sont distribuées spatialement aléatoirement de façon uniforme. Le libre parcours moyen  $\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  définit la moyenne des distances avant interaction dans le milieu. L'équation de transport vérifie alors l'équation suivante :

$$\partial_t f + v_i \partial_i f = -\frac{\|\mathbf{v}\|}{\lambda} f + S \quad (2.6)$$

où  $S(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  est le taux temporel auquel apparaissent des particules en  $\mathbf{x}$  avec une vitesse  $\mathbf{v}$  (corpuscules « émis », ou corpuscules initialement à une vitesse différente subissant une interaction en  $\mathbf{x}$  à la suite de laquelle ils acquièrent une vitesse  $\mathbf{v}$ ).

Les photons n'interagissent pas entre eux, le terme source dans l'Eq. 2.6 garde une forme linéaire (*i.e.* dépend de  $f$  de façon linéaire). Les interactions à prendre en compte ne sont que les interactions entre les photons et la matière dans laquelle ils se propagent. Dans le cas où les corpuscules sont des photons, un certains nombre d'hypothèses sont émises :

- Le concept de photon est utilisé dans une approche semi-classique c'est-à-dire qu'il est possible d'associer de façon déterministe au paquet de photons une vitesse et une position. C'est le cas si les échanges radiatifs se font à des échelles supérieures à la longueur d'onde.
- Les photons se déplacent en ligne droite à vitesse constante entre deux interactions. Cette hypothèse sous-tend que l'indice de réfraction du milieu est constant. Dans toutes les applications visées l'indice de réfraction du milieu  $n$  est supposé unitaire et les photons se déplacent à vitesse constante  $\|\mathbf{v}\| = c/n = c$ . L'espace des phases a donc une dimension de moins et la fonction de distribution est fonction de la position  $\mathbf{x}$ , de la direction de propagation  $\mathbf{u}$  et du temps.
- Il n'y a pas de structuration spatiale des absorbeurs et des diffuseurs en dessous de l'échelle considérée.

La dépendance spectrale fait intervenir un paramètre supplémentaire avec la longueur d'onde. L'équation de transport est donnée pour un ensemble de photons de même fréquence  $\nu$  :

$$\partial_t f_\nu + c \times u_i \partial_i f_\nu = -\frac{c}{\lambda_\nu} f_\nu + S_\nu \quad (2.7)$$

où  $u_i$  sont les coordonnées du vecteur unitaire  $\mathbf{u}_i$ .

La luminance peut également être définie de façon volumique en utilisant la densité monochromatique de photons  $f_\nu$  dans l'espace des phases comme :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = h\nu c f_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.8)$$

Dans ce cas la luminance correspond à la densité d'énergie transportée par les photons par unité de volume et de temps. Chaque paquet de photon a une énergie  $h\nu$ , où  $h$  est la constante de Planck. L'équation d'évolution de la luminance est obtenue à partir de l'Eq. 2.7 en la multipliant par  $h\nu$  :

$$\frac{1}{c} \partial_t L_\nu + u_i \partial_i L_\nu = -\frac{1}{\lambda_\nu} L_\nu + S'_\nu \quad (2.9)$$

où  $S'_\nu$  est le terme source de l'équation d'évolution de la luminance ( $S'_\nu = S_\nu/c$ ).

Le rayonnement thermique se propage comme tout rayonnement électromagnétique à la vitesse de la lumière  $c$ . Ce mode de transport d'énergie thermique atteint donc l'équilibre thermodynamique beaucoup plus vite que les autres modes de transfert en combustion. Supposant donc que le rayonnement est stationnaire à l'échelle des temps considérés en combustion, la dépendance temporelle de la luminance est occultée.

La forme générale de l'équation de transport des photons est maintenant posée. Dans les sections suivantes, les différents phénomènes physiques décrivant les interactions entre les photons et le milieu traversé vont être explicités. Il s'agit de l'absorption, de l'émission et de la diffusion (Fig. 2.2).

### 2.1.3 Absorption et émission

Le libre parcours moyen d'absorption définit la distance moyenne parcourue par les photons dans le milieu avant d'être absorbés. Cette longueur d'absorption dépend de la longueur d'onde, l'origine moléculaire de l'absorption sera exposée à la section 2.2. Le coefficient d'absorption  $\kappa_{\nu,a}$  en  $m^{-1}$  est défini comme l'inverse du libre parcours moyen d'absorption  $\lambda_{\nu,a}$ . Sur un trajet  $ds$ , un milieu semi-transparent est caractérisé par sa capacité à absorber une quantité d'énergie  $dL_{\nu,a}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  provenant d'une luminance  $L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  sur un trajet  $ds$  tel que :

$$dL_{\nu,a}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = -\frac{1}{\lambda_{\nu,a}} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) ds = -\kappa_{\nu,a} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) ds \quad (2.10)$$

On peut associer la luminance incidente  $L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  à un flux de  $N$  photons incidents à la fréquence  $\nu$  qui traversent une couche de gaz absorbant d'épaisseur  $ds$  et la variation de luminance  $dL_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  au nombre de photons absorbés sur l'intervalle  $ds$ . Le nombre de photons absorbés est proportionnel au nombre de photons incidents, le

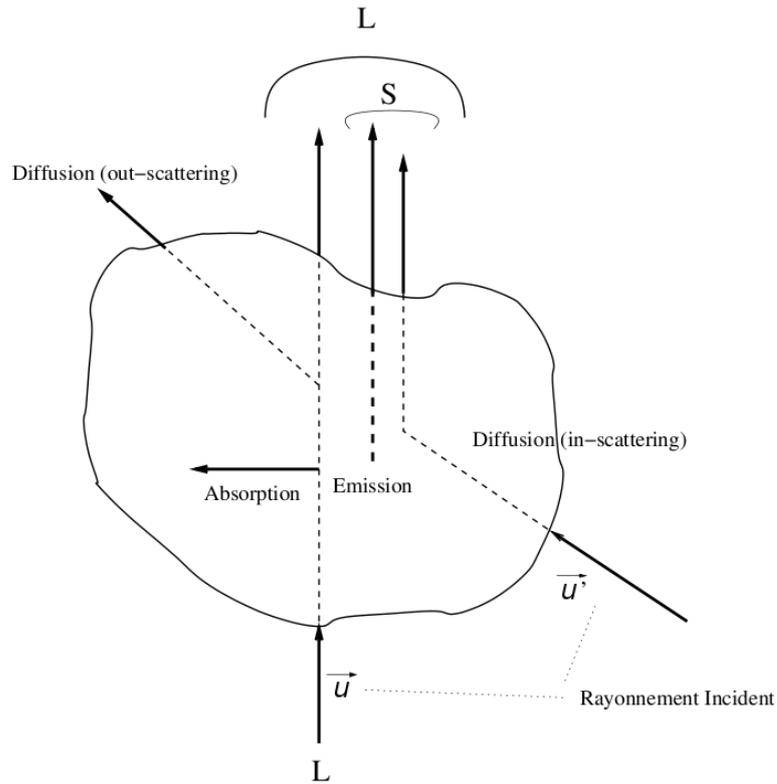


FIG. 2.2 – Différentes contributions du bilan radiatif local.

coefficient de proportionnalité est appelé section efficace d'absorption. Le coefficient d'absorption monochromatique représente alors :

$$\kappa_{\nu,a} = \frac{1}{ds} \frac{dN}{N} \quad (2.11)$$

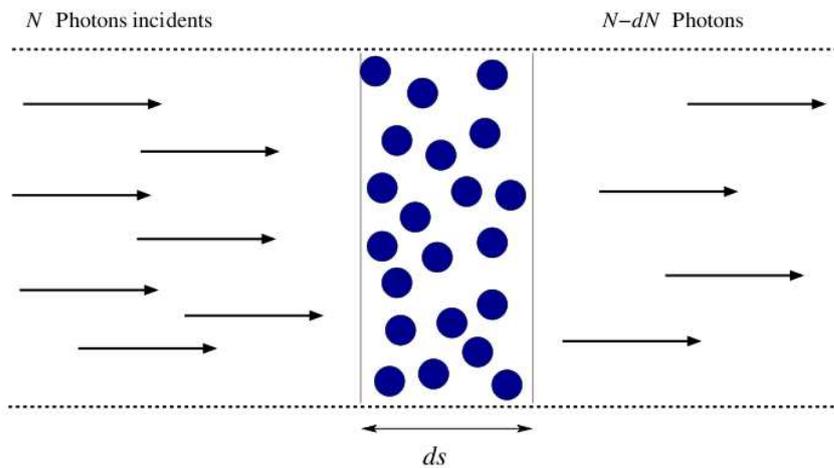


FIG. 2.3 – Absorption d'un flux de photons incidents.

La même section  $ds$  aura une capacité d'émettre une quantité d'énergie  $dL_{\nu,e}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ . Considérant que chaque volume élémentaire est à l'équilibre thermodynamique local,

le rayonnement est proportionnel au rayonnement de corps noir.

$$dL_{\nu,e}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = +\kappa_{\nu,e}L_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u})ds \quad (2.12)$$

$\kappa_{\nu,e}$  est le coefficient d'émission monochromatique.

Une conséquence de l'équilibre thermodynamique local est qu'il n'y a pas de processus de redistribution fréquentielle entre l'absorption et l'émission. C'est-à-dire que le spectre d'absorption et d'émission des gaz sont équivalents, alors :

$$\kappa_{\nu,e} = \kappa_{\nu,a} = \kappa_{\nu} \quad (2.13)$$

Cette notation  $\kappa_{\nu}$  caractérise les deux phénomènes et est appelée coefficient d'absorption monochromatique.

### 2.1.4 Diffusion

Le troisième phénomène radiatif intervenant dans l'interaction entre les photons et le rayonnement est la diffusion. Elle se traduit par une interaction entre les photons et la matière, qui a pour conséquence de changer la direction du rayonnement incident par des interactions entre les photons et des centres diffuseurs. Il y a donc deux contributions de la diffusion : un gain de luminance par diffusion ou « in-scattering » et une perte par diffusion sortante ou « out-scattering ».

La perte par diffusion est fonction du libre parcours moyen de diffusion  $\lambda_{\nu,d}$  qui est la longueur moyenne que parcourent les photons avant de subir une diffusion dans le milieu. Comme le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion monochromatique  $\sigma_{\nu}$  est donné par l'inverse du libre parcours de diffusion. La variation de luminance  $dL_{\nu,out-scattering}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  due à une perte par diffusion dans un milieu d'épaisseur  $ds$  est donnée quelle que soit la direction de diffusion par :

$$dL_{\nu,out-scattering}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = -\frac{1}{\lambda_{\nu,d}}L_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u})ds = -\sigma_{\nu}L_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u})ds \quad (2.14)$$

Le gain par diffusion, noté  $dL_{\nu,in-scattering}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  est évalué en tenant compte de l'ensemble des photons dans une direction incidente  $\mathbf{u}'$  avec une fréquence  $\nu'$  qui ont une probabilité d'être diffusées dans la direction  $\mathbf{u}$  avec la fréquence  $\nu$  :

$$dL_{\nu,in-scattering}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = +\sigma_{\nu} \left[ \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}', \mathbf{u}, \nu', \nu) L_{\nu'}(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\Omega d\nu' \right] ds \quad (2.15)$$

où  $\Phi(\mathbf{u}', \mathbf{u}, \nu', \nu)$  représente la fonction de phase de diffusion.

Si la diffusion est cohérente en fréquence (*i.e.* les collisions responsables de la diffusion sont élastiques, l'énergie des photons est conservée) dans ce cas le gain par diffusion devient :

$$dL_{\nu,in-scattering}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = +\sigma_{\nu} \left[ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}', \mathbf{u}) L_{\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\Omega \right] ds \quad (2.16)$$

La fonction de phase étant une densité de probabilité, elle obéit à :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}', \mathbf{u}) d\Omega = 1 \quad (2.17)$$

### 2.1.5 Formulation différentielle

#### Équation de transfert radiatif

Partant de l'Eq. 2.7 multipliée par  $h\nu$  pour faire apparaître la luminance et en explicitant les termes sources, l'équation de transfert radiatif est établie dans sa forme différentielle [27] :

$$\frac{dL_v(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{ds} = \left[ \kappa_v L_v^0(\mathbf{x}) + \frac{\sigma_v}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{u}', \mathbf{u}) L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\Omega \right] - [(\kappa_v + \sigma_v) L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u})] \quad (2.18)$$

où  $s$  est l'abscisse curviligne.

Le coefficient d'extinction total  $\beta_v$  est introduit :

$$\beta_v = \kappa_v + \sigma_v \quad (2.19)$$

et l'albédo de diffusion  $\omega_v$  :

$$\omega_v = \frac{\sigma_v}{\kappa_v + \sigma_v} \quad (2.20)$$

Dans les applications de combustion, le milieu peut être rendu diffusant par la présence de suies, poussières, gouttes... La taille des suies, de quelques dizaines de nanomètres, est petite devant la longueur d'onde du rayonnement ( $r/\lambda \ll 1$ ) la diffusion se fait en régime de Rayleigh. Dans ce cas, la diffusion se produit avec une fonction de phase sur 2 lobes symétriques et la surface efficace de diffusion dépend de la longueur d'onde comme  $\sigma_s \propto 1/\lambda^4$ . L'efficacité de la diffusion décroît donc très rapidement avec la longueur d'onde ce qui conduit à des coefficients de diffusion très faibles dans l'infrarouge thermique. La taille des chambre de combustion étant de quelques dizaines de centimètres, l'épaisseur optique de diffusion  $\kappa_d L$  est faible et il est justifié de ne pas prendre en compte la diffusion.

Dans la suite de ce travail et l'ETR se réduit à :

$$\frac{dL_v(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{ds} = \kappa_v [L_v^0(\mathbf{x}) - L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u})] \quad (2.21)$$

Le bilan radiatif, ou le terme source radiatif (macroscopique) intervient dans l'équation de bilan de l'énergie du système fluide. Il est obtenu en intégrant l'Eq. 2.21 sur l'ensemble des directions et des fréquences :

$$S_r(\mathbf{x}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \kappa_v [L_v^0(\mathbf{x}) - L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u})] d\Omega dv \quad (2.22)$$

En utilisant les variables intégrales définies précédemment le terme source radiatif s'écrit comme la divergence du flux radiatif :

$$S_r(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbf{q}_r(\mathbf{x}) = \int_0^\infty \kappa_v [4\pi L^0(\mathbf{x}) - G_v(\mathbf{x})] dv \quad (2.23)$$

### Conditions aux limites

La forme différentielle de l'ETR, Eq. 2.21, s'accompagne de conditions aux limites. En rayonnement, les conditions aux limites d'un problème sont toujours représentées par un élément de paroi localement plan, à une température donnée  $T_w$  et qui participe aux transferts radiatifs. La luminance sortante à la paroi est donnée par :

$$L_v(\mathbf{x}_w, \mathbf{u}) = \underbrace{\epsilon_v(\mathbf{x}_w)L_v^0(\mathbf{x}_w)}_{\text{Partie émise}} + \underbrace{\rho_v(\mathbf{x}_w)L_{v,incident}(\mathbf{x}_w, -\mathbf{u})}_{\text{Partie réfléchie}} \quad (2.24)$$

où  $L_{v,incident}(\mathbf{x}_w, \mathbf{u})$  est la luminance incidente,  $\rho_v(\mathbf{x}_w)$  la réflectivité de la paroi et  $\epsilon_v(\mathbf{x}_w)$  l'émissivité de la paroi. La réflectivité se définit comme :

$$\rho_v(\mathbf{x}_w) = 1 - \epsilon_v(\mathbf{x}_w) \quad (2.25)$$

L'émissivité représente le rapport entre la luminance émise à la paroi et la luminance d'un corps noir à la température de la paroi. Ce coefficient est compris entre 0 et 1. Il peut dépendre de la fréquence, sinon le matériau est considéré gris et l'émissivité est constante. Si l'émissivité est égale à 1, la paroi est dite noire (*i.e.* tout le rayonnement incident est absorbé), au contraire si l'émissivité est nulle la paroi est parfaitement réfléchissante.

En général la réflexion peut être diffuse ou spéculaire. Dans le cas de la réflexion spéculaire, la luminance incidente provenant de la direction  $\mathbf{u}$  est réfléchie dans la direction  $\mathbf{u}'$ , obtenue par les lois de Descartes. Dans le contexte de ce document, la réflexion sera toujours considérée diffuse aux parois. L'émissivité de la paroi est également considérée isotrope sur le demi-espace au dessus de la paroi. La partie réfléchie est fonction de toutes les directions  $\mathbf{u}$  du demi-espace et la luminance émise à la paroi s'écrit :

$$L_v(\mathbf{x}_w, \mathbf{u}) = \epsilon_v(\mathbf{x}_w)L_v^0(\mathbf{x}_w) + \frac{1 - \epsilon_v(\mathbf{x}_w)}{\pi} \int_{2\pi} L_v(\mathbf{x}_w, \mathbf{u}') \mathbf{n}_w \cdot \mathbf{u}' d\Omega(\mathbf{u}') \quad (2.26)$$

Enfin le flux radiatif à la paroi est exprimé comme :

$$q_{w,v}(\mathbf{x}_w) = \mathbf{q}_v(\mathbf{x}_w) \cdot \mathbf{n}_w(\mathbf{x}_w) \quad (2.27)$$

Le flux radiatif à la paroi est une grandeur d'intérêt essentielle pour les applications de combustion. En effet, le fait de négliger le rayonnement dans la modélisation de chambre de combustion a pour conséquence de sous-estimer les flux aux parois. L'estimation de ces flux est importante, dans les calculs de dimensionnement de moteurs par exemple, pour estimer la tenue thermique des parois.

### 2.1.6 Formulation intégrale

#### Équation de transfert radiatif

La solution de l'ETR peut être intégrée sur le chemin optique entre les positions  $\mathbf{x}_0$  et  $\mathbf{x}$  connaissant la luminance incidente  $L_v(\mathbf{x}_0, \mathbf{u})$ , voir Fig. 2.4. Cette équation est la formulation intégrale de l'équation de transfert radiatif :

$$L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = L_v(\mathbf{x}_0, \mathbf{u})\mathbf{T}_v(\mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{x}) + \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} L_v^0(\mathbf{x}') \frac{\partial \mathbf{T}_v(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}'} d\mathbf{x}' \quad (2.28)$$

où  $T_\nu(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$  est la transmittance d'une épaisseur de milieu semi-transparent compris entre  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{x}'$ . Elle est obtenue en posant :

$$T_\nu(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) = \exp(-\tau_\nu(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})) \quad (2.29)$$

avec  $\tau_\nu(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})$  qui désigne l'épaisseur optique, nombre sans dimension, donné par l'intégration suivante dans un cas sans diffusion :

$$\tau_\nu(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} \beta_\nu(x) dx = \int_{x_0}^{x'} \kappa_\nu(x) dx \quad (2.30)$$

dans le cas sans diffusion  $\beta_\nu = \kappa_\nu$ .

Si le milieu d'épaisseur  $l = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$  est homogène,  $\kappa_\nu$  ne dépendant pas de la position, l'épaisseur optique s'écrit simplement :

$$\tau_\nu(l) = \beta_\nu l = \kappa_\nu l \quad (2.31)$$

et l'Eq. 2.29 se simplifie comme :

$$T_\nu(l) = \exp(-\beta_\nu l) = \exp(-\kappa_\nu l) \quad (2.32)$$

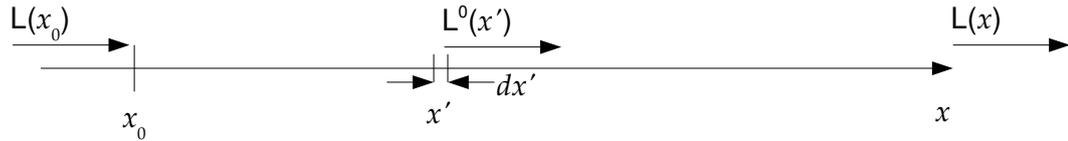


FIG. 2.4 – Formulation intégrale de l'équation de transfert radiatif pour une couche de gaz comprise entre  $x_0$  et  $x$ .

### Formulation en puissances nettes échangées

La formulation en puissances nettes échangées (P.N.E)<sup>2</sup> est basée sur le principe de réciprocité. Une première approche date de 1967, introduite par Green [28] dans le domaine atmosphérique et par Hottel [29] dans le domaine des sciences de l'ingénieur. Elle a été appliquée et développée dans le cadre de la méthode de Monte Carlo dans de nombreux travaux [30, 31, 32, 33, 34, 35] entre les laboratoires LAPLACE et RAPSODEE. La formulation en PNE consiste à quantifier les échanges radiatifs nets en paires d'éléments  $i$  et  $j$  d'un système donné. Ainsi la PNE,  $\psi(i, j)$  entre 2 éléments  $i$  et  $j$  (éléments de paroi ou de volume) s'exprime comme la différence de la puissance radiative émise en  $i$  et absorbé en  $j$  et de la puissance émise en  $j$  et absorbée par  $i$  :

$$\psi(i, j) = \phi_{i \rightarrow j} - \phi_{j \rightarrow i} \quad (W/m^2) \quad (2.33)$$

Cette méthode a pour principal intérêt de calculer une carte des échanges radiatifs ce qui permet d'analyser la contribution de chaque échange net au bilan radiatif de chaque élément  $i$  du système :

$$\zeta_i = \sum_{j=1}^{N_j} \psi(i, j) \quad (2.34)$$

<sup>2</sup>N.E.F pour Net Exchange Formulation

où  $\xi_i$  est le bilan radiatif de l'élément  $i$  en  $W/m^2$ . Il est possible de comprendre la nature des échanges radiatifs pour déterminer ceux qui sont dominants dans le système et qui devront être calculés avec une précision plus importante. Cette méthode sera utilisée au chapitre 6 comme outil de diagnostic.

En intégrant l'Eq. 2.21 sur l'ensemble des directions, le terme source radiatif monochromatique est obtenu en un point  $\mathbf{x}_i$  au centre d'un volume  $V_i$  délimité par une surface  $S_i$  (cf. Fig. 2.5) :

$$S_{r,\nu}(\mathbf{x}_i) = \int_{4\pi} \kappa_\nu [L_\nu^0(\mathbf{x}_i) - L_\nu(\mathbf{x}_i, \mathbf{u})] d\Omega \quad (2.35)$$

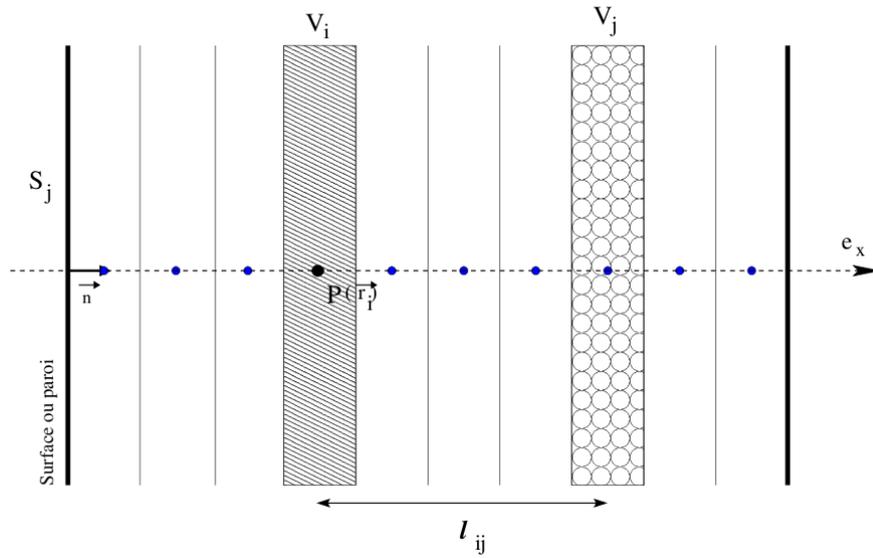


FIG. 2.5 – Calcul du terme source pour un volume  $V_i$ .

Le domaine  $V$  étant décomposé en  $N$  volumes notés  $V_j$  et la surface en  $M$  surfaces notées  $S_j$ , l'Eq. 2.35 intégrée sur l'élément de volume  $V_i$  peut s'écrire comme la somme de deux contributions :

$$S_{r,\nu}(V_i) = \sum_{j=1}^N \phi_{\nu, V_i \rightarrow V_j} + \sum_{j=1}^M \phi_{\nu, V_i \rightarrow S_j} \quad (2.36)$$

où  $\phi_{\nu, V_i \rightarrow V_j}$  et  $\phi_{\nu, V_i \rightarrow S_j}$  sont respectivement les puissances nettes échangées entre les volumes  $V_i$  et  $V_j$  et entre le volume  $V_i$  et la surface  $S_j$ . L'expression de ces puissances nettes échangées est obtenue en utilisant l'Eq. 2.35 et 2.28 et en transformant l'intégration angulaire par des intégrales surfacique et volumiques.

En utilisant  $l_{ij} = \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|$ ,  $\phi_{\nu, V_i \rightarrow V_j}$  est tel que :

$$\phi_{\nu, V_i \rightarrow V_j} = \int_{V_i} dV(\mathbf{x}_i) \int_{V_j} dV(\mathbf{x}_j) \frac{1}{l_{ij}^2} \kappa(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}_\nu(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j) \kappa(\mathbf{x}_j) [L_\nu^0(\mathbf{x}_j) - L_\nu^0(\mathbf{x}_i)] \quad (2.37)$$

et  $\phi_{\nu, V_i \rightarrow S_j}$ , tel que :

$$\phi_{\nu, V_i \rightarrow S_j} = \int_{V_i} dV(\mathbf{x}_i) \int_{S_j} dS(\mathbf{x}_j) \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_j}{l_{ij}^2} \kappa(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}_\nu(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j) \kappa(\mathbf{x}_j) [L_\nu^0(\mathbf{x}_j) - L_\nu^0(\mathbf{x}_i)] \quad (2.38)$$

où  $\mathbf{n}_j$  est la normale à la surface  $S_j$ .

De façon similaire le bilan radiatif d'une surface  $S_i$  est calculé à partir des échanges nets entre deux éléments de surface en posant :

$$\phi_{\nu, S_i \rightarrow S_j} = \int_{S_i} dS(\mathbf{x}_i) \int_{S_j} dS(\mathbf{x}_j) \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_i)(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_j)}{l_{ij}^2} \kappa(\mathbf{x}_i) \mathbf{T}_\nu(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j) \kappa(\mathbf{x}_j) [L_\nu^0(\mathbf{x}_j) - L_\nu^0(\mathbf{x}_i)] \quad (2.39)$$

En considérant comme isothermes les éléments de surface et de volume nous pouvons écrire ces puissances comme :

$$\begin{aligned} \phi_{\nu, V_i \rightarrow V_j} &= \tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{VV} [L_\nu^0(\mathbf{x}_j) - L_\nu^0(\mathbf{x}_i)] \\ \phi_{\nu, V_i \rightarrow S_j} &= \tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{VS} [L_\nu^0(\mathbf{x}_j) - L_\nu^0(\mathbf{x}_i)] \\ \phi_{\nu, S_i \rightarrow S_j} &= \tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{SS} [L_\nu^0(\mathbf{x}_j) - L_\nu^0(\mathbf{x}_i)] \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ainsi, le signe des puissances nettes échangées repose sur les différences de luminances noires.

Les termes  $\tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{VV}$ ,  $\tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{SV}$  et  $\tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{SS}$  sont des coefficients optico-géométriques appelés « facteurs d'échange de Hottel ». Ils représentent toute la complexité du problème géométrique contenue dans les Eq. 2.37, 2.38 et 2.39. Le principe de réciprocité permet d'écrire les égalités suivantes :  $\tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{VV} = \tilde{\zeta}_{\nu, ji}^{VV}$ ,  $\tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{SV} = \tilde{\zeta}_{\nu, ji}^{SV}$  et  $\tilde{\zeta}_{\nu, ij}^{SS} = \tilde{\zeta}_{\nu, ji}^{SS}$ .

## 2.2 PROPRIÉTÉS SPECTRALES

Dans le cas de transfert radiatif dans des milieux semi-transparents gazeux les propriétés spectrales des gaz peuvent être décrits par de nombreux modèles présents dans la littérature. Il s'agit ensuite de faire le choix entre ceux qui répondent au besoin de précision requis avec comme principal soucis d'avoir des temps de calcul les plus faibles possibles. Dans ce paragraphe, les éléments principaux expliquant les spectres d'absorption sont présentés. Les différentes classes de modèles existants sont évoquées puis le modèle statistique à bandes étroites en  $k$ -correlés est présenté en détails.

### 2.2.1 Introduction

La prise en compte de l'absorption des gaz nécessite la description du spectre de raies qui caractérise l'interaction rayonnement-matière. Nous présenterons ici quelques concepts issus de la théorie quantique expliquant de façon brève les propriétés spectrales des gaz.

Les processus d'interaction rayonnement-matière décrivant les processus d'excitation/désexcitation sont de deux types : les processus « lié-lié » ou « lié-libre » et les processus « libre-lié » et « libre-libre » à haute température. Les premiers correspondent aux transitions énergétiques entre des niveaux discrets d'énergie et les seconds aux transitions entre un niveau d'énergie donné et un continuum.

L'interaction entre des niveaux d'énergie discrets peut être schématisée comme sur la Fig. 2.6 représentant un système à deux niveaux. Les niveaux d'énergie sont le résultat de la combinaison des transitions électroniques, vibrationnels et rotationnels.

Un atome dans un état  $u$  peut se désexciter spontanément dans un état  $l$  en émettant un photon d'énergie  $\epsilon = h(\nu_u - \nu_l)$ . A l'opposé, un atome dans l'état  $l$  peut absorber un photon et passer dans l'état  $u$ . Il existe un processus inverse à l'absorption : l'émission induite qui correspond à la désexcitation induite par un photon incident. L'émission stimulée est en général faible et n'intervient que dans des systèmes où la population du niveau excité est importante par rapport au niveau fondamental (ex. LASER). Enfin les processus collisionnels induisent des transitions énergétiques entre les niveaux.

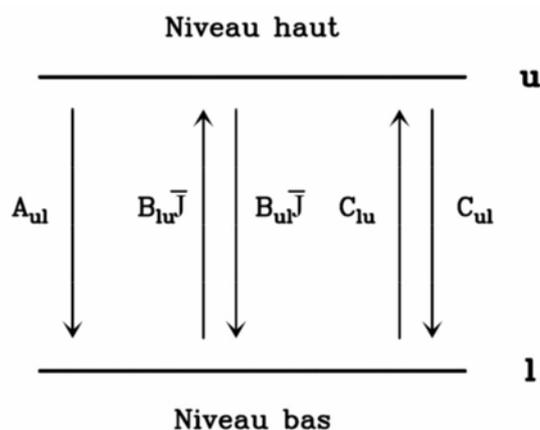


FIG. 2.6 – Diagramme des processus radiatifs et collisionnels couplant les niveaux haut ( $u$ ) et bas ( $l$ ) d'une transition. De gauche à droite : émission spontanée, absorption, émission stimulée, excitation collisionnelle et désexcitation collisionnelle. L'absorption et l'émission stimulée ont la particularité de dépendre du champ de rayonnement. Les coefficients  $A_{ij}$  et  $C_{ij}$  désignent les probabilités de transition.

Dans les premières théories quantiques, modèle de Bohr, les états sont stationnaires et ont une largeur énergétique nulle, c'est à dire que les transitions s'opèrent à une fréquence déterminée  $\nu_0$ . En réalité les niveaux d'énergie ont une largeur énergétique ou spectrale, ils ne sont pas infiniment étroits, car l'état excité possède une durée d'existence, la durée de vie de l'état excité. Ce mécanisme est à l'origine de l'élargissement spectral naturel produisant des profils de raies de Lorentz.

Le déplacement des molécules par rapport au référentiel de l'observation induit également un élargissement des profils d'absorption par effet Doppler suivant un profil de Maxwell (si le système est à l'équilibre thermodynamique local). La combinaison de ces deux élargissements donne des profils Voigt, obtenus par la convolution d'une lorentzienne et d'une maxwellienne.

Les niveaux d'énergie peuvent correspondre à des transitions électroniques, rotationnelles ou vibrationnelles qui sont quantifiées. L'énergie mise en jeu dans ces différentes transitions contribue par ordre d'importance dans les transitions rotationnelles, vibrationnelles puis électroniques. Les changements d'énergie vibrationnels peuvent être accompagnés d'une transition rotationnelle, conduisant à des groupement de raies rapprochées pouvant se chevaucher par élargissement. Ces raies sont appelées transitions rovibrationnelles et sont très nombreuses aux températures qui interviennent en combustion.

Ainsi le spectre d'absorption des gaz est la résultante de toutes les combinaisons de transitions énergétiques entre les niveaux d'énergie du système tenant compte des

largeurs de raies, et des transitions vers un continuum dans le cas de plasmas. La résultante de toutes ces transitions énergétiques forme le spectre d'absorption des gaz. Ainsi chaque gaz possède un spectre propre, une signature énergétique dont le domaine d'étude est la spectroscopie. Le spectre d'absorption des gaz est fonction des propriétés thermodynamiques locales : température, composition.

### 2.2.2 Les différents modèles spectraux

Les grandeurs d'intérêt du rayonnement pour la combustion sont des grandeurs intégrées en fréquence. L'intégration de la luminance du corps noir sur tout le spectre se fait de façon analytique, ou bien elle peut être tabulée sur des intervalles fréquents [36]. L'intégration du coefficient d'absorption nécessite de décrire l'absorption en fonction de la fréquence.

La description du spectre d'absorption des gaz est faite par un modèle spectral. De nombreux modèles existent dans la littérature, ils sont répartis en trois classes :

- les modèles raie par raie, les plus précis mais très coûteux en temps de calcul,
- les modèles à bandes qui offrent un bon compromis entre précision et temps de calcul,
- les modèles globaux dont les paramètres peuvent être construits à partir des données raie par raie ou des modèles à bandes.

#### Modèle raie par raie

C'est le modèle de référence en terme de précision. Dans cette approche, l'ensemble des transitions entre les niveaux d'énergie sont décrites. A chaque raie  $\nu_i$  est associé un profil de raie normalisé qui rend compte de l'élargissement de raie.

Le modèle raie par raie<sup>3</sup> permet de reconstruire le spectre d'absorption d'un mélange de gaz, en déterminant le coefficient d'absorption monochromatique résultant du recouvrement de l'ensemble des raies.

Dans le spectre infrarouge pour les températures des applications en combustion, le nombre de raies est de l'ordre du million. Aussi, pour résoudre le problème radiatif il faut résoudre l'ETR monochromatique pour chacune de ces raies, ce qui n'est pas réalisable dans des applications industrielles. Ce modèle sert surtout d'outil de validation de modèles simplifiés.

Les modèles simplifiés consistent à découper le spectre en bandes. En fonction de la largeur de ces bandes, on distingue les modèles à bandes étroites, les modèles à bandes larges et les modèles globaux.

#### Les modèles à bandes étroites

On appelle bande étroite un intervalle du spectre sur lequel la luminance de Planck peut être considérée constante. En réalité la fonction de Planck n'est pas constante sur une bande étroite mais son évolution peut être considérée linéaire, de sorte que

<sup>3</sup>LBL pour Line-by-line

l'intégrale de la fonction de Planck sur la bande étroite puisse être calculée, comme le produit de la valeur de la fonction de Planck au milieu de la bande et de la largeur de la bande.

Le principe est de représenter la variation de  $\kappa_\nu$  en fonction de la fréquence sous une forme simplifiée. La plupart des modèles à bandes étroites sont des modèles statistiques<sup>4</sup>, notamment le modèle de Malkmus qui permet de construire la statistique de la bande à partir du coefficient d'absorption moyen et d'un paramètre de forme du spectre. Ce paramètre de forme dépend de la largeur moyenne à mi-hauteur des raies d'absorption et de leur espacement moyen. Pour l'approche utilisée, le modèle à bandes étroites utilisant les  $k$  distributions avec l'approximation des  $k$ -corrélés<sup>5</sup> sera détaillé dans le paragraphe suivant.

### Les modèles à bandes larges

Ils consistent à se placer au delà de l'approximation de bandes étroites, c'est à dire que la variation de la fonction de Planck ne peut plus être considérée constante. Ils permettent notamment de réduire le nombre de bandes utilisées, comme dans [37]. Ils sont en pratiques assez peu utilisés.

### Les modèles globaux

Les modèles globaux visent à reconstruire le coefficient d'absorption du mélange de gaz avec un minimum d'informations. Dans ce cas la largeur de la bande est celle du spectre dans son ensemble. Avec de tels modèles les conditions aux limites ne peuvent être prises en compte que pour des parois grises (*i.e.* l'émissivité de la paroi ne dépend pas de la longueur d'onde). La description la plus simple est de considérer l'absorption constante, c'est le modèle de gaz gris. Ce modèle reste peu précis et de nombreuses autres méthodes ont été développées.

La plus simple, proposée par Hottel et Sarofim dans les années 60, est le modèle en somme pondérée de gaz gris<sup>6</sup> qui consiste à représenter le comportement d'un gaz comme la somme pondérée des grandeurs de plusieurs gaz gris représentatifs. Modest propose un modèle WSGG [38] dont Soufiani va montrer les limites [39]. Denison et Webb vont proposer une amélioration avec le modèle SLW<sup>7</sup> [40, 41]. Le modèle SLW est le premier modèle d'une classe de modèles qui consistent à reconstruire les propriétés de ces gaz gris à partir des données LBL. Viennent ensuite les modèles ADF ou ADF-FG développés par Pierrot *et al.* [42, 43], le modèle FSK de Modest [44]. Ces différents modèles ont toutes la même démarche et l'approche développée par André et Vaillon [45] vise à généraliser ces modèles *via* le modèle aux  $k$ -moments.

Les modèles globaux ont pour principal intérêt d'être rapides en temps CPU. Aussi dans le cadre d'un couplage combustion-rayonnement c'est vers ce type de modèles qu'il faudra se tourner. Le challenge est d'utiliser le modèle le plus rapide qui restitue correctement l'absorption des gaz pour un mélange d'espèces donné. Certains modèles

<sup>4</sup>SNB pour Statistical Narrow Band

<sup>5</sup>SNBcK pour Statistical Narrow Band with correlated  $k$  approximation

<sup>6</sup>WSGG pour Weighted Sum of Gray Gases

<sup>7</sup>SLW pour Spectral Line WSGG

supposent des rapports d'espèces constants ce qui est une approximation grossière dans une flamme turbulente.

Goutière *et al.* ont montré que le modèle SNBcK était le modèle spectral offrant le meilleur compromis en précision et en temps de calcul [46, 47]. La majorité des calculs faits par la suite utiliseront ce modèle comme référence. Ce modèle permet une description du spectre en  $\kappa_\nu$  compatible avec l'utilisation d'une méthode de résolution différentielle de l'ETR. Le modèle global basé sur le modèle SNBcK<sup>8</sup> proposé par Liu [48], a été choisi et ses limites ont été étudiées ce qui fait l'objet du chapitre 3.

### 2.2.3 Le modèle statistique à bandes étroites formulé en $k$ -correlés (SNBcK)

Le modèle SNBcK étant utilisé pour construire le modèle FS-SNBcK qui sera présenté par la suite, ses principes sont rappelés, tous les éléments nécessaires à la compréhension du modèle sont donnés (pour plus de détails se référer à [2]). Partant de la méthode des  $k$ -distribution, le modèle de Malkmus est utilisé pour modéliser la statistique de répartition des raies. Les paramètres du modèle de Malkmus sont obtenus à partir d'une base de données SNB. Enfin pour traiter des mélanges de gaz, un modèle de mélange doit être utilisé.

#### Méthode des $k$ -distributions

Si  $F$  est une fonction du coefficient d'absorption  $\kappa_\nu$  et  $I$  l'intégrale sur une bande étroite de largeur  $\Delta\nu$  définie de la façon suivante :

$$\overline{I}_{\Delta\nu} = \int_{\Delta\nu} L_\nu^0 F(\kappa_\nu) d\nu \quad (2.41)$$

où  $L_\nu^0$  est la fonction de Planck qui ne dépend que de la température et de la fréquence. Si l'intervalle  $\Delta\nu$  n'est pas trop large la fonction de Planck peut être considérée constante et égale à  $\overline{L}_{\Delta\nu}^0$  :

$$\overline{I}_{\Delta\nu} \approx \overline{L}_{\Delta\nu}^0 \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \overline{L}_{\Delta\nu}^0 \Delta\nu \overline{F}_{\Delta\nu} \quad (2.42)$$

La moyenne de la fonction  $F$  sur l'intervalle  $\Delta\nu$  s'écrit alors :

$$\overline{F}_{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \int_0^\infty F(\kappa) f(\kappa) d\kappa \quad (2.43)$$

La méthode des  $k$ -distributions consiste à considérer que l'évolution de  $F(\kappa_\nu)$  se fait de façon statistique sur la bande étroite  $\Delta\nu$ . En introduisant  $f(\kappa)$ , la densité de probabilité des valeurs possibles de  $\kappa$ , la moyenne sur la bande étroite de  $F$  est calculée comme l'espérance statistique de la fonction  $F$  de la variable aléatoire  $\kappa$  de densité de probabilité  $f(\kappa)$ . On transforme ainsi l'intégrale sur  $\nu$  en une intégrale sur les valeurs possibles de  $\kappa$ .

Afin d'éviter la difficulté liée à la résolution d'un spectre peu organisé en fréquence obtenu à partir d'un modèle LBL, Domoto [49] a introduit le principe de

<sup>8</sup>FS-SNBcK pour Full Spectrum SNBcK

$k$ -distributions. Le but est de se libérer de la dépendance en fréquence en utilisant la fonction de distribution  $f(\kappa)$ , probabilité de la valeur  $\kappa$  dans l'intervalle  $\Delta\nu$ . Si la bande étroite  $\Delta\nu$  est suffisamment étroite pour que  $\kappa(\nu)$  soit monotone alors :

$$f(\kappa) = \frac{1}{\Delta\nu} \left| \frac{d\nu}{d\kappa} \right| \quad (2.44)$$

En pratique cette hypothèse n'est pas vérifiée pour un spectre de raies. L'intervalle  $\Delta\nu$  est découpé en  $N$  sous-intervalles  $i$  où  $\kappa(\nu)$  est monotone avec une valeur minimale  $\kappa_{i,min}$  et maximale  $\kappa_{i,max}$ . La densité de probabilité s'écrit alors :

$$f(\kappa) = \frac{1}{\Delta\nu} \sum_{i=1}^N \left| \frac{d\nu_i}{d\kappa} \right| \times [H(\kappa - \kappa_{i,min}) - H(\kappa_{i,max} - \kappa)] \quad (2.45)$$

où  $H$  est la fonction échelon unité.

La transmittance moyenne sur une bande étroite est telle que :

$$\bar{T}_{\Delta\nu}(l) = \int_0^{\infty} \exp(-\kappa l) f(\kappa) d\kappa \quad (2.46)$$

En observant que  $\bar{T}_{\Delta\nu}$  est une transformée de Laplace de  $f$ , qui peut alors s'écrire :

$$f(\kappa) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{T}_{\Delta\nu}) \quad (2.47)$$

En général l'allure de cette fonction n'est pas monotone en fonction de  $\kappa$ , aussi il est plus commode d'introduire la fonction de répartition  $g$  ou distribution cumulée :

$$g(\kappa) = \int_0^{\kappa} f(\kappa') d\kappa' \quad (2.48)$$

Cette fonction est monotone croissante, à valeur dans l'intervalle  $[0; 1]$ . Ce qui permet d'obtenir la fonction inverse  $\kappa(g)$ . En utilisant l'Eq.2.48 dans 2.43 :

$$\bar{F}_{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \int_0^1 F(\kappa(g)) dg \quad (2.49)$$

Ce qui revient à réordonner le spectre de la bande en fonction de la variable  $g$ . Enfin l'intérêt principal de la fonction  $\kappa(g)$  est que la résolution numérique de l'intégrale en fonction de  $g$  peut être faite par une quadrature de Gauss, ce qui donne :

$$\bar{F}_{\Delta\nu} \approx \sum_{n=1}^{N_q} \omega_n F(\kappa(g_n)) \quad (2.50)$$

où  $g_n$  et  $\omega_n$  sont respectivement le point de quadrature et le poids associé.

Le modèle en  $k$ -distribution, pour être opérationnel, nécessite de connaître la fonction  $g(\kappa)$  qui sera ensuite inversée de façon numérique. Domoto [49] montre qu'il est possible, à partir des modèles de transmittance moyenne de déterminer  $f(\kappa)$ . Le modèle de Malkmus est un modèle permettant d'obtenir de manière analytique la transmittance  $\bar{T}_{\Delta\nu}$ , sous certaines hypothèses sur la forme et la distribution des raies. Il sera utilisé pour le calcul de la fonction  $g(\kappa)$ .

### Modèle de Malkmus

Le modèle de Malkmus [50], s'avère très représentatif du type de groupement de raies rencontré en combustion, il est établi selon les hypothèses suivantes :

- les intensité de raies sont distribuées selon la loi de probabilité :

$$p(S) = \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{S}{S^*}\right) \quad (2.51)$$

où  $S^*$  est l'intensité moyenne ;

- toutes les raies ont la même largeur à mi-hauteur  $\bar{\gamma}$  ;
- les centres de raies sont distribués de manière uniforme ;
- le nombre de raies contenues dans une bande  $\Delta\nu$  est suffisamment important pour permettre une représentation statistique.

On définit la valeur moyenne du coefficient d'absorption  $\bar{\kappa}_{\Delta\nu}$  par :

$$\bar{\kappa} = \frac{S^*}{\bar{\delta}} \quad (2.52)$$

où  $\bar{\delta}$  est l'écart moyen entre deux raies.

On introduit  $\Phi$  le paramètre de forme, ou paramètre de séparation des raies, défini par :

$$\Phi = \frac{2\bar{\gamma}}{\bar{\delta}} \quad (2.53)$$

Le modèle de Malkmus permet de reconstruire la transmittance moyenne sur une épaisseur  $l$  façon analytique à partir des paramètres  $\bar{\kappa}$  et  $\Phi$  :

$$\bar{T}_{\Delta\nu} = \exp\left[\Phi\left(1 - \left(1 + \frac{2\bar{\kappa}l}{\Phi}\right)^{1/2}\right)\right] \quad (2.54)$$

Partant de ce modèle, Domoto propose de calculer la transformée de Laplace inverse pour obtenir la densité de probabilité  $f(\kappa)$  :

$$f(\kappa) = \sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}}{2\pi\kappa^3}} \exp\left[-\frac{\Phi}{2} \frac{(\kappa - \bar{\kappa})^2}{\bar{\kappa}\kappa}\right] \quad (2.55)$$

Cette fonction est une distribution inverse gaussienne, dont la fonction de répartition s'écrit [33] :

$$g(\kappa) = \operatorname{erf}\left[-\sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}}{\kappa}} \left(1 - \frac{\kappa}{\bar{\kappa}}\right)\right] + \exp(2\Phi) \operatorname{erf}\left[-\sqrt{\frac{\Phi\bar{\kappa}}{\kappa}} \left(1 + \frac{\kappa}{\bar{\kappa}}\right)\right] \quad (2.56)$$

Utilisant cette expression la fonction  $\kappa(g)$  est obtenue par inversion numérique en utilisant une simple dichotomie.

### Base de données SNB

La base de données SNB fournie par le laboratoire EM2C est utilisée [51] dans le modèle de Malkmus. Elle fournit les paramètres  $\bar{\kappa}$  et  $\bar{\delta}$  pour des températures allant de 300

à 2900 K par pas de 200 K. Entre ces températures les valeurs sont interpolées linéairement. Les espèces prises en compte sont H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> et CO ; les propriétés d'absorption des carburants d'hydrocarbure ou de OH ne sont pas prises en compte. Récemment les propriétés SNB du CH<sub>4</sub> ont été publiées [52] et pourraient être incorporées facilement, cependant les propriétés cK des autres hydrocarbures n'existent pas et leur absorption est souvent négligée.

Dans le cas de H<sub>2</sub>O, le spectre est découpé en 367 bandes étroites de largeur  $\Delta\nu = 25\text{cm}^{-1}$  entre  $150\text{cm}^{-1}$  et  $9300\text{cm}^{-1}$ . Pour CO<sub>2</sub> ces paramètres sont fournis sur 96 des 367 bandes sur 4 plages spectrales ( $450 \rightarrow 1200\text{cm}^{-1}$ ,  $1950 \rightarrow 2450\text{cm}^{-1}$ ,  $3300 \rightarrow 3800\text{cm}^{-1}$  et  $4700 \rightarrow 5225\text{cm}^{-1}$ ). Les paramètres du CO sont fournis sur 48 bandes en deux plages spectrales ( $1750 \rightarrow 2335\text{cm}^{-1}$  et  $3775 \rightarrow 4350\text{cm}^{-1}$ ). En dehors des plages spectrales données, CO<sub>2</sub> et CO sont considérés comme transparents.

Le paramètre d'élargissement de raie  $\bar{\gamma}$  (en  $\text{cm}^{-1}$ ) est supposé identique pour toutes les bandes. Les auteurs de la base de données SNB proposent des corrélations pour chacune des espèces permettant de le calculer en fonction de la température, de la pression totale, et des fractions molaires de chaque espèce  $X_i$  :

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_{\text{H}_2\text{O}} &= P \times 0,066 \left( \frac{T}{296} \right) \left( 7,0 \left( \frac{T}{296} \right) X_{\text{H}_2\text{O}} + 1,2(X_{\text{H}_2\text{O}} + X_{\text{N}_2}) + 1,5X_{\text{CO}_2} \right) \\ \bar{\gamma}_{\text{CO}_2} &= \begin{cases} T \left( \frac{T}{296} \right)^{0,7} [0,07X_{\text{CO}_2} + 0,058X_{\text{N}_2} + 0,015X_{\text{H}_2\text{O}}] & \text{si } \nu < 900\text{cm}^{-1} \\ T \times 0,45913 \sqrt{\frac{T}{900}} [0,07X_{\text{CO}_2} + 0,058X_{\text{N}_2} + 0,015X_{\text{H}_2\text{O}}] & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.57) \\ \bar{\gamma}_{\text{CO}} &= P \sqrt{\frac{T}{296}} [0,07X_{\text{CO}_2} + 0,06(X_{\text{CO}} + X_{\text{N}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}})]\end{aligned}$$

Ce modèle permet de calculer les paramètres  $\bar{\kappa}$  et  $\Phi$  pour un seul gaz. Dans le cas de mélanges de gaz, un modèle de est utilisé pour calculer les propriétés d'un mélange multi-espèces.

### Propriétés radiatives pour un mélange de gaz

Pour prendre en compte un mélange de plusieurs espèces, différents modèles sont proposés par Liu [53]. Le modèle basé sur la limite de milieu optiquement fin donne le coefficient d'absorption moyen  $\langle \kappa_{\text{mix}} \rangle$  et le paramètre de forme  $\Phi_{\Delta\nu, \text{mix}}$  pour un mélange de  $N_g$  gaz pour lesquels sont donnés les paramètres  $\bar{\kappa}_k$  et  $\Phi_{\Delta\nu, k}$  :

$$\begin{aligned}\langle \kappa_{\text{mix}} \rangle_{\Delta\nu} &= \sum_{k=1}^{N_g} \bar{\kappa}_k \\ \frac{\langle \kappa_{\text{mix}} \rangle_{\Delta\nu}^2}{\Phi_{\Delta\nu, \text{mix}}} &= \sum_{k=1}^{N_g} \frac{\bar{\kappa}_k^2}{\Phi_{\Delta\nu, k}}\end{aligned} \quad (2.58)$$

où  $\bar{\kappa}_k$  est le coefficient d'absorption moyen sur la bande étroite et  $\Phi_{\Delta\nu, k}$  est le paramètre de forme pour l'espèce  $k$ . L'avantage principal de ce modèle est d'assurer une bonne précision avec un faible temps de calcul.

### Hypothèse des $k$ -corrélés

Le modèle de Malkmus permet d'évaluer la transmittance moyenne dans une grande classe de problèmes et si le milieu est isotherme et homogène. Dans des cas inhomogènes et anisothermes, la transformation ( $\nu \rightarrow g$ ) faite dans le cas de  $k$ -distributions nécessite une approximation supplémentaire pour prendre en compte l'influence des inhomogénéités sur le spectre initial.

L'évaluation de l'Eq. 2.56 n'est valable que pour une température et une pression fixées. Pour prendre en compte des variations de température, pression ou concentration d'espèces il faut faire appel à l'hypothèse des  $k$ -corrélés [54] qui a donné naissance à la méthode  $ck$ . Cette hypothèse consiste à supposer qu'en chaque point de l'espace le réarrangement ( $\nu \rightarrow g$ ) est identique. Autrement, la dépendance spectrale n'est pas modifiée par le chemin optique entre 2 points.

Une hypothèse compatible avec l'approximation  $ck$  est l'approximation de spectre homothétique, « scaling approximation » [55]. Dans ce cas les intensités des raies du spectre d'absorption qui dépendent de  $P$  et  $T$  sont modifiées par les fluctuations de ces grandeurs telle que le spectre soit modifié de façon uniforme ou homothétique. Il est ainsi admis que sur une bande étroite seule la valeur moyenne du coefficient d'absorption est modifiée et que la distribution est inchangée :

$$\kappa_\nu(\nu, T, P, X_i) = \kappa_\nu(\nu)u(T, P, X_i) \quad (2.59)$$

où  $\kappa_\nu(\nu)$  est le coefficient d'absorption à un état de référence, et  $u(T, P, X_i)$  une fonction adimensionnelle dépendante des propriétés locales mais pas de la longueur d'onde  $\nu$ .

Cette hypothèse ne s'applique pas dans le cas de fortes variations de température, par exemple sur un trajet optique de plusieurs kilomètres pour des applications de télédétection. Dans ce cas, la forme des raies est modifiée entre un point A et un point B et il n'est plus possible de recalculer un spectre en B à partir du spectre  $\kappa(g)$  connu en A. La méthode alors utilisée est la méthode des « gaz fictifs en  $k$ -corrélés »<sup>9</sup>.

Des travaux de Liu ont montré la pertinence du modèle SNB $ck$  pour des applications en combustion [56].

#### 2.2.4 Propriétés spectrales des particules de suie

D'un point de vue radiatif les propriétés radiatives des suies sont prises en compte en ajoutant quatre bandes supplémentaires pour tenir compte du rayonnement des suies dans le proche infrarouge et le visible ( $9300 \rightarrow 20000\text{cm}^{-1}$ ). Le coefficient d'absorption des suies est donné par [57] :

$$\kappa_{\nu,soot} = 5.5f_\nu\nu \quad (2.60)$$

où  $f_\nu$  est la fraction volumique de suies et  $\nu$  le nombre d'onde en  $\text{cm}^{-1}$ . Le coefficient d'absorption total est donné par la somme de la contribution du gaz et des suies :

$$\kappa_{\nu,total} = \kappa_{\nu,gaz} + \kappa_{\nu,soot} \quad (2.61)$$

<sup>9</sup>CKFG pour Correlated-k with Fictitious Gases

## 2.3 MÉTHODES DE RÉOLUTION

La résolution de l'ETR peut être envisagée de différentes manières : soit en utilisant le formalisme intégral soit en utilisant le formalisme différentiel. La présentation faite ici est loin d'être exhaustive étant donnée la multitude de méthodes existantes : des méthodes basées sur les approches différentielles, intégrales ou hybrides. Les méthodes principalement utilisées dans la communauté radiative sont décrites.

### 2.3.1 Approche intégrale

Les méthodes intégrales ont pour but de résoudre la formulation intégrale de l'ETR, Eq. 2.28. On citera la méthode de lancer de rayon et les méthodes statistiques.

#### Méthode de lancer de rayon

La méthode de lancer de rayon, « Ray tracing », consiste à discrétiser l'angle solide en un nombre de directions très important conduisant à des éléments d'angle solide suffisamment petits pour considérer une distribution uniforme du rayonnement dans chacun d'entre eux. Pour chaque direction, ou « rayon », associé à chaque angle solide, le chemin optique est suivi en découpant le trajet en segments de longueur  $l$ , supposés homogènes et isothermes, pour lesquels une transmittivité moyenne  $\bar{T}_v(l)$  peut être calculée. La forme intégrale de l'ETR est calculée analytiquement au point  $P(\mathbf{x})$  où la luminance est recherchée. L'intégration sur le chemin optique sur  $N$  segments est faite par parties et la luminance sur le trajet est donnée par :

$$L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = L_v(\mathbf{x}_w, \mathbf{u})\bar{T}_v(\mathbf{x}_w \rightarrow \mathbf{x}) + \sum_{i=1}^N (1 - T_v(l_i))L_v^0(\mathbf{x}_i) \quad (2.62)$$

La précision du calcul dépend du nombre de directions choisies, ainsi que du nombre de segments utilisés pour représenter les inhomogénéités sur un trajet. De plus le temps de calcul augmente de façon considérable si la réflexion à la paroi est prise en compte. Cette méthode permet par exemple de produire des solutions de référence pour des calculs provenant de méthodes qui utilisent des approximations [58, 59].

#### Approche statistique

Les méthodes statistiques font référence à la Méthode de Monte Carlo (M.M.C)<sup>10</sup>. Appliquée aux transferts radiatifs elles simulent numériquement le comportement de paquets de photons depuis leur émission jusqu'à leur absorption totale. Elles consistent à reconstruire un grand nombre d'événements aléatoires : absorption, émission, diffusion. Ces événements sont générés à l'aide d'un générateur aléatoire par l'utilisation de densités de probabilité d'événements.

En utilisant le théorème de la limite centrale, la statistique des événements générés permet un calcul d'erreur par écart type :  $\sigma \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ . Le calcul de l'écart type indique

<sup>10</sup>MCM pour Monte-Carlo Method

la convergence de la solution moyenne calculée et dépend du type de pdf utilisée. La convergence de la solution sera meilleure pour un plus grand nombre d'événements générés. L'optimisation des algorithmes consiste à travailler sur les pdf utilisées pour réduire le nombre de tirages aléatoires nécessaires à la convergence de la solution. Ces méthodes sont particulièrement adaptées au traitement de la diffusion car elle permettent de prendre en compte des fonctions de phase non isotropes.

La méthode de Monte Carlo peut s'appliquer de deux manières :

- La première consiste à générer des trajets optiques en tirant de façon aléatoire la probabilité d'un photon d'être absorbé, émis ou diffusé. En comptant le nombre de photons absorbés en chaque point, les bilans énergétiques peuvent être évalués : c'est l'approche analogue. Cette méthode a été appliquée dans le domaine de la combustion [60, 61]. Cependant, cette méthode bien que fournissant des solutions de référence souffre, la plupart du temps, de temps de calculs très importants.
- Une autre manière d'utiliser la méthode de Monte Carlo, dont les derniers développements ont été effectués dans la thèse de M. Roger [62], consiste à reformuler le problème mathématiquement sous forme d'intégrales. Cette approche permet de réduire les temps de convergence si le problème mathématique est bien posé et les densités de probabilité bien choisies. Il est possible de faire des calculs de sensibilité à certains paramètres en utilisant les mêmes générations d'événements sans coût de calcul supplémentaire. Cependant, il faut une bonne connaissance du système global pour proposer l'écriture mathématique optimale des densités de probabilité.

### 2.3.2 Approche différentielle

Ces méthodes ont pour but de résoudre l'ETR sous sa forme différentielle, Eq. 2.21, accompagnée de ses conditions aux limites. La méthode aux harmoniques sphériques est communément utilisée. On distingue également les méthodes aux volumes finis<sup>11</sup> parmi lesquels on trouve les méthodes aux ordonnées discrètes<sup>12</sup>.

#### Méthode aux harmoniques sphériques

Les méthodes aux harmoniques sphériques ou méthodes  $P_N$  consiste à écrire la luminance  $L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  sous la forme d'une série de Fourier généralisée en séparant la dépendance spatiale de la directionnelle en deux termes distincts :

$$L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l L_l^m(\mathbf{x}) \cdot Y_l^m(\mathbf{u}) \quad (2.63)$$

Les  $Y_l^m(\mathbf{u})$  sont les harmoniques sphériques associées, telles que :

$$Y_l^m(\mathbf{u}) = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[ \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} \exp(im\phi) P_l^{|m|}(\cos(\theta)) \quad (2.64)$$

<sup>11</sup>FVM pour Finite Volume Method

<sup>12</sup>DOM pour Discrete Ordinate Method

où  $\phi$  et  $\theta$  sont les coordonnées polaires et azimutales du vecteur unitaire  $\mathbf{u}$  et  $P_l$  est le polynôme de Legendre d'ordre  $l$ . En retenant les termes tels que  $l < N$ , un jeu de  $N + 1$  équations différentielles est obtenu (nécessitant  $N + 1$  conditions aux limites).

Les méthodes d'ordre impair sont les plus utilisées parmi lesquelles la méthode  $P_1$  ou « approximation de diffusion ». Elle permet de déterminer avec une seule équation l'éclairement volumique  $G$  dans les cas où l'épaisseur optique du milieu est grande. Si l'épaisseur optique est faible cette méthode donne des résultats erronés. Les ordres supérieurs sont rapidement plus lourds à mettre en place et à partir de l'ordre 5, la complexité du calcul est trop coûteuse par rapport au gain en précision.

### Méthode des flux

Les méthodes des volumes finis ou méthode des flux reposent sur une discrétisation angulaire grossière de la variation angulaire de la luminance selon les axes du repère cartésien. On trouve des méthodes à 2 flux, type Schuster-Hamaker [63, 64], où le rayonnement est considéré comme plan parallèle avec un flux ascendant ou descendant. Il existe également des modèles à quatre flux ou six flux. Le modèle de type Schuster-Schwarschild consiste à diviser l'angle solide en plusieurs angles solides où la luminance est supposée constante [65]. Cette méthode est pratique pour un calcul couplé avec un écoulement mais il est difficile de modéliser correctement des géométries complexes.

La DOM est parfois classée parmi la méthode des flux. Elle est basée sur intégration angulaire de l'angle solide discrétisée à l'aide d'une quadrature. Cette méthode est particulièrement adaptée aux problèmes dans des géométries complexes rencontrées dans les applications de combustion car il est possible de prendre en compte des maillages non structurés. Par ailleurs cette méthode offre le meilleur compromis entre temps de calcul et précision [4]. Cette méthode va être présentée en détail au paragraphe suivant car c'est sur elle que repose le solveur utilisé : PRISSMA<sup>13</sup>. Ce solveur est basé sur le code DOMASIUM<sup>14</sup>, développé initialement et validé par David Joseph [2, 58, 59, 66].

## 2.4 LA MÉTHODE DES ORDONNÉES DISCRÈTES DANS PRISSMA

Dans ce paragraphe, la version discrétisée de l'ETR, utilisée dans le solveur radiatif PRISSMA, est présentée. La méthode des ordonnées discrètes consiste à discrétiser l'ETR sur l'angle solide suivant une quadrature angulaire. L'ETR est ensuite discrétisée spatialement sur le domaine faisant appel à une méthode de type volumes finis. Enfin pour prendre en compte la dépendance spectrale, un modèle de type bande étroites sera utilisé, introduisant une discrétisation spectrale de l'ETR suivant les bandes étroites et les points de la quadrature.

La version discrétisée de l'ETR est présentée dans cette section, elle est en tout point identique à celle utilisée dans le code DOMASIUM [2]. La collaboration entre

<sup>13</sup>Parallel Radiation Solver with Spectral integration on Multicomponent media

<sup>14</sup>Discrete Ordinates Method Applied with Spectral Integration on Unstructured Meshes

le CERFACS et le Centre RAPSODEE a permis de nouveaux développements à partir du code DOMASIUM : optimisations informatiques, algorithmes plus efficaces, implémentation de modèles globaux (WSGG et FS-SNBcK), différents niveaux de parallélisme...

Une fois les différentes discrétisations de l'ETR rappelées, différents niveaux de parallélisme seront décrits. Enfin les limites de validités des DOM seront rappelées.

### 2.4.1 Discrétisation angulaire

La méthode des ordonnées discrètes a été originalement suggérée par Chandrasekhar [67] pour des applications astrophysiques. Elle est basée sur une représentation discrète de la variation angulaire de la luminance et ne requiert pas d'hypothèses sur la variation angulaire de la luminance. La solution de l'équation de transport est obtenue en résolvant l'ETR pour un jeu de directions discrètes de l'angle solide  $4\pi$ . L'ETR est discrétisée sur l'angle solide en utilisant un nombre  $N_{dir}$  de directions  $\mathbf{u}_i(\mu_i, \eta_i, \xi_i)$ , associées à leurs poids respectifs  $\omega_i^a$ . Ainsi l'intégrale d'une fonction  $f(\mathbf{u})$  peut être approximée par une quadrature sur les directions comme :

$$\int_{4\pi} f(\mathbf{u}) d\Omega \simeq \sum_{i=1}^{N_{dir}} \omega_i^a f(\mathbf{u}_i) \quad (2.65)$$

où  $\mathbf{u}_i$  sont les directions discrètes et  $\omega_i^a$  les poids associés à la quadrature angulaire.

Chaque direction  $\mathbf{u}_i$  peut s'écrire dans le repère cartésien  $R(O, \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  sous la forme :

$$\mathbf{u}_i = \mu_i \mathbf{i} + \eta_i \mathbf{j} + \xi_i \mathbf{k} \quad (2.66)$$

Les différentes quadratures disponibles sont les quadratures  $S_N$ , les quadratures  $T_N$  et les quadratures polaires/azimutales. Les quadratures  $S_N$  ont été utilisées dans cette étude (voir [2] pour plus de détails).

Une quadrature  $S_N$  est un jeu de  $n = N(N + 2)$  directions discrètes. Les jeux de quadrature ont été définis par Carlson [68] puis Fiveland [69, 70] en satisfaisant certaines relations de symétrie. Les directions de la quadrature sont invariants par toute rotation de  $90^\circ$  autour des axes du repère, l'orientation des axes du repère ne devant pas influencer les résultats obtenus. Les quadratures  $S_N$  ont été redéfinis en 1987 par Truelove [71]. La précision de la quadrature dépend de l'ordre de celle-ci cependant diverses applications (feux ou chambre de combustion) ont montré que la quadrature  $S_4$ , utilisant 24 directions (voir Fig. 2.7), offrait le meilleur compromis entre précision et temps de calcul [66, 72]. La quadrature  $LC_{11}$  (96 directions) peut servir de référence car il a été montré dans [66, 72] qu'elle donnait des résultats en très bon accord avec des solutions Monte Carlo sur une configuration LES de flamme turbulente.

### 2.4.2 Discrétisation spatiale

La formulation des DOM retenue ici est celle présentée dans les travaux de D. Joseph *et al.* [73, 2, 74, 72]. L'ETR est résolue pour chaque direction discrète  $\mathbf{u}_i$  en utilisant

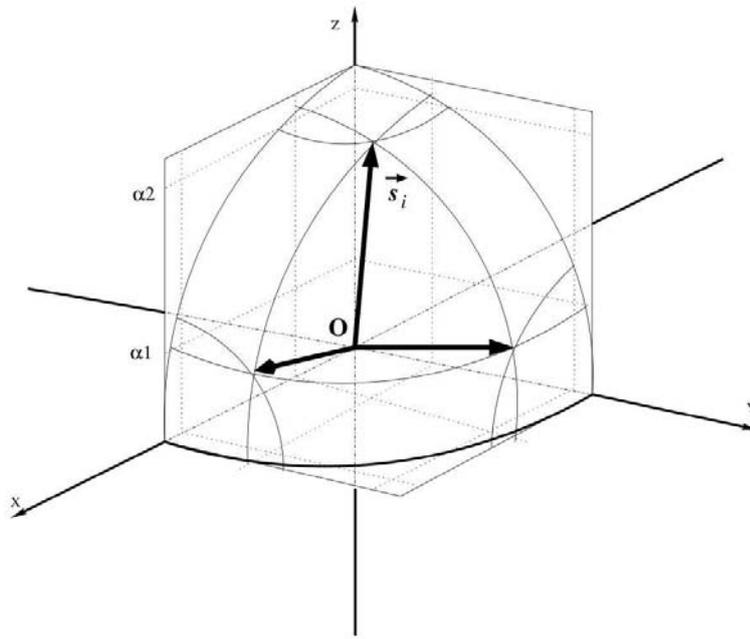


FIG. 2.7 – Quadrature angulaire  $S_4$  : 3 directions  $\times$  8 quadrants = 24 , d'après [2].

l'approche des volumes finis. L'intégration de l'Eq. 2.21 sur un volume  $V$  délimité par une surface  $\Sigma$  de normale sortante  $\mathbf{n}$ , en utilisant le théorème de la divergence donne :

$$\int_{\Sigma} L_v \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Sigma = \int_V \kappa_v (L_v^0 - L_v) dV \quad (2.67)$$

Le domaine est discrétisé sur un maillage non structuré à l'aide de tétraèdres. Prenant  $L_{v,j}$  la luminance moyenne sur la face  $j$ , associée au centre de la face et  $L_{v,P}$  et  $L_{v,P}^0$  les luminances moyennes sur le volume  $P$ , associées au centre de la cellule, si  $P$  est suffisamment petit pour considérer la luminance uniforme alors l'Eq.2.67 peut être discrétisée comme :

$$\sum_{j=1}^{N_{\text{faces}}} L_{v,j} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j) A_j = \kappa_v V (L_{v,P}^0 - L_{v,P}) \quad (2.68)$$

où  $A_j$  est l'aire de la face  $j$  et  $V$  le volume de la cellule. Les luminances  $L_v(\mathbf{u})$  et  $L_v^0$  sont supposées constantes sur les volumes de contrôle  $V$  et respectivement égales à  $L_{v,P}$  et  $L_{v,P}^0$ . La luminance  $L_{v,j}$  est supposée constante sur chaque face.

Le produit scalaire de la direction  $i$  avec la normale de la face considérée  $j$  est défini par :

$$D_{ij} = \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j = \mu_i n_{xj} + \eta_i n_{yj} + \xi_i n_{zj} \quad (2.69)$$

Plusieurs schémas sont disponibles pour résoudre l'Eq. 2.68 : le schéma exponentiel, le schéma step et le schéma en flux moyens<sup>15</sup> [2]. Le schéma DMFS [75] s'est avéré très efficace pour des maillages non structurés, tant que l'épaisseur optique des mailles reste faible. Ce schéma utilise la décomposition :

$$L_{v,P} = \frac{1}{2} L_{v,out} + \frac{1}{2} L_{v,in} \quad (2.70)$$

<sup>15</sup>DMFS pour Diamond Mean Flux Scheme

où  $\overline{L_{v,in}}$  est la moyenne pondérée de la luminance des faces d'entrée et  $\overline{L_{v,out}}$  la moyenne pondérée des luminances quittant la cellule :

$$\overline{L_{v,in}} = \frac{\sum_{j,D_{ij}<0} D_{ij}A_j L_{v,j}}{\sum_{j,D_{ij}<0} D_{ij}A_j} \quad (2.71)$$

et

$$\overline{L_{v,out}} = \frac{\sum_{j,D_{ij}>0} D_{ij}A_j L_{v,j}}{\sum_{j,D_{ij}>0} D_{ij}A_j} \quad (2.72)$$

En substituant  $\overline{L_{v,out}}$  de l'Eq. 2.70 dans l'Eq.2.68 (voir [2] pour plus de détails), l'expression suivante pour  $I_{v,P}$  est obtenue :

$$I_P = \frac{\frac{1}{2}\kappa_v V L_v^0 - \Theta \sum_{j,D_{ij}<0} D_{ij}A_j L_{v,j}}{\frac{1}{2}\kappa_v V + \sum_{j,D_{ij}>0} D_{ij}A_j} \quad (2.73)$$

avec

$$\Theta = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{\sum_{j,D_{ij}>0} D_{ij}A_j}{\sum_{j,D_{ij}<0} D_{ij}A_j} \quad (2.74)$$

Comme le montre la Fig. 2.8, si le produit scalaire  $D_{ij}$  est considéré être la projection de la surface  $A_j$  suivant la direction  $\mathbf{u}_i$  sur un plan  $\Delta$ , orthogonal à ce vecteur, alors :

$$\sum_{j,D_{ij}>0} D_{ij}A_j = - \sum_{j,D_{ij}<0} D_{ij}A_j = A_\Delta \quad (2.75)$$

Conduisant à  $\Theta = 1$ , alors l'Eq. 2.73 s'écrit :

$$I_P = \frac{\frac{1}{2}\kappa_v V L_v^0 - \sum_{j,D_{ij}<0} D_{ij}A_j L_{v,j}}{\frac{1}{2}\kappa_v V + \sum_{j,D_{ij}>0} D_{ij}A_j} \quad (2.76)$$

L'eq. 2.76 donne la luminance au centre de la cellule  $P$ . La luminance des faces où  $D_{ij} > 0$  sont prises égales à  $I_{v,out}$  obtenu par l'Eq. 2.70.

La résolution de l'ETR dans une direction donnée est faite suivant un ordre de balayage des cellules dépendant de la direction de propagation et de la connaissance des luminances aux faces de la cellule incidente.

### Procédure de « réordonnement » (ou sweeping optimization)

Pour une géométrie simple sur un maillage structuré, il est possible de montrer que les mailles peuvent être balayées par ordre croissant sur  $x$  et  $y$  selon une direction choisi  $\mathbf{u}_i$ .

Pour des maillages non structurés, il n'est pas possible de savoir si les luminances d'entrée de la cellule en cours ont déjà été calculées car les données sont structurées de façon aléatoire. La solution consiste à calculer une solution de façon itérative. Si une luminance d'entrée n'est pas connue, sa valeur est nulle. En parcourant toutes les mailles du maillage par itérations successives, la valeur de la luminance de la cellule converge vers une valeur constante.

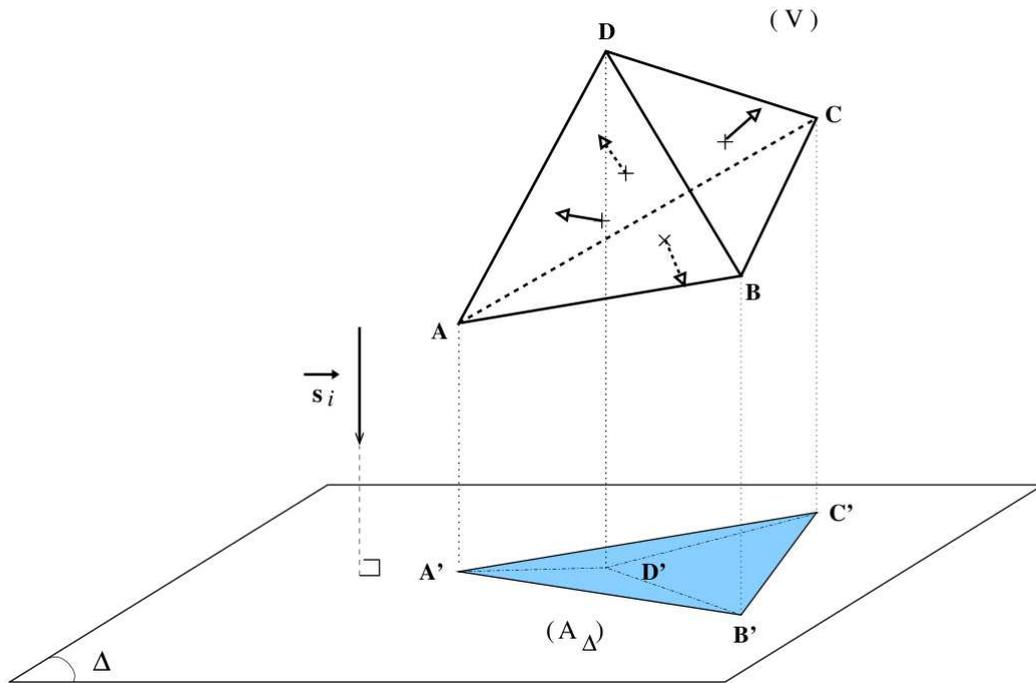


FIG. 2.8 – Transformation géométrique liée au terme  $D_{ij}$ , d'après [2].

La solution utilisée dans DOMASIUM/PRISSMA consiste à réordonner les données. Il s'agit de connaître l'ordre de passage des cellules pour chaque direction discrète  $\mathbf{u}_i$ . Ainsi l'ordre de passage des cellules peut être déterminé de sorte que les luminances aux faces d'entrée soient toujours connues, voir la Fig. 2.9. La solution radiative peut ainsi être obtenue en un seul balayage du maillage.

### 2.4.3 Discrétisation spectrale

Les modèles SNBcK, WSGG et FS-SNBcK sont implémentés dans le solveur PRISSMA. La discrétisation spectrale est détaillée pour le modèle SNBcK. Le bilan radiatif sur toutes les fréquences et dans toutes les directions de l'espace de différence entre l'émission et l'absorption en un point  $P(\mathbf{x})$  :

$$\begin{aligned}
 S_r(\mathbf{x}) &= \int_0^\infty S_{r,\nu}(\mathbf{x}) d\nu \\
 &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \kappa_\nu (L_\nu^0(\mathbf{x}) - L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})) d\Omega d\nu \\
 &= \int_0^\infty \left[ \kappa_\nu (4\pi L_\nu^0(\mathbf{x}) - \int_{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) d\Omega) \right] d\nu
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

Le modèle SNBcK a été utilisé sur  $N_{band} = 371$  de largeur  $\Delta\nu_i$  sur le spectre infrarouge de l'intervalle  $\lambda = [0.5, 68 \mu m]$ , pour chacune d'entre elles la luminance de Planck est supposée constante et vaut  $L_{\Delta\nu_i}^0$ . Le réarrangement en  $k$ -distribution permet de calculer dans chaque bande  $i$ , les  $N_{quad}$  coefficients d'absorption  $\kappa_{i,j}$ , où  $j$  est un point de la quadrature sur  $g$  de poids  $\omega_j$ .

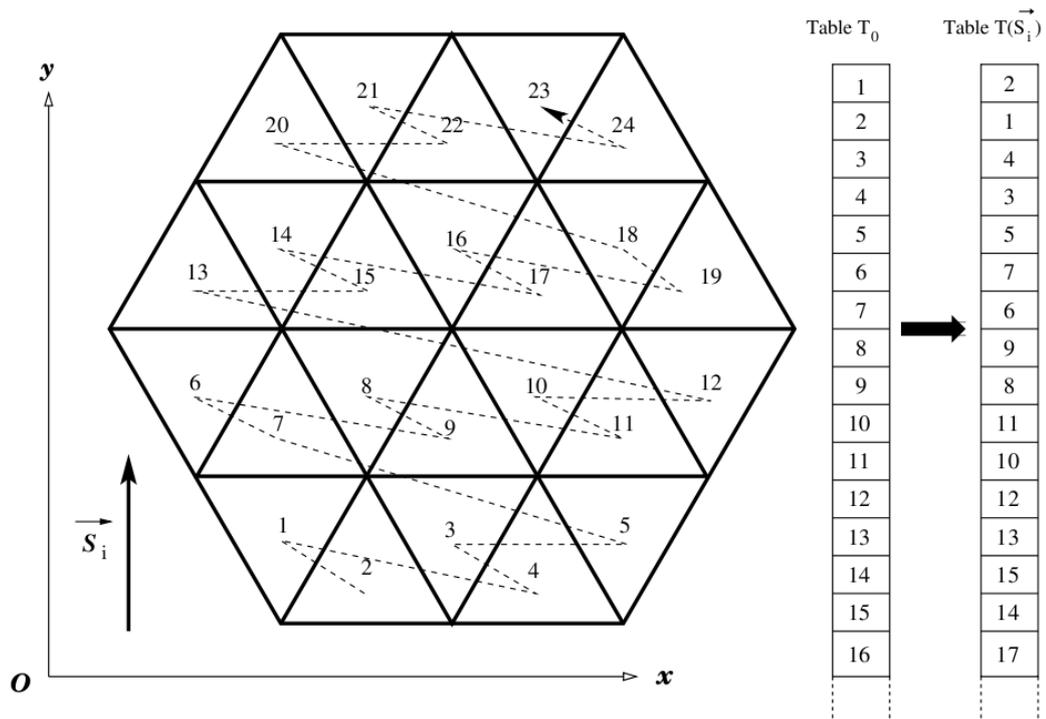


FIG. 2.9 – Principe de réordonnement, d'après [2].

L'expression finale discrète du terme source est donnée par :

$$S_r(\mathbf{x}) \simeq \sum_{i=1}^{N_{band}} \Delta\nu_i \left[ \sum_{j=1}^{N_{quad}} \omega_j \kappa_{ij} \left( 4\pi \overline{L_{\Delta\nu_i}^0(\mathbf{x})} - \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_{i,j}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k) \right) \right] \quad (2.78)$$

où le terme source radiatif dépend de trois intégrations discrètes. Ces intégrations se faisant sur des variables indépendantes, il est possible de paralléliser ce calcul.

#### 2.4.4 Parallélisme

Dans le cas du modèle SNBcK, les intégrations angulaires et spectrales, de l'Eq.2.78, sont indépendantes. Il est donc possible de paralléliser indépendamment sur plusieurs processeurs le calcul de la luminance et de les additionner, voir Fig. 2.10. La mémoire et les processeurs sont mieux utilisés quand un minimum de directions est calculé sur chaque processeur. Comme les données sont triées par direction par l'opération de réordonnement, les accès mémoire sont alors réduits en regroupant les directions par processeur.

Un niveau supplémentaire de parallélisme a été intégré dans le solveur PRISSMA, conjointement avec le travail de thèse de J. Amaya [26, 76]. Le calcul de terme source radiatif a été divisé en deux tâches : le calcul du terme d'émission et le calcul du terme d'absorption :

- Le calcul du terme d'émission  $\kappa_{ij} \overline{L_{\Delta\nu_i}^0(\mathbf{x})}$  ne dépend que des propriétés locales de la maille, température pour la luminance de Planck et température et concentration des espèces pour l'absorption. Bien que le calcul de la luminance de Planck

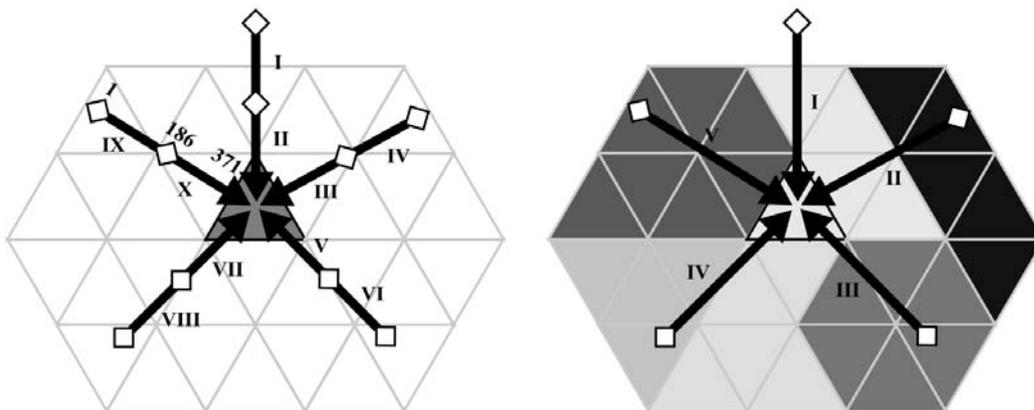


FIG. 2.10 – Gauche : Parallélisation en directions et en fréquences ; dans cet exemple 10 processeurs (notés de I à X) calculent chacun la moitié du spectre pour 5 directions. Droite : Exemple de parallélisation par domaine sur six processeurs, le terme d'émission est calculé en utilisant tous les processeurs disponibles, enfin une parallélisation sur les 5 directions de l'exemple se fait sur 5 processeurs, d'après [26].

soit très rapide, le calcul des coefficients d'absorption  $\kappa_{ij}$  par le modèle SNBcK utilise une dichotomie pour l'inversion numérique de la fonction  $g(\kappa)$  plus coûteuse en temps de calcul. Cette tâche a été découpée par domaines, la Fig. 2.10 illustre un parallélisme par domaine sur six processeurs (zones grisées).

- Le calcul du terme d'absorption  $G_\nu(\mathbf{x}) \simeq \omega_k^q L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k)$  peut être parallélisé sur les directions incidentes.

Ce niveau de parallélisme supplémentaire s'avère particulièrement efficace pour l'utilisation de modèles globaux. Un speed up (*i.e.* rapport du gain en temps de calcul et du nombre de processeurs utilisés) supra linéaire a été obtenu jusqu'à 48 processeurs, probablement dû à des effets de cache, sur la machine jade du cines (processeurs quadricoeur (Harpertown 3 GHz) avec 4 Go de mémoire par coeur). Il serait possible d'ajouter un niveau de parallélisme sur les points de quadrature pour les modèles globaux et atteindre un speed up linéaire jusqu'à 250 à 750 processeurs pour un nombre de point de quadrature respectivement de 5 à 15. Cependant cette parallélisation ne réduit pas la quantité de mémoire utilisée, ce qui est une limite importante sur les machines massivement parallèles.

Il faut noter que la technique de réordonnement des cellules est intrinsèquement séquentielle. Les techniques utilisées en mécanique des fluides pour traiter des configurations très complexes sur des calculateurs massivement parallèles consistent à faire intervenir des sous-domaines de calcul. L'intérêt étant de diminuer les temps de calculs mais aussi l'occupation mémoire du solveur. La physique du rayonnement, est un mode d'échange à distance qui nécessite de connaître les propriétés de l'ensemble du domaine, contrairement à la mécanique des fluides résout des bilans locaux. Aussi pour atteindre des configurations de plusieurs dizaines de millions de mailles il faudra adapter la méthode des DOM à la parallélisation par sous-domaines. Une solution pourrait consister à utiliser le principe de réordonnement uniquement dans des sous-domaines. Ces sous-domaines communiquent ensuite la luminance dans les directions  $\mathbf{u}_i$  aux frontières des domaines. La solution finale sur l'ensemble du domaine serait finalement obtenue de façon itérative lorsque la luminance aux cellules sur l'ensemble du domaine atteint une valeur constante. Évidemment cette technique

de parallélisation est intéressante si le nombre de sous domaines est plus important que le nombre d'itérations nécessaires pour faire converger la valeur de la luminance.

### 2.4.5 Limites de validité des DOM

La méthode des DOM apportent deux défauts majeurs à la validité d'une modélisation : l'effet de rayon et la diffusion numérique.

L'effet de rayon (ou « ray effect ») est lié à une discrétisation angulaire insuffisante et se manifeste par des discontinuités irréalistes dans la distribution des luminances ou des flux de chaleur pouvant conduire à des solutions physiques irréalistes. Cet effet sera plus manifeste dans des configurations ayant des points chauds très localisés (par exemple à la température  $T_1$ ). Dans ce cas si l'intégration angulaire est insuffisante le terme du rayonnement incident  $G$  en un point  $P(\mathbf{x})$  (de température  $T < T_1$ ) peut être sous-évalué en négligeant l'énergie incidente du point chaud (cf. Fig. 2.11). Cet effet est d'autant plus important si la configuration est très allongée. Cet effet conduit à sous-estimer le terme de rayonnement incident et donc potentiellement surestimer le terme source. L'effet de rayon est une limite bien connue de la méthode des DOM. Aussi il est important de s'assurer de la convergence de la quadrature angulaire en utilisant une quadrature angulaire d'ordre plus important (typiquement une solution avec une quadrature  $LC_{11}$  sert à valider une solution  $S_4$ ).

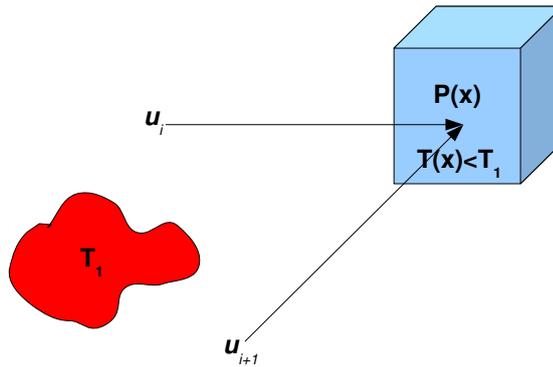


FIG. 2.11 – Effet de rayon sur le rayonnement incident  $G_v(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u}) d\Omega \simeq \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k)$ .

L'effet de diffusion numérique (ou « false scattering ») est un phénomène dû à l'erreur du schéma de dérivation spatiale et qui apparaît plus particulièrement quand les directions de propagation sont obliques par rapport aux lignes d'orientation du maillage. Le schéma utilisé (DMFS) ne tient pas compte de l'absorption à l'intérieur d'une maille (*i.e.* les mailles sont optiquement fines). Cet effet est potentiellement réduit avec le schéma exponentiel qui tient compte de l'absorption à l'intérieur d'une maille mais qui est beaucoup plus lent. Pour les applications visées en combustion turbulente, la taille des mailles est déterminée par la taille des tourbillons induits par la turbulence. Dans ce cas les mailles sont optiquement fines et l'effet de fausse diffusion limité.

Il ne faut pas perdre de vue qu'il faut disposer d'outils de validation. Les développements effectués utilisent la méthode de Monte Carlo comme référence. Jusqu'à présent des calculs de type sonde ont été effectués à des points choisis par l'utilisa-

teur. La généralisation aux champs complets fait parti des préoccupations actuelles, elles rentrent dans la cadre du projet STRASS financé par la FRAE<sup>16</sup>.

---

<sup>16</sup>Fondation de Recherche pour l'Aéronautique et l'Espace, projet démarrant à l'automne 2009 entre CERFACS, RAPSODEE, CORIA, EM2C, Airbus, Turbomeca



# ÉTUDE DU MODÈLE GLOBAL FS-SNBcK POUR DES APPLICATIONS EN COMBUSTION

L'utilisation du modèle spectral SNBcK conjointement avec la méthode aux ordonnées discrètes permet d'écrire une version discrétisée de l'ETR sur les directions, les bandes étroites et les points de quadrature (cf. chapitre 2) :

$$S_r(\mathbf{x}) \simeq \sum_{i=1}^{N_{band}} \Delta v_i \left[ \sum_{j=1}^{N_{quad}} \omega_j \kappa_{ij} \left( 4\pi \overline{L_{\Delta v_i}^0(\mathbf{x})} - \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_{i,j}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k) \right) \right] \quad (3.1)$$

La base de données SNB utilisée comporte 371 bandes étroites avec un nombre de points de quadrature usuel  $N_q = 5$ . Aussi pour une quadrature angulaire de type  $S_4$  (24 directions), l'ETR doit être résolue :  $371 \times 5 \times 24 = 44520$  fois en chaque point du maillage.

Dans le cadre d'un couplage instationnaire entre la combustion turbulente et le rayonnement, le rayonnement doit être mis à jour toutes les  $N_{it}$  pas de temps (défini par une fréquence de couplage). Pour que le couplage soit réalisable il faut que le temps de calcul d'une solution radiative soit du même ordre que le temps de calcul  $N_{it}$  itérations de combustion turbulente. Malgré l'efficacité des DOM, le nombre de résolutions nécessaires de l'ETR augmente significativement le temps de calcul par rapport à celui de la combustion. Il sera montré (voir le chapitre 8) que le coût en temps de calcul pour le rayonnement est de deux ordres de grandeur plus important que celui de la combustion.

Une des solutions consiste à travailler sur le modèle spectral, pour réduire le nombre de résolutions de l'ETR, tout en conservant une précision acceptable. Pour cela il existe des modèles à bandes larges ou des modèles globaux. Plusieurs approches sont possibles pour la construction d'un modèle global. La plus simple est le modèle global WSGG qui est assez simple à mettre en place mais sa précision est insuffisante car elle repose sur des approximations fortes (rapport de concentration fixes, tabulé pour un carburant donné, ...). A l'opposé, les modèles globaux de type ADF, SLW, FSK,  $k$ -moments, *etc* reposent sur la construction de bases à partir de données raie par raie.

L'approche utilisée a été proposée par Liu *et al.* [37, 48], elle consiste à construire un modèle global à partir des données SNB utilisées pour le modèle SNBcK. La première

étape [37] consiste à regrouper les contributions de différentes bandes étroites en allant au-delà de l'approximation des bandes étroites (luminance de Planck constante dans la bande). Cette approche s'apparente aux modèles à bandes larges mais le regroupement est limité à une dizaine de bandes pour conserver une précision acceptable. Dans un deuxième temps Liu *et al.* [48] étendent le regroupement des bandes à l'ensemble du spectre en appliquant une pondération par la fonction de Planck lors du regroupement. C'est le modèle FS-SNBcK pour « Full Spectrum based on the SNBcK ».

Ce modèle proposé par Liu *et al.* est étudié ici pour des applications de combustion. Dans ce chapitre, la formulation mathématique du modèle est d'abord détaillée pour montrer que le modèle reste mathématiquement exact. Ensuite les limites de validité du modèle sont étudiées dans le cadre des applications visées en combustion. Théoriquement il est possible d'attendre une réduction du temps de calcul importante, de l'ordre du nombre de bandes. Les temps de restitution de chaque modèle sont donc discutés.

Ce travail a fait l'objet d'une publication au congrès Eurotherm 83 – Computational Thermal Radiation in Participating Media III [77] et le texte original est proposé dans son intégralité dans le paragraphe suivant. Une discussion plus approfondie est ensuite proposée.

### 3.1 ÉTUDE DE VALIDITÉ DU MODÈLE GLOBAL BASÉ SUR LES PROPRIÉTÉS SPECTRALES DES BANDES ÉTROITES DANS L'APPROXIMATION DES $\kappa$ CORRÉLÉS POUR DES APPLICATIONS EN COMBUSTION

*Proceedings of Eurotherm83 — Computational Thermal Radiation in Participating Media III  
15–17 April 2009, Lisbon, Portugal*

## Validity limits for the global model FS-SNBcK for combustion applications

by POITOU Damien<sup>(\*)</sup>, AMAYA Jorge<sup>(\*\*)</sup>, BHUSHAN SINGH Chandra,  
JOSEPH David<sup>(\*\*\*)</sup>, EL HAFI Mouna<sup>(\*)</sup>, CUENOT Benedicte<sup>(\*\*)</sup>

*(\*) Centre RAPSODEE - Ecole des Mines d'Albi - Campus Jarlard - 81013 ALBI - France .*

*(\*\*) CERFACS - 42, Avenue Gaspard Coriolis - 31057 Toulouse Cedex 01 - France.*

*(\*\*\*) HPC-SA - 3, chemin du pigeonnier de la cépière, Bâtiment C - 31100 Toulouse France.*

*Corresponding author POITOU Damien: poitou@enstimac.fr*

### Abstract

In this work the Full Spectrum based on the Statistical Narrow Band with the correlated k approximation (FS-SNBcK) is presented. The idea behind the model is to group the narrow bands using the Malkmus model, in order to build a Full Spectrum representation of the space of frequencies. All narrow bands are grouped and weighted by the Planck function to take into account the variation of the blackbody intensity over the whole spectrum. In this paper, validity limits of the model are studied, using a one dimensional isothermal homogeneous gas layer. The influence of species concentration, layer thickness and temperature are tested. An detailed mathematical formulation of the model is presented. Finally, 3D simulations were performed to check the efficiency of the model against other spectral methods.

### 1. Introduction

Only recently Large Eddy Simulations (LES) have been coupled with detailed radiation [15, 5]: CPU time is still a main issue for non-stationary flames. To solve the Radiative Transfer Equation (RTE) on combustion application the Discrete Ordinates Method is chosen, because it offers the best compromise between CPU time and accuracy [7, 8] and could be used to calculate complex geometries. This method relies on the  $4\pi$  solid angle discretization using angular quadrature sets (directions and weights).

For spectral properties, a k-formulation (where k is the absorption coefficient) is required to be compatible with the differential form of the RTE. An exact description of spectral properties needs a line by line (LBL) model, but these models have the disadvantage of having a high computational cost.

The SNBcK model uses a narrow band approach and offers a good quality radiation/LES simulations. But this model can not be afforded in coupled situations because it is still too expensive. This model solves the RTE at least 5 times (5 quadrature points) per band. Typically 367 narrow bands are used. These represents a total of  $5 \times 367 = 1835$  resolutions of the RTE performed for one given direction.

A good alternative to this SNBcK is the use of a global model such as the well known Weighted Sum of Gray Gases (WSGG)[6]. It is fast but no accurate enough when the studied situation is far from the one used to fit it. Various authors have already proposed the use of these global models. Denison and Webb [2, 3] developed the spectral-line-based

weighted-sum-of-gray-gases (SLW) model, in which line-by-line databases are used to obtain weight factors for the WSGG model. The Absorption Distribution Function have some similarities with the SLW and was developed by Riviere et al. [14, 13]. Modest and Zhang wrote a mathematical formulation that allows to write the k-distribution for the whole spectrum [12].

Another approach in the frame of the SNB models, was proposed by Liu et al.[9], they proposed a method which provides a good accuracy by reducing the number of resolutions of the RTE. By using a band lumping strategy, authors have shown that a maximum of 10 narrow bands could be grouped without losing accuracy. The SNBcK model is based on the narrow band approximation, in which the Planck function is considered constant on a narrow band. The band lumping strategy is limited by this approximation. In a publication Liu et al. [11] proposed to group all bands to build the full spectrum statistical narrow band ck based (FS-SNBcK). In this model all bands are grouped and weighted using the Planck function to take into account the variation of the blackbody function over the whole spectrum.

The aim of the present work is to present a detailed mathematical formulation then to study the limits of validity of this model. To the authors knowledge, it is the first time that the mathematical formulation of the probability density function and the cumulative are used to describe the FS-SNBcK model.

## 2. Formulation and definition of the FS-SNBcK model

### 2.1. Integration over the spectrum

Lets define  $F$ , a function of the absorption coefficient  $\kappa_\nu$  and the integral  $I$  over a narrow band  $\Delta\nu$  as:

$$\overline{I_{\Delta\nu}} = \int_{\Delta\nu} L_{b,\nu} F(\kappa_\nu) d\nu \quad (1)$$

Where  $L_{b,\nu}$  is the Planck function depending on the temperature and the frequency. If the interval  $\Delta\nu$  is not too large the Planck function can be considered constant over the narrow band and equal to  $\overline{L_{b,\Delta\nu}}$ :

$$\overline{I_{\Delta\nu}} \approx \overline{L_{b,\Delta\nu}} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \overline{L_{b,\Delta\nu}} \Delta\nu \overline{F_{\Delta\nu}} \quad (2)$$

In order to avoid a line-by-line description of the spectrum, Domoto [4] has introduced the function  $f$ , which is the probability density function of  $\kappa$  aside the frequencies, representing the k-distribution in the narrow band:

$$\overline{F_{\Delta\nu}} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} F(\kappa_\nu) d\nu = \int_0^\infty F(\kappa) f(\kappa) d\kappa \quad (3)$$

The mean value of  $F$  can be obtained by a discrete integration over all narrow bands:

$$I_{tot} = \sum_{i=1}^{N_B} \overline{I_{\Delta\nu_i}} \Delta\nu_i = \sum_{i=1}^{N_B} \Delta\nu_i \overline{L_{b,\Delta\nu_i}} \int_0^\infty F(\kappa) f_i(\kappa) d\kappa \quad (4)$$

where subscript  $i$  denotes the band number,  $N_B$  the total number of bands and  $f_i(\kappa)$  is the PDF on the  $i^{th}$  band. Variables  $\nu_i$  and  $\kappa$  are independent so the discrete integration on  $i$  and the integration on  $\nu$  can be switched, leading to:

$$I_{tot} = \int_0^\infty \left( \sum_{i=1}^{N_B} \Delta\nu_i \overline{L_{b,\Delta\nu_i}} F(\kappa) f_i(\kappa) \right) d\kappa \quad (5)$$

This expression may be rewritten as the *expectancy* of the function  $F(\kappa)$ , if the corresponding probability density function is correctly defined. By definition the PDF must be normalized such as:

$$\int_0^\infty \sum_{i=1}^{N_B} \Delta\nu_i \overline{L_{b,\Delta\nu_i}} f_i(\kappa) d\kappa = \sum_{i=1}^{N_B} \Delta\nu_i \overline{L_{b,\Delta\nu_i}} \times \underbrace{\int_0^\infty f_i(\kappa) d\kappa}_{= 1, \text{ by definition}} = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (6)$$

So the integration over the spectrum may be rewritten as:

$$I_{tot} = \frac{\sigma T^4}{\pi} \int_0^\infty \underbrace{\sum_{i=1}^{N_B} \frac{\Delta\nu_i \overline{L_{b,\Delta\nu_i}} f_i(\kappa)}{\sigma T^4 / \pi}}_{f_{FS}(\kappa)} F(\kappa) d\kappa \quad (7)$$

Where  $f_{FS}$  represents the *full spectrum normalized probability density function*.

## 2.2. Introduction of the ck approximation in the FS-SNBcK model

The Malkmus model allows to get an analytical expression for the mean transmissivity  $\overline{T}_{\Delta\nu}$  with some properties of the spectrum according to specific assumptions.

$$\overline{T}_{\Delta\nu}(l) = \exp \left[ \Phi_{\Delta\nu} \left( 1 - \left( 1 + \frac{2\overline{\kappa}l}{\Phi_{\Delta\nu}} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (8)$$

where  $\overline{\kappa}$  is the average value of the absorption coefficient over the narrow band, and  $\Phi_{\Delta\nu}$  is the shape parameter. Data for  $(\overline{\kappa}, \Phi_{\Delta\nu})$  were taken from the SNB parameters database of Taine and Soufiani [17], for temperatures between 300K and 2900K and for 367 bands of width  $\Delta\nu = 25 \text{ cm}^{-1}$ .

Using eq.(3), the mean transmissivity over a narrow band is given by:

$$\overline{T}_{\Delta\nu}(l) = \int_0^\infty \exp(-\kappa l) f(\kappa) d\kappa \quad (9)$$

Domoto [4] has shown that  $f(\kappa)$  is the inverse Laplace transform of the mean transmissivity, given by the Malkmus model. The function  $f(\kappa)$  is not monotonous and it is more convenient to introduce the cumulative function  $g_i(\kappa)$ , over the  $i^{th}$  narrow band:

$$g_i(\kappa) = \int_0^\kappa f_i(\kappa') d\kappa' \quad (10)$$

$g(\kappa)$  is a monotonously increasing function in the interval  $[0; 1]$  which allows to inverse it to get the function  $\kappa(g)$ . The inverse function  $\kappa(g)$  can thus be defined. If the shape of the spectrum is not modified by the pressure and the temperature along an optical path, the ck-approximation is achieved. Using the Malkmus model for the transmissivity Domoto has shown that the function  $f(\kappa)$  is an Inverse Gaussian distribution,  $g(\kappa)$  uses erfc functions [4]. This function is inverted numerically.

Using the cumulative function  $g(\kappa)$ , eq.(3) could be written as:

$$\overline{F}_{\Delta\nu} = \int_0^1 F(\kappa(g)) dg \quad (11)$$

The *full spectrum cumulative function*  $g_{FS}(\kappa)$  is defined as:

$$\begin{aligned} g_{FS}(\kappa) &= \int_0^\kappa f_{FS}(\kappa') d\kappa' = \int_0^\kappa \sum_{i=1}^{N_B} \frac{\Delta\nu_i \overline{L_{b, \Delta\nu_i}} f_i(\kappa')}{\sigma T^4 / \pi} d\kappa' \\ &= \sum_{i=1}^{N_B} \frac{\Delta\nu_i \overline{L_{b, \Delta\nu_i}}}{\sigma T^4 / \pi} \underbrace{\int_0^\kappa f_i(\kappa') d\kappa'}_{g_i(\kappa)} \end{aligned} \quad (12)$$

From eq.(12) it can be noticed that  $g_{FS}$  is monotonically increasing with  $\kappa$ , like each function  $g_i(\kappa)$  does, and can also be inverted numerically to obtain  $\kappa(g_{FS})$ , eq.(6) then becomes:

$$I_{tot} = \frac{\sigma T^4}{\pi} \int_0^1 F(\kappa(g_{FS})) dg_{FS} \quad (13)$$

As the cumulative function is monotonically increasing, the numerical resolution of the integration could be achieved either with a statistical method or using a Gauss quadrature. If a quadrature is used over  $N_q$  points, eq.(13) can be written:

$$I_{tot} \approx \frac{\sigma T^4}{\pi} \sum_{j=1}^{N_q} w_j F(\kappa(g_{FS,j})) \quad (14)$$

It is only at this last step that the calculation of  $I_{tot}$  (over the entire spectrum) is approximated numerically, using a pseudo-spectral quadrature.

### 2.3. Radiative properties of the mixture Modeling

To take into account multicomponent mixtures several models are proposed by Liu [10]. The model based on the optically thin limit provide  $\langle \kappa_{mix} \rangle$  and  $\Phi_{\Delta\nu, mix}$  for a mixture of  $N_g$  species, of parameters  $\bar{\kappa}_n$  and  $\Phi_{\Delta\nu, n}$ :

$$\langle \kappa_{mix} \rangle_{\Delta\nu} = \sum_{n=1}^{N_g} \bar{\kappa}_n \quad \text{and} \quad \frac{\langle \kappa_{mix} \rangle_{\Delta\nu}^2}{\Phi_{\Delta\nu, mix}} = \sum_{n=1}^{N_{gas}} \frac{\bar{\kappa}_n^2}{\Phi_{\Delta\nu, n}} \quad (15)$$

where  $\bar{\kappa}_n$  is the average value of the absorption coefficient over the narrow band, and  $\Phi_{\Delta\nu, n}$  is the shape parameter for the  $n^{th}$  gas. The main advantage of this model is to insure a good compromise between accuracy and CPU time.

### 3. Absorption of a one dimensional gas layer

To separate spectral aspects from geometrical aspects and test the FS-SNBcK model, the absorption of a one dimensional isothermal homogeneous gas layer is considered. Gases containing one or more of the following species were studied:  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ . The FS-SNBcK model is compared to the Malkmus model, which represents the reference model for the one dimensional study.

In this configuration the mean intensity of the narrow band absorbed by the gas layer is:

$$\bar{I}_{\Delta\nu}(l) = \int_{\Delta\nu} \exp(-\kappa_\nu l) L_{b, \nu} d\nu \quad (16)$$

The total intensity absorbed by the spectrum in the FS-SNBcK is given using eq.(13) with  $F(\kappa_\nu) = T(l) = \exp(-\kappa_\nu l)$  and calculated using a Gauss Legendre quadrature according to eq.(14).

#### 3.1. Influence of the mixture composition

The absorption is calculated on an homogeneous and isothermal gas layer containing only one species at different temperatures, with gas column length of  $l = 1m$ . *Figure 1* shows that in the case of pure  $H_2O$ , the FS-SNBcK calculation with  $N_q = 5$  gives an error of about 10%. Nevertheless, when the number of quadrature is augmented to  $N_q = 10$  a very good agreement with the Malkmus model is obtained. In the pure  $CO$  case, the error with  $N_q = 5$  reaches a value of nearly 100%. For both pure  $CO_2$  and  $CO$  cases, a higher  $N_q$  is needed to fit with the Malkmus case, typically  $N_q = 30$ .

*Figure 2* shows the cumulative functions,  $g_{FS}$  for different gases. As  $CO_2$  and  $CO$  do not emit in all bands contrary to  $H_2O$  (96 bands for  $CO_2$ , 48 bands for  $CO$ ) some values of  $\kappa$  are close to zero and the cumulative function is non zero only in a small part of the interval [0;1]. More quadrature points are needed to resolve the spectrum. It is also noticed that for high temperatures the gradient of the cumulative function is higher.

Theoretically by increasing  $N_q$  to infinity, the  $\kappa(g)$  should always be well resolved.

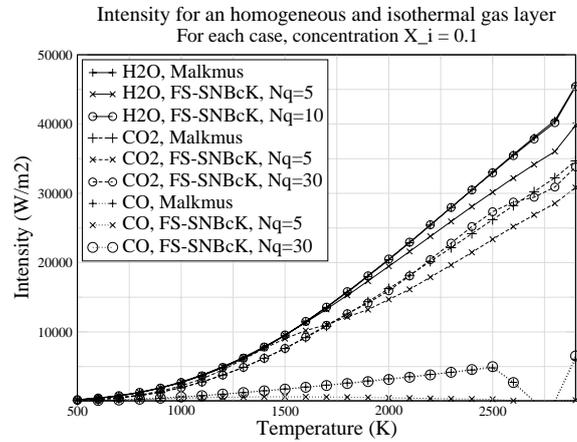


Fig. 1 — Influence of  $N_q$  for a single species at different temperatures

However if the gradient of the function is too strong, the numerical inversion of  $g(\kappa)$  fails. An example with a high temperature and 20% molar fraction of  $CO$  gives an error of 30% even with  $N_q = 30$ . For cases containing high concentrations of  $CO$  this model must be used with care, in particular if the temperature is high.

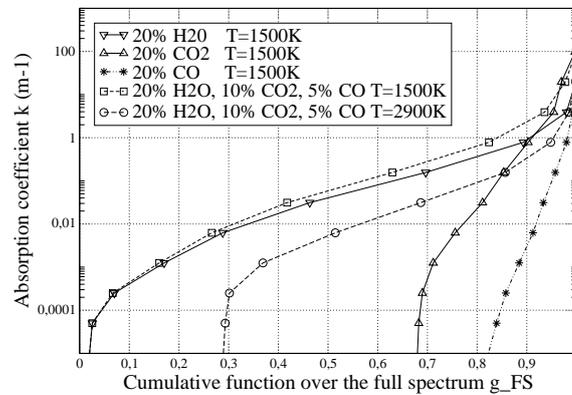


Fig. 2 — Cumulative function for different gas mixtures at 1500 and 2900K

### 3.2. Influence of the gas optical thickness

In a second step the influence of the gas optical thickness is investigated. In this case the gas layer is composed of 20%  $H_2O$ , 10%  $CO_2$ , 5%  $CO$  molar fraction. The absorption of the gas layer is calculated at several temperatures for three thicknesses:  $l = 0.1m$ ,  $l = 1m$  and  $l = 10m$  an plotted in figure 3.

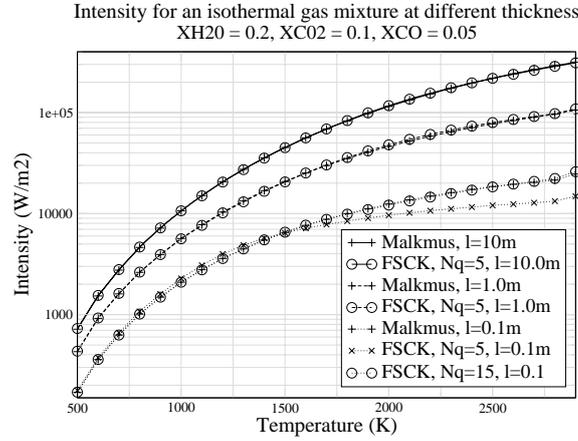


Fig. 3 — Influence of the gas thickness for a mixture of gases at different temperatures

Figure 3 shows that a high number of quadrature points are needed to fit with the reference when the gas layer is thin. To explain this behavior, the relative error on the transmissivity,  $T(l) = \exp(-\kappa l)$ , is analyzed:

$$\frac{\Delta T}{T} \sim \frac{\exp(-\kappa l) \kappa l}{1 - \exp(-\kappa l)} \frac{\Delta \kappa}{\kappa} \quad (17)$$

In this expression when  $l$  increases, the relative error tends to zero. For the optically thin limit when  $l$  tends to 0,  $\frac{\Delta T}{T} \approx \frac{\Delta \kappa}{\kappa}$ , and the calculation of the absorption is more sensitive to the error on  $\kappa$ . For the thick case even if the relative error is smaller, the model will be limited by the mixture modeling (cf. section 2.3.) and the ck-approximation.

#### 4. 3D Calculations

To validate geometry influence of the FS-SNBcK model, 3D calculations are performed using a DOM code (*DOMASIUM*<sup>1</sup>). Two benchmark cases are tested [1] using an S4 angular quadrature: a homogeneous cylinder and an an-isothermal and non-homogeneous cylinder.

These two radiative heat transfer problems are in two-dimensional axisymmetric enclosures with black walls. Atmospheric pressure is considered in all cases. In both tests calculations are compared to available reference solutions (a ray-tracing solution or a Monte-Carlo Method all together with k-distribution). Tests include comparisons with the SNBcK model (reference solution) and the WSGG model (faster model). The WSGG model parameters are given in [16].

The first case is a cylindrical enclosure of length  $L = 3.0m$ , a radius  $R = 0.5m$  and was resolved using a mesh with 19343 tetrahedron cells. The temperature of the walls is  $300K$ . Species molar fractions of the gas are 20%  $H_2O$ , 10%  $CO_2$  and 70%  $N_2$ . There

<sup>1</sup><http://www.cerfacs.fr/domasium>

is no soot and the temperature of the medium is  $1800K$ .

The second case is a cylinder of length  $L = 1.2m$ , a radius  $R = 0.3m$  and was resolved using a mesh with 27749 tetrahedron cells. The walls are black at  $800K$ , except the right wall ( $x = L$ ), which is maintained at  $300K$ . The temperature and the molar fractions of  $H_2O$  and  $CO_2$  are given by analytical profiles:

$$\begin{aligned} T(x, r) &= 800 + 1200 * (1 - r/R)(x/L) \\ X_{H_2O} &= 0.05 [1 - 2(x/L - 0.5)^2] (2 - r/R) \\ X_{CO_2} &= 0.04 [1 - 3(x/L - 0.5)^2] (2.5 - r/R) \end{aligned} \quad (18)$$

The soot volumetric fraction is  $f_v = X_{SOOT} = 10^{-7}$ . Spectral absorption coefficient for soot is calculated as  $\kappa_{\nu,soot} = 5.5f_v\nu$ .

Figure 4 and figure 5 show that the calculation of the radiative source term  $S_r$ , using the FS-SNBcK, gives results in very good agreement with the SNBcK model. For the two test cases only five quadrature points are needed to obtain a good accuracy. It is also shown that this model is clearly more accurate than the WSGG model due to the fact that the global data of the mixture is modeled from the SNB database. It is noticed that for case 2 the WSGG model gives better results than in case 1 because the presence of soot yield the medium more gray.

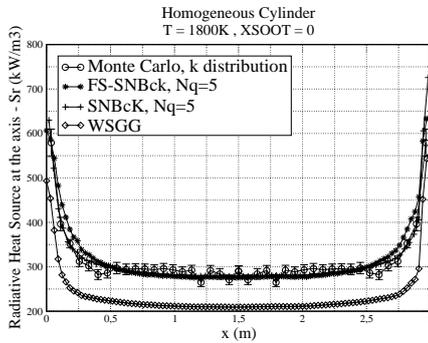


Fig. 4 — Case 1: radiative source term  $S_r$  along the central axis for the homogeneous cylinder. The reference solution is a Monte-Carlo solution [1]

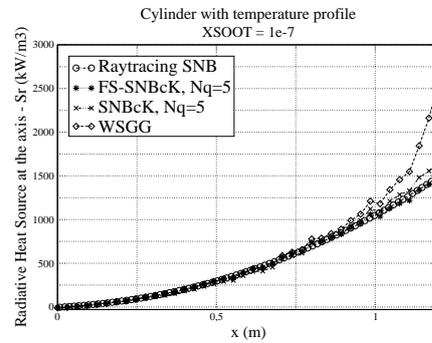


Fig. 5 — Case 2: radiative source term along the cylinder axis for the different spectral models. The reference solution is a ray-tracing solution [1]

## 5. Calculation time cost

Table 1 shows that in the one dimensional calculation, where the time calculation is devoted mostly to the spectral calculation, the FS-SNBcK is not faster than the SNBcK model: the same number of calculations are performed in the two models. To calculate  $g_{FS}(\kappa)$  in eq.(12) a loop over all bands is done. Then eq.(14) requires an iterative time

Tab. 1 — Time calculation for the FS-SNBcK in 1D and 3D calculation

|          | Test 1D<br>$N_q=5$ | Test 1D<br>$N_q = 10$ | Test 1D<br>$N_q = 20$ | Test 3D<br>Case 1 | Test 3D<br>Case 2 |
|----------|--------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------|-------------------|
| SNBcK    | 9.0 ms             | 17.2 ms               | 37.2 ms               | 40 m36.2 s        | 67 m49.5 s        |
| FS-SNBcK | 24.7 ms            | 46.0 ms               | 100.0 ms              | 0 m8.1 s          | 8 m51.6 s         |
| WSGG     | –                  | –                     | –                     | 0 m6.6 s          | 0 m10.2 s         |

consuming process to inverse numerically  $g_{FS}(\kappa)$ . The inversion is longer to achieve for FS-SNBcK because the gradient of function  $g_{FS}(\kappa)$  is higher (less than 10 iterations for SNBcK, between 20 to 30 iterations for FS-SNBcK).

The advantage of a global model as FS-SNBcK for 3D calculations is clearly demonstrated by the time efficiency on *table 1*. The number of resolutions of the RTE is strongly reduced. In case 1, homogeneous case, only one absorption coefficient is calculated over the domain. The time calculation of FS-SNBcK is about 300 time shorter than the SNBcK, very close to the number of narrow bands (367). For case 2, non-homogeneous case, the calculation time is reduced by one order of magnitude compared to SNBcK case. In this case spectral calculations account for 97% of the total calculation with the FS-SNBcK model. This shows that most of the effort should be made in the improvement of the spectral calculation for this model.

## 6. Conclusions

The full spectrum based on the statistical narrow bands model with the ck-approximation was studied in order to validate its implementation on combustion applications. An detailed mathematical formulation of the model has been proposed. Then the limits of validity of the model were investigated in the case of a one dimensional gray layer.

It was shown that the model fits well with the Malkmus model if enough quadrature points are used. For gases with a high concentration of  $CO$ , which does not emit in all bands, the calculation differs from the reference value at high temperature. In the optically thin case, more quadrature points are needed to calculate accurately the absorption.

In 3D calculations the model gives very good results even with only five quadrature points. The calculation times are substantially reduced because the number of resolutions of the RTE is reduced from 1835 to 5.

The next objective is to improve the time calculation using a tabulation technique for the spectral properties of the FS-SNBcK model. This will allow to reduce the calculation time dedicated to spectral calculation and will permit to reach a calculation time comparable with those obtained with the WSGG model.

## Acknowledgement

This project has been carried out in the frame of ANR CORAYL which is a project between Ecole des Mines d'Albi (EMAC), CERFACS, EM2C.

## REFERENCES

- [1] COELHO, P., PEREZ, P., AND HAFI, M. E. Benchmark numerical solutions for radiative heat transfer in two-dimensional axisymmetric enclosure with nongray sooting media. *Numerical Heat Transfer Part B*, 43 (2003), 425–444.
- [2] DENISON, M., AND WEBB, B. A spectral line based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary rte solvers. *ASME J Heat Transfer*, 115 (1993), 1004–1012.
- [3] DENISON, M., AND WEBB, B. The spectral-line-based weighted-sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media. *ASME J Heat Transfer*, 117 (1995), 359–365.
- [4] DOMOTO, G. Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : the inverse transmission function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 14 (1974), 935–942.
- [5] DOS SANTOS, R. G. *Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion Including Radiative Heat Transfer*. PhD thesis, EM2C, 2007.
- [6] HOTTEL, H., AND SAROFIM, A. *Radiative Transfer*. McGraw-Hill, New York, 1976.
- [7] JOSEPH, D. *Modelisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004.
- [8] JOSEPH, D., PEREZ, P., HAFI, M. E., AND CUENOT, B. Discrete ordinates and monte carlo methods for radiative transfer simulation applied to cfd combustion modeling. *ASME Journal of Heat Transfer*, 131 (2009), In Proof.
- [9] LIU, F., SMALLWOOD, G., AND GÜLDER, O. Band lumping strategy for radiation heat transfer calculations using a narrowband model. *Journal of thermophysics and heat transfer* 14, 2 (2000), 278 – 281.
- [10] LIU, F., SMALLWOOD, G., AND GÜLDER, O. Application of the statistical narrow-band correlated-k method to no grey gas radiation in  $CO_2 - H_2O$  mixtures ; approximate treatment of overlapping bands. *J Quant Spectrosc Radiative Transfer* 68 (2001), 401–417.
- [11] LIU, F., YANG, M., SMALLWOOD, G., AND ZHANG, H. Evaluation of the snb based full-spectrum ck method for thermal radiation calculations in  $CO_2 - H_2O$  mixtures. In *Proceedings of ICHMT 2004* (2004).
- [12] MODEST, M., AND H.ZHANG. The full-spectrum correlated-k distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures. *Journal of Heat Transfer* 124, 1 (2002), 30–38.
- [13] PIERROT, L., RIVIÈRE, P., SOUFIANI, A., AND TAINE, J. A fictitious-gas-based absorption distribution function global model for radiative transfer in hot gases. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62, 5 (1999), 609 – 624.
- [14] RIVIÈRE, P., SOUFIANI, A., PERRIN, M. Y., RIAD, H., AND GLEIZES, A. Air mixture radiative property modelling in the temperature range 10,000-40,000 k. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 56, 1 (1996), 29 – 45.
- [15] SANTOS, R. G. D., LECANU, M., DUCRUIX, S., GICQUEL, O., IACONA, E., AND VEYNANTE, D. Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combustion and Flame*, 152 (2008), 387–400.
- [16] SOUFIANI, A., AND DJAVDAN, E. A comparison between weighted sum of gray gases and statistical narrow-band radiation models for combustion applications. *Combustion and Flame* 97, 2 (1994), 240 – 250.
- [17] SOUFIANI, A., AND TAINE, J. High temperature gas radiative propriety parameters of statistical narrow-band model for  $H_2O$ ,  $CO_2$  and  $CO$  and correlated-k model for  $H_2O$  and  $CO_2$ . *Technical note in International Journal of Heat and mass transfer* 40 (1997), 987–991.

## 3.2 DISCUSSIONS

Dans l'article il a été montré que le modèle FS-SNBcK donnait des résultats en très bon accord avec le modèle SNBcK. C'est un modèle global en somme pondérée de gaz gris dont les coefficients sont recalculés en fonctions des propriétés locale (température, fractions molaires, pression) à partir des données SNB.

Les calculs de l'absorption d'une couche de gaz mono-dimensionnelle ont permis de rechercher les limites de validité du modèle. Il a été montré que dans des cas représentatifs de situations de combustion, la précision demeure très bonne si le nombre de points de quadrature est suffisant. En effet dans des cas optiquement fins ou si la concentration de CO<sub>2</sub> ou CO est importante, le nombre de points de quadrature doit être augmenté, plus spécialement à haute température. Dans ces cas, la fonction  $g_{FS}(\kappa)$  (sur tout le spectre) est non nulle sur une petite partie de l'intervalle  $[0; 1]$  et plus de points sont nécessaires pour capturer le comportement de  $g_{FS}(\kappa)$ .

La dichotomie, servant à inverser numériquement  $g_{FS}(\kappa)$  pour obtenir les coefficients d'absorption, dans un cas extrême peut ne pas converger correctement : si la concentration de CO est importante ( $> 20\%$ ) et la température élevée ( $> 2000$  K). Cependant ce cas n'est pas représentatif pour les applications visées.

Les temps de calculs ont été détaillés, voir Fig. 3.1 et 3.2. Le modèle WSGG a été utilisé comme référence du temps de calcul le plus court possible. Dans chaque cas les temps de calcul ont été décomposés en temps de calcul des coefficients d'absorption (temps spectral) et en temps d'intégration de l'ETR (temps géométrique).

Dans le cas 1 (voir Fig. 3.1), faisant référence au cas du cylindre homogène de l'article, le temps de calcul total du modèle FS-SNBcK est très proche du modèle WSGG. Le WSGG n'utilisant que 3 gaz gris et le FS-SNBcK 5 points de quadrature, le calcul en WSGG est de l'ordre de 5/3 plus long que le FS-SNBcK. Dans ce cas homogène, un seul coefficient d'absorption est calculé sur le domaine, ce qui est négligeable en temps de calcul. Le temps de calcul total est donc entièrement dû à l'intégration de l'ETR. Le gain avec le FS-SNBcK dans ce cas est de l'ordre de 300, proche du nombre de bandes.

Dans le cas 2 (voir Fig. 3.2), faisant référence au cylindre inhomogène de l'article, tous les coefficients d'absorption sont calculés sur le maillage (27749 cellules) à partir des propriétés locales. Avec le modèle SNBcK le temps de calcul total est principalement dû à l'intégration de l'ETR, le temps de calcul des coefficients d'absorption étant inférieur d'au moins un ordre de grandeur. Avec le modèle FS-SNBcK le temps d'intégration de l'ETR est réduit d'un facteur proche du nombre de bandes comme dans le cas inhomogène. Le temps de calcul des coefficients d'absorption devient alors majoritaire. Avec le modèle global le temps de calcul des  $\kappa$  est plus important qu'avec le modèle SNBcK. En effet l'inversion par dichotomie de  $g(\kappa)$  est plus longue à converger quand tout le spectre est considéré que pour une seule bande. L'inversion se faisant en moins de 10 itérations sur les bandes étroites et peut prendre 30 itérations sur tout le spectre. Ceci est dû au fait que le gradient dans la fonction  $g_{FS}(\kappa)$  est plus important et donc la convergence de la dichotomie plus lente. Dans le cas inhomogène le temps de calcul total en FS-SNBcK est inférieur d'un ordre de grandeur au calcul SNBcK.

Le gain en temps de calcul d'un ordre de grandeur est plus faible que celui escompté. Cependant il faut noter que le modèle FS-SNBcK permet de déplacer la difficulté du temps de calcul sur le calcul des propriétés d'absorption du milieu et non sur

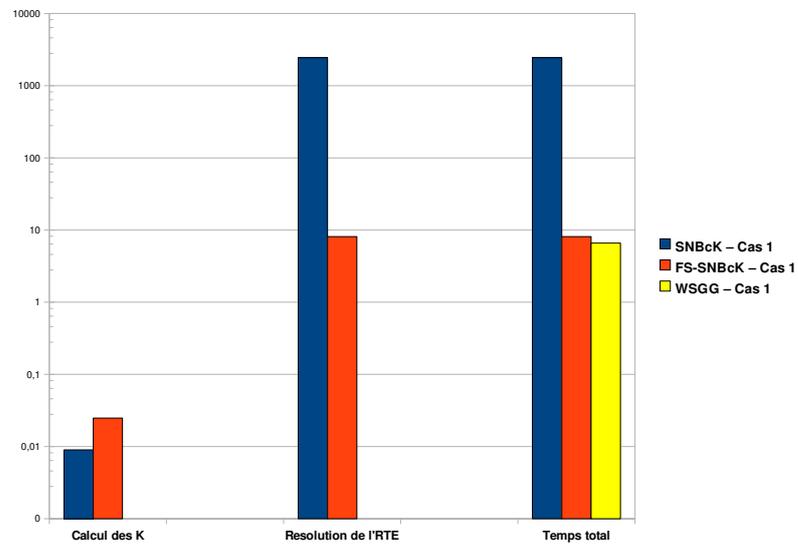


FIG. 3.1 – Comparaison des temps de calcul (échelle log) entre le modèle WSGG, FS-SNBcK et SNBcK dans une configuration homogène.

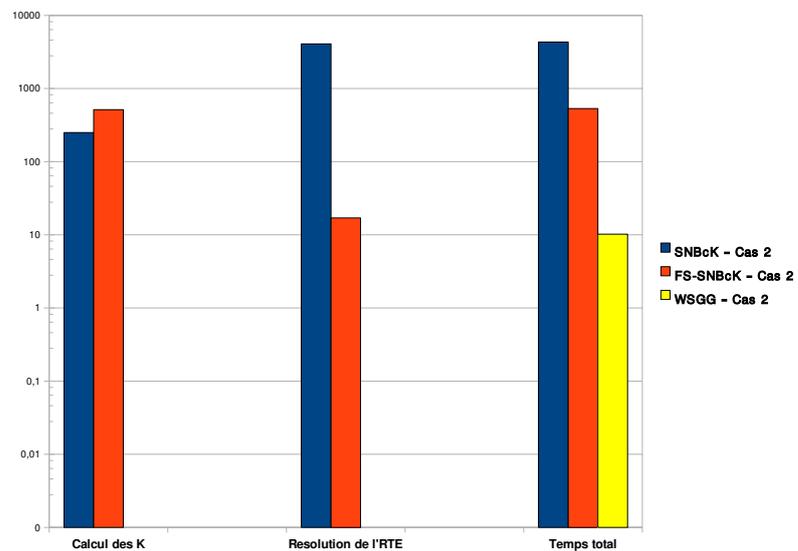


FIG. 3.2 – Comparaison des temps de calcul (échelle log) entre le modèle WSGG, FS-SNBcK et SNBcK dans une configuration inhomogène.

la résolution de l'ETR. La réduction du nombre de résolutions de l'ETR permet d'augmenter le nombre de directions de la quadrature angulaire sans augmenter le temps total de façon importante. Il en va de même pour la prise en compte de la réflexion, qui est faite en faisant converger la luminance des cellules en itérant l'intégration de l'ETR. Les solutions obtenues avec ce modèle sont en très bon accord la solution de référence SNBcK.

Enfin comme le calcul des propriétés d'absorption du milieu n'est dépendant que des propriétés locales du milieu il est possible de résoudre cette partie indépendamment de la résolution du transfert radiatif. Si ce modèle est utilisé en s'affranchissant du calcul des  $\kappa$  le temps de calcul total est alors du même ordre que celui du WSGG. Les coefficients d'absorption peuvent être calculés dans un pré-processing ou stockés dans une table. La solution de la tabulation a été retenue.

Les détails concernant la tabulation sont donnés en annexe A. La version tabulée du modèle FS-SNBcK a été validée sur le cas du cylindre inhomogène. Les résultats de la Fig. 3.3 montrent un gain important de précision, par rapport au modèle WSGG (voir Fig. 5 de l'article). Le gain en temps de calcul par rapport à la version non tabulée du modèle FS-SNBcK est significatif (Fig. 3.4). Le temps de calcul total est très proche de temps de calcul du modèle WSGG, de l'ordre de  $\frac{N_q}{3} T(\text{WSGG})$ . Enfin le gain en temps de calcul total par rapport au modèle SNBcK est de l'ordre du nombre de bandes  $T(\text{FS-SNBcK Tabulé}) \sim \frac{T(\text{SNBcK})}{300}$ .

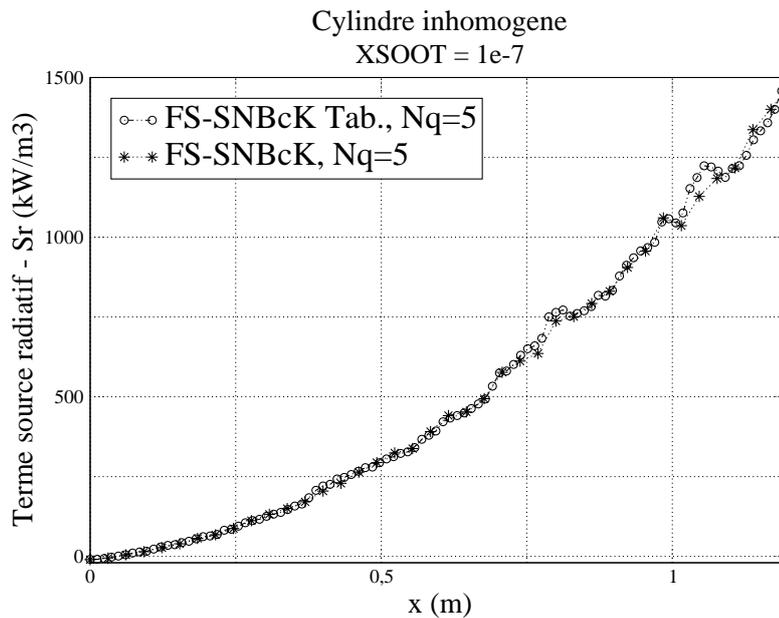


FIG. 3.3 – Terme source radiatif dans le cas 2 (cylindre inhomogène) pour les modèles FS-SNBcK et FS-SNBcK Tabulé.

### 3.3 CONCLUSION

Afin de réduire le temps de calcul du rayonnement, une solution consiste à réduire le nombre de bandes spectrales pour diminuer le nombre de résolutions de l'ETR. Il a été montré que le modèle global basé sur les  $k$ -distributions en bandes étroites donnait

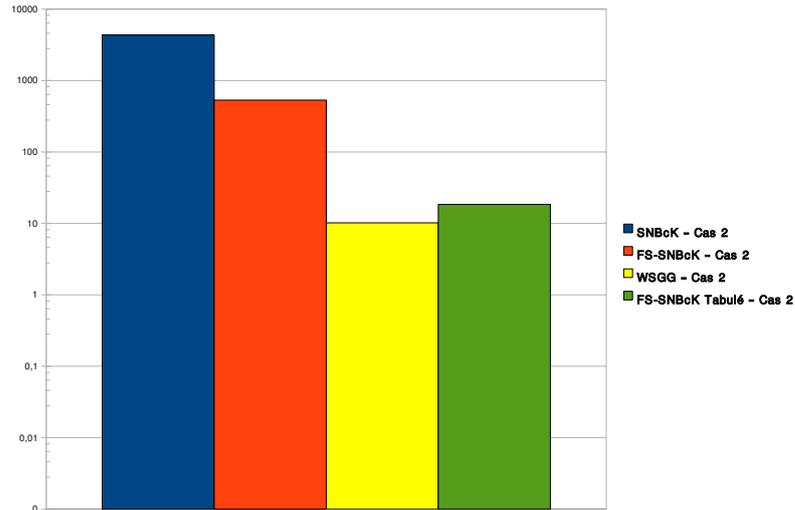


FIG. 3.4 – Comparaison des temps de calcul (échelle log) entre le modèle WSGG, FS-SNBcK, SNBcK et FS-SNBcK Tabulé dans une configuration inhomogène.

des résultats en très bon accord avec le modèle à bandes étroites pour les applications visées en combustion. Cependant, le gain en temps de calcul n'étant que d'un ordre de grandeur.

Pour accélérer encore le calcul, les coefficients d'absorption sont tabulés, on atteint ainsi un temps de calcul proche du modèle le plus rapide en somme pondérée de gaz gris. Le gain final en temps de calcul par rapport au modèle SNBcK est de deux ordres de grandeur. Avec ce modèle le couplage instationnaire combustion turbulente et rayonnement devient accessible sans dégrader la solution radiative.

L'avantage de cette approche est de déplacer la difficulté du temps de calcul de la résolution de l'ETR au calcul des propriétés d'absorption du milieu. Avec la tabulation, les coefficients d'absorption ne sont calculées que lors de la création de la table. Aussi le temps consacré à la résolution de l'ETR devient négligeable et il est possible d'augmenter facilement la quadrature angulaire ou de prendre en compte la réflexion sans surcoût important.

**Deuxième partie**

**De l'Interaction  
Rayonnement-Turbulence**



---

## Introduction

Dans cette partie, l'influence de la turbulence sur le rayonnement de flammes est discutée. Il existe une littérature abondante sur le sujet de l'interaction rayonnement-turbulence qui a montré l'importance de cet effet. Dans un premier chapitre un état de l'art sur ce sujet permet de dégager les effets notoires de l'interaction rayonnement-turbulence en étudiant principalement l'effet de la turbulence sur le rayonnement en combustion.

La plupart de ces études sont réalisées dans le contexte des équations de Navier Stokes moyennées dans le temps (simulations RANS). Les fluctuations turbulentes qui représentent les écarts par rapport à la solution moyenne stationnaire ne sont pas résolues. La même méthodologie pour étudier l'interaction rayonnement-turbulence peut être employée dans le contexte de la simulation aux grandes échelles, où les fluctuations turbulentes de grande échelle sont résolues.



# Sommaire

---

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| <b>4</b> | <b>État de l'art sur l'interaction rayonnement- turbulence</b>    | <b>87</b>  |
| 4.1      | LE PROBLÈME DE FERMETURE EN RANS . . . . .                        | 88         |
| 4.2      | INFLUENCE DE LA TURBULENCE SUR LE RAYONNEMENT . . . . .           | 92         |
| 4.3      | INFLUENCE DU RAYONNEMENT ET DE LA TRI SUR LA COMBUSTION . . . . . | 98         |
| 4.4      | CONCLUSION . . . . .  | 104        |
| <b>5</b> | <b>Diagnostic de la TRI en LES</b>                                | <b>107</b> |
| 5.1      | ÉTUDE DE LA TRI EN LES . . . . .                                  | 107        |
| 5.2      | DISCUSSIONS . . . . .   | 119        |
| 5.3      | CONCLUSION . . . . .  | 125        |

---



# ÉTAT DE L'ART SUR L'INTERACTION RAYONNEMENT- TURBULENCE EN COMBUSTION

Le problème de l'interaction turbulence-rayonnement<sup>1</sup> (I.T.R.) a fait l'objet de nombreuses publications dont une bonne synthèse est fournie dans [4]. La justification de ces études s'explique par la dépendance fortement non linéaire du terme source radiatif à la température,  $T$ , et aux concentrations d'espèces rayonnantes,  $X_i$  qui dans le cadre de la combustion turbulente qui sont des grandeurs fluctuantes.

La description de la turbulence introduit des grandeurs moyennes ( $\bar{T}$ ,  $\bar{X}_i$ ) et des grandeurs fluctuantes ( $T'$ ,  $X'_i$ ). Aussi le terme source radiatif moyen est *a priori* différent du terme source radiatif calculé à partir des grandeurs moyennes :

$$\overline{S_r(T, X_i)} \neq S_r(\bar{T}, \bar{X}_i) \quad (4.1)$$

Le problème de l'interaction rayonnement-turbulence consiste à évaluer et éventuellement modéliser l'impact des fluctuations sur le terme source radiatif.

Presque toutes les études traitant de la TRI ont été réalisées jusqu'ici dans le contexte RANS (voir chapitre 1), l'impact sur  $S_r$  des fluctuations à toutes les échelles de la turbulence est étudié. Dans le contexte LES, seule la partie sous-maille des fluctuations n'est pas prise en compte. Le problème de la modélisation se pose donc de façon très différente. Cependant très peu d'étude traitent de la modélisation de la TRI en LES.

Partant de l'équation de transfert radiatif, l'expression du terme source radiatif moyen fait apparaître des corrélations qui sont à évaluer : c'est le problème de fermeture. Des études de la TRI ont été conduites pour évaluer l'influence de la turbulence sur le rayonnement. Elles sont conduites par le biais de calculs découplés. L'influence du rayonnement et de la TRI sur la combustion a été envisagée dans des études sur des calculs couplés et récemment des DNS. Toutes ces études visent à dégager les effets notoires de la TRI dans le contexte RANS.

---

<sup>1</sup>TRI pour « Turbulence Radiation Interaction »

#### 4.1 LE PROBLÈME DE FERMETURE EN RANS

L'équation de transfert radiatif sous sa forme différentielle et monochromatique est donnée par (voir chapitre 2) :

$$\frac{dI_\nu(\mathbf{s})}{ds} = \kappa_\nu I_\nu^0 - \kappa_\nu I_\nu(\mathbf{s}) \quad (4.2)$$

Afin de faire apparaître les corrélations dues à la TRI, l'Eq. 4.2 est moyennée au sens d'une moyenne temporelle (voir l'Eq. 1.32) :

$$\frac{d\bar{I}_\nu}{ds} = \overline{\kappa_\nu I_\nu^0} - \overline{\kappa_\nu I_\nu} \quad (4.3)$$

Les termes de l'ETR dépendent de 6 variables : 3 d'espace, 2 de direction et la fréquence. Pour obtenir le terme source radiatif intervenant dans l'équation de bilan de la combustion qui ne dépend que des variables d'espace, l'ETR doit être intégrée sur les directions et sur les fréquences.

Comme l'ETR est résolue en stationnaire (pas de dépendance temporelle de la luminance), les termes radiatifs sont indépendants du temps, les intégrales sur les directions et les fréquences commutent avec la moyenne temporelle. Le terme d'émission moyen donne :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_{4\pi} \overline{\kappa_\nu I_\nu^0} d\Omega d\nu &= \overline{\int_0^\infty \int_{4\pi} \kappa_\nu I_\nu^0 d\Omega d\nu} \\ &= 4\sigma \overline{\kappa_P} T^4 \end{aligned} \quad (4.4)$$

avec  $\int_0^\infty I_\nu^0 d\nu = \sigma T^4 / \pi$  et le coefficient moyen de Planck  $\kappa_P$  définit tel que :

$$\kappa_P = \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^\infty \kappa_\nu I_\nu^0 d\nu \quad (4.5)$$

L'intégration du terme d'absorption donne :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_{4\pi} \overline{\kappa I_\nu} d\Omega d\nu &= \overline{\int_0^\infty \int_{4\pi} \kappa_\nu I_\nu d\Omega d\nu} \\ &= \int_0^\infty \overline{\kappa_\nu} \int_{4\pi} I_\nu d\Omega d\nu \\ &= \int_0^\infty \overline{\kappa_\nu G_\nu} d\nu \end{aligned} \quad (4.6)$$

où  $G_\nu$  est l'intégrale angulaire de la luminance incidente sur tout l'angle solide :

$$G_\nu = \int_{4\pi} I_\nu d\Omega \quad (4.7)$$

En somme, l'intégration de l'ETR, moyennée dans le temps, sur les directions et les fréquences donne le terme source radiatif moyen :

$$\bar{S}_r = \overline{\nabla \cdot \mathbf{q}_r} = 4\sigma \overline{\kappa_P} T^4 - \int_0^\infty \overline{\kappa_\nu G_\nu} d\nu \quad (4.8)$$

### 4.1.1 Terme d'émission

En introduisant la décomposition en moyennes et fluctuation de  $T^4 = \overline{T^4} + (T^4)'$  et  $\kappa_P = \overline{\kappa_P} + \kappa_P'$ , le terme d'émission donne :

$$\begin{aligned}\overline{\kappa_P T^4} &= \overline{(\overline{\kappa_P} + \kappa_P')(\overline{T^4} + (T^4)')} = \overline{\overline{\kappa_P} \overline{T^4} + \kappa_P' \overline{T^4} + \overline{\kappa_P} (T^4)' + \kappa_P' (T^4)'} \\ &= \overline{\kappa_P} \overline{T^4} + \underbrace{\overline{\kappa_P'} \overline{T^4}}_{=0} + \overline{\kappa_P} \underbrace{\overline{(T^4)'}}_{=0} + \overline{\kappa_P' (T^4)'} \\ &= \overline{\kappa_P} \overline{T^4} + \overline{\kappa_P' (T^4)'}\end{aligned}\quad (4.9)$$

Il est possible d'introduire les coefficients de corrélation  $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$  comme :

$$\overline{\kappa_P T^4} = \overline{\kappa_P} \overline{T^4} \left( \frac{\overline{T^4}}{\overline{T^4}} + \frac{\overline{\kappa_P' (T^4)'}}{\overline{\kappa_P} \overline{T^4}} \right) = \overline{\kappa_P} \overline{T^4} (R_{T^4} + R_{I_b}) \quad (4.10)$$

Par la suite, ces deux corrélations,  $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$ , désignent respectivement l'autocorrélation en température et la corrélation croisée température-coefficient d'absorption.

En développant  $T^4 = (\overline{T} + T')^4$ , les corrélations  $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$  donnent :

$$R_{T^4} = 1 + 6 \frac{\overline{T'^2}}{\overline{T}^2} + 4 \frac{\overline{T'^3}}{\overline{T}^3} + \frac{\overline{T'^4}}{\overline{T}^4} \quad (4.11)$$

$$R_{I_b} = 4 \frac{\overline{\kappa_P' T'}}{\overline{\kappa_P} \cdot \overline{T}} + 6 \frac{\overline{\kappa_P' T'^2}}{\overline{\kappa_P} \cdot \overline{T}^2} + 4 \frac{\overline{\kappa_P' T'^3}}{\overline{\kappa_P} \cdot \overline{T}^3} + \frac{\overline{\kappa_P' T'^4}}{\overline{\kappa_P} \cdot \overline{T}^4} \quad (4.12)$$

Enfin une troisième corrélation apparaît dans le terme d'émission car la moyenne du coefficient d'absorption n'est pas strictement identique au coefficient d'absorption des grandeurs moyennes du milieu. Ce terme peut être désigné par l'autocorrélation du coefficient d'absorption :

$$R_{\kappa_P} = \frac{\overline{\kappa_P(T, X_i)}}{\overline{\kappa_P}(\overline{T}, \overline{X_i})} \quad (4.13)$$

En conclusion le terme d'émission fait intervenir les trois corrélations suivantes :

$$\overline{\kappa_P T^4} = \underbrace{\overline{\kappa_P}(\overline{T}, \overline{X_i}) \overline{T^4}}_{\text{Émission à partir des valeurs moyennes}} \times \underbrace{R_{\kappa_P} (R_{T^4} + R_{I_b})}_{\text{Corrélations}} \quad (4.14)$$

En l'absence de fluctuations, l'autocorrélation en température et en coefficient d'absorption est égale à 1 et la corrélation croisée absorption température est nulle. Nous verrons par la suite que la plupart des études négligent l'autocorrélation en coefficient d'absorption.

L'autocorrélation en température est toujours positive mais la corrélation croisée température-absorption peut être soit positive soit négative. Les données de l'annexe A utilisées pour la tabulation du modèle FS-SNBcK peuvent être consultées pour illustrer la dépendance du coefficient d'absorption avec la température et les concentrations.

Il y a un effet de compétition entre  $T$  et  $X_i$  sur  $\kappa_p$ . Le coefficient d'absorption augmente avec  $X_i$  lorsque les autres paramètres sont constants, mais décroît généralement avec  $T$  (selon le mélange considéré). Pour des petites valeurs de  $X_i$ , typiquement proche des réactifs, le coefficient d'absorption est fortement influencée par  $X_i$ . La valeur de  $\kappa_p$  augmente quand  $X_i$  augmente, vers les zones de produits. Dans ce cas la valeur de  $\kappa_p$  est surtout influencée par la température et par conséquent décroît si  $T$  augmente. Ce qui résulte en une corrélation négative dans la zone de la flamme où la température et les concentrations sont importantes.

#### 4.1.2 Terme d'absorption

Dans le terme d'absorption la décomposition du coefficient d'absorption donne :

$$\overline{\kappa_\nu G_\nu} = \overline{\kappa_\nu} \overline{G_\nu} + \overline{\kappa'_\nu G'_\nu} \quad (4.15)$$

#### Hypothèse des tourbillons optiquement fins

Il apparaît donc une corrélation entre le coefficient d'absorption spectral et la luminance monochromatique incidente. Kabashnikov *et al.* [78, 79] ont formalisé l'hypothèse des tourbillons optiquement fins<sup>2</sup> qui consiste à négliger cette corrélation.

En introduisant une longueur caractéristique  $L$  (à l'échelle de Kolmogorov et/ou de l'épaisseur de flamme) l'épaisseur optique des tourbillons  $\kappa_\nu L$  peut être évaluée. Si cette épaisseur optique est petite,  $\kappa_\nu L \ll 1$ , les fluctuations de  $\kappa_\nu$  (une grandeur locale, fonction des propriétés thermodynamiques locales) sont supposées décorréliées de  $G_\nu$  (une grandeur non locale, fonction de tout le rayonnement incident en un point donné). Alors :

$$\overline{\kappa_\nu G_\nu} \approx \overline{\kappa_\nu} \overline{G_\nu} \quad (4.16)$$

Cependant  $\kappa_\nu$  ayant une forte variation avec la longueur d'onde, sur plusieurs ordres de grandeurs, cette hypothèse ne peut pas être vérifiée sur tout le spectre.

Une autre façon de formuler l'OTFA est de définir une longueur  $l$  de décorrélation entre  $\kappa_\nu$  et  $G_\nu$ , définissant une sphère autour du point considéré à l'intérieur de laquelle ces quantités sont décorréliées. Cette longueur est différente pour chaque longueur d'onde et telle que  $l = l_\nu = 1/\kappa_\nu$ . Aussi pour certaines fréquences cette longueur  $l_\nu$  pourra être grande devant l'échelle caractéristique des fluctuations  $L$  mais il y aura inévitablement une proportion du spectre qui ne respecte pas cette hypothèse.

Une grande partie des travaux qui traitent de la TRI utilisent l'OTFA. Quelques études utilisant la méthode de Monte Carlo ont permis pour valider de cette hypothèse sur les configurations étudiées. Cette hypothèse simplifie grandement le problème car la modélisation de cette corrélation n'est pas simple. Elle fait intervenir le rayonnement incident,  $G$  qui dépend de toutes les fluctuations non locales, et le coefficient  $\kappa$ , dépendant des fluctuations locales.

<sup>2</sup>OTFA pour Optically Thin Fluctuations Approximation

### Approximation du milieu optiquement fin

Cette approximation est faite dans de nombreuses applications de combustion, particulièrement pour des flammes non lumineuses de petite échelle. L'approximation du milieu optiquement fin ne doit pas être confondue avec l'OTFA qui n'a lieu que dans le contexte de la TRI. L'OTFA requiert que l'épaisseur optique basée sur l'échelle intégrale soit petite devant 1 tandis que l'hypothèse du milieu optiquement fin requiert que  $\kappa_p L \ll 1$ , où  $L$  est la dimension caractéristique du système.

Lorsqu'on fait l'hypothèse d'un milieu optiquement fin, la moyenne temporelle de la divergence du flux radiatif s'écrit :

$$\overline{\nabla \cdot \mathbf{q}_R} = 4\sigma(\overline{\kappa_p T^4} - \overline{\kappa_p} T_\infty^4) \quad (4.17)$$

où  $T_\infty$  correspond à la température des parois.

Les valeurs moyennes qui apparaissent se décomposent pour faire apparaître différentes corrélations du terme d'émission seulement.

#### 4.1.3 Prise en compte des différentes corrélations

Lorsque les corrélations qui rendent compte de la TRI ont un fort impact, elles doivent être modélisées. Elles se répartissent en quatre groupes :

- L'autocorrélation en température,  $R_{T^4}$  ;
- L'autocorrélation du coefficient d'absorption,  $R_{\kappa_p}$  ;
- La corrélation croisée température-coefficient d'absorption,  $R_{Ib}$  ;
- La corrélation du coefficient d'absorption avec la luminance incidente,  $\overline{\kappa'_v G'_v}$ .

Différentes approches sont possibles pour modéliser les 3 premières corrélations. La plus simple consiste à utiliser un développement en séries de Taylor comme le propose Snegirev [80]. Une autre approche est d'utiliser une densité de probabilité (présumée ou transportée par une équation supplémentaire) de grandeurs turbulentes. Cette densité de probabilité est donnée par le modèle de combustion. La dernière corrélation est souvent négligée en faisant appel à l'OTFA.

Plusieurs approches peuvent être envisagées en ne considérant que  $R_{T^4}$ , on parle de TRI partielle ; si  $R_{T^4}$  et  $R_{Ib}$  sont considérées en négligeant  $R_{\kappa_p}$  et faisant l'hypothèse OTFA, on parle alors de TRI « complète ».

Les études numériques de flamme turbulentes visent à quantifier l'impact de l'interaction turbulence-rayonnement. D'une part, les calculs découplés permettent d'évaluer l'influence de la turbulence sur le rayonnement à travers chaque corrélation et de déterminer les corrélations nécessaires à modéliser : sans TRI, TRI partielle, TRI complète, validité de l'OTFA. D'autre part, des calculs couplés permettent d'estimer l'importance de la TRI dans l'influence du rayonnement sur la combustion. L'utilisation de DNS permet une évaluation précise des corrélations sans aucune hypothèse. Une grande partie de ces travaux étudient la configuration de la flamme Sandia D, bien connue dans la littérature et qui est une flamme de diffusion turbulente méthane/air bidimensionnelle.

## 4.2 INFLUENCE DE LA TURBULENCE SUR LE RAYONNEMENT

Dans ce paragraphe, l'état de l'art des travaux réalisés depuis 1980 sur la simulation de la TRI est présenté. Les calculs du rayonnement sont découplés de l'écoulement le rayonnement est calculé soit à partir des valeurs moyennes seulement soit en tenant compte des corrélations de la TRI.

Une difficulté dans l'étude de la TRI est d'avoir accès à toutes les données instantanées du champ turbulent. Que les données soient fournies par un calcul ou une expérience, les champs obtenus sont la plupart du temps des champs moyens pour lesquels la statistique des fluctuations est connue uniquement par leur pdf.

Les méthodes utilisées sont stochastiques et consistent à générer des fluctuations de température et de composition sur des chemins optiques le long desquels lesquels l'ETR est résolue. Des séries temporelles sont générées aléatoirement en supposant la pdf des grandeurs considérées. Cette méthode a été d'abord proposée par Jeng et al. [81]. Pour cela, ils ont supposé que l'écoulement était constitué par de nombreux tourbillons statistiquement indépendants et dont la taille est déterminée à partir du modèle de turbulence.

### 4.2.1 Corrélations du terme d'émission

Une étude sur l'autocorrélation en température seule a été réalisée par Burns [82]. Le rapport  $\overline{T^4}/\overline{T}^4$  a été évalué en supposant différentes densités de probabilité pour la distribution de température. Il a été montré que des fonctions de type bêta, reproduisaient bien les distributions de température observées expérimentalement. Cependant Burns trouve que le rapport  $\overline{T^4}/\overline{T}^4$  est relativement peu sensible à la forme des pdf, variant de moins de 10% pour des fluctuations de température de  $\pm 40\%$ , voir Fig. ?? . Les valeurs calculées de l'autocorrélation en température, données sur la Fig. 4.1 (d'après [82]) sont en accord avec les résultats de Cox [83] qui a estimé l'autocorrélation en température à partir de données expérimentales.

Grosshandler *et al.* [84, 85] ont été parmi les premiers à réaliser des simulations stochastiques en utilisant une méthode de lancer de rayons. Ils réalisent une étude paramétrique sur trois flammes différentes. Le rayonnement utilise un modèle en transmittivité globale dans un milieu non homogène. La comparaison de la luminance basée sur les valeurs moyennes et la moyenne temporelle de la luminance calculée à partir des valeurs instantanées, montre que *la TRI peut conduire à une luminance moyenne dépassant d'un facteur deux ou plus celle calculée à partir des propriétés moyennes*. Par ailleurs dans certaines flammes lumineuses, très chargées en suies, *la moyenne de la luminance peut être plus faible que celle estimée à partir des propriétés moyennes*. Cela s'explique par la forte corrélation négative entre les fractions volumique de suies et la température, conduisant à une forte contribution négative du terme  $R_{Ib}$  dans l'Eq. 4.14. Ce résultat est confirmé expérimentalement. Cependant, cette conclusion est en contradiction avec une analyse de sensibilité de Krebs *et al.* [86] où l'émission calculée est toujours plus grande si la TRI est prise en compte, même si la corrélation entre les fluctuations de température et fraction volumique de suie est fortement négative. Les résultats de Grosshandler *et al.* sont également en contradiction avec les données de Faeth *et al.* sur les flammes lumineuses [87, 88, 89] pour lesquelles la TRI augmente toujours la lu-

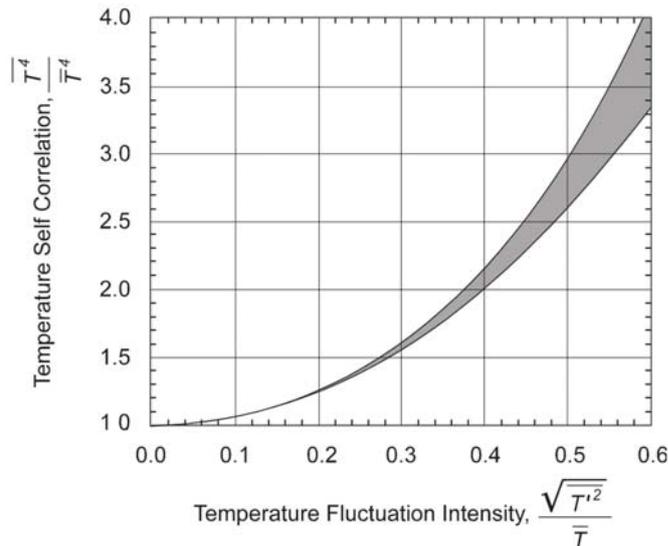


FIG. 4.1 – Autocorrélation en température calculée par des densité de probabilité en fonction de l'intensité des fluctuations. La zone colorée correspond à la zone de variation de l'autocorrélation en température pour les différentes pdf étudiées [82].

minance. Ces conclusions différentes ont montré que la corrélation  $R_{Ib}$  pouvait être dans certains cas positive et dans d'autres négative et suffisamment importante pour contribuer à diminuer la luminance.

Grosshandler et Joulain [85] ont aussi observé que la TRI est surtout influencée par l'amplitude des fluctuations plus que par leur distribution ou la taille de la flamme. Le modèle stochastique conjugué avec un modèle en transmittivité global est appliqué au calcul des transferts radiatifs de feux de nappes d'éthanol. La comparaison des prédictions aux mesures de la luminance le long de l'axe de la flamme démontre une meilleure précision des prédictions qui tiennent compte de la TRI par rapport à celles qui utilisent les valeurs moyennes. La luminance moyenne est de 25% à 80% plus grande avec la TRI.

Faeth *et al.* [90, 87, 91, 92, 93, 89, 81] ont mené des études expérimentales et numériques sur la TRI pour des flammes de diffusion turbulente de méthane, d'éthylène, de monoxyde de carbone, d'acétylène et d'hydrogène. La structure des flammes est calculée en négligeant les pertes radiatives et en utilisant un modèle de turbulence  $k - \epsilon$  et un modèle de combustion à pdf présumée. Ce modèle permet de construire la pdf de richesse en supposant que celle-ci est une gaussienne. Les luminances monochromatiques directionnelles sortantes d'une colonne qui traversent la flamme turbulente sont calculées et comparées à des résultats expérimentaux. Le long de cette colonne l'ETR est résolue par méthode stochastique. Les propriétés radiatives du milieu sont obtenues à l'aide du code RADCAL et en utilisant l'approximation de Curtis-Godson pour un milieu non homogène. Les suies ne sont prises en compte que dans les flammes d'éthylène et d'acétylène. La diffusion du rayonnement est toujours négligée. Dans tous les cas étudiés la turbulence contribue à augmenter la luminance moyenne. Ces travaux montrent que l'effet des fluctuations turbulentes sur la moyenne spectrale de la luminance est faible pour des flammes de monoxyde de carbone et d'air (de l'ordre de 10%) [94], modérée dans des flammes de méthane/air (de l'ordre de 10-30%) [81] et importante dans des flammes d'hydrogène/air (de l'ordre de 100%) [93]. Ces différences sont dues à la variation rapide

de la température et de la concentration d' $\text{H}_2\text{O}$  avec la fraction de mélange près des conditions stoechiométriques pour la flamme d'hydrogène/air par rapport aux autres flammes. Dans les flammes d'éthylène/air, l'augmentation du rayonnement gris des suies est comprise entre 50% et 300%, mais est plus faible pour la bande à  $4,3 \mu\text{m}$  du  $\text{CO}_2$ . Dans les flammes acétylène/air, l'augmentation du rayonnement continu dû aux suies est compris entre 40% et 100%. Cependant, elle n'est pas très importante pour l'absorption dans le domaine visible, suggérant que la TRI est surtout due à la forte dépendance non linéaire de la fonction de Planck avec la température.

Kounalakis *et al.* [91, 92] ont utilisé des modèles stochastiques améliorés afin de poursuivre les analyses de la TRI dans les flammes précédemment étudiées d'hydrogène/air et de monoxyde de carbone/air. L'analyse a été étendue à la prédiction et compatible avec les mesures de la pdf et de la densité spectrale en puissance de la luminance monochromatique. Pour la flamme d'hydrogène, les observations de Faeth *et al.* sont confirmées, avec des fluctuations de la luminance de 20% à 110%. Dans le cas de la flamme de monoxyde de carbone air, l'intensité des fluctuations de luminance varie entre 20% et 50%, ce qui dépasse les estimations précédentes pour ces flammes. Dans les deux cas de flamme, la prédiction de la luminance moyenne est relativement indépendante de l'échelle intégrale de la turbulence, mais les fluctuations de la luminance augmentent avec la taille caractéristique de la flamme. L'écart entre les prédictions utilisant un modèle stochastique et les mesures est inférieur à 25% pour la flamme d' $\text{H}_2$ /air et inférieur à 30% pour la flamme de CO/air. Des erreurs similaires sont observées pour les pdf et le spectre de puissance des fluctuations radiatives.

Des analyses théoriques ont également été conduites notamment par Kritzstein et Soufiani [95] qui ont étudié l'influence de la turbulence sur une raie Lorentzienne isolée, pour une turbulence homogène et isotrope d'un mélange de gaz stationnaire en moyenne. Un développement de Taylor pour la luminance intégrée sur le profil et seules les fluctuations de température sont considérées. L'analyse paramétrique est réalisée pour une raie de CO centrée en  $\nu = 2124 \text{ cm}^{-1}$ , avec une température moyenne de  $T = 1000 \text{ K}$ . Pour un milieu optiquement fin, la luminance monochromatique, n'est pas sensible à la forme des fonctions de corrélation. Par contre, dans un milieu optiquement épais, des différences de plus de 13% sont trouvées sur la luminance monochromatique au centre de la raie, et de 4% pour la luminance intégrée sur la raie. La forme des raies peut être fortement modifiée par les fluctuations de température.

Zheng *et al.* [96, 97, 98] montrent que la simulation stochastique associée à une procédure de tomographie, pour déterminer l'échelle intégrale, produit des résultats en très bon accord avec les valeurs mesurées (luminance moyenne et variance de la luminance monochromatique). Ces travaux sont basés sur l'étude de la flamme Sandia D. Pour cette flamme de nombreuses données sont disponibles : les valeurs instantanées et moyennes de la température, de la fraction massique et de la concentration. Les chemins optiques sont situés dans un plan au dessus de la flamme, représenté sur la Fig. 4.2 (d'après [98, 97]).

Les résultats obtenus sont présentés sur la Fig. 4.3 (d'après [96]), qui montre la luminance moyenne pour deux chemins optiques de la flamme D. Il apparaît que les calculs basés sur les propriétés moyennes sont en bon accord avec les mesures pour le chemin qui suit le diamètre, mais sous-estiment sévèrement les données expérimentales le long d'une corde (cf. Fig. 4.2). Au contraire, les calculs basés sur les simulations stochastiques sont partout en très bon accord avec les mesures. Ces bonnes prédictions

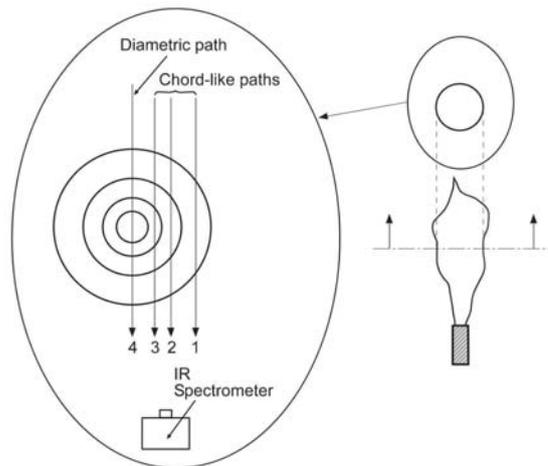


FIG. 4.2 – Mesures et simulation de la luminance monochromatique dans la flamme Sandia D [98, 97]

concernent la valeur moyenne et la variance de la luminance monochromatique le long de différentes cordes, comme on le voit sur la Fig. 4.4 (d'après [97]). Ces résultats démontrent que la TRI pour cette flamme n'est pas très importante dans la région de l'axe central, mais elle l'est loin de l'axe où les fluctuations sont plus importantes. Les prédictions faites par ces modèles sont généralement en accord avec les mesures avec une erreur inférieure à 10%. Toutefois l'échelle intégrale utilisée dans ce modèle a été optimisée par rapport aux statistiques radiatives déterminées expérimentalement.

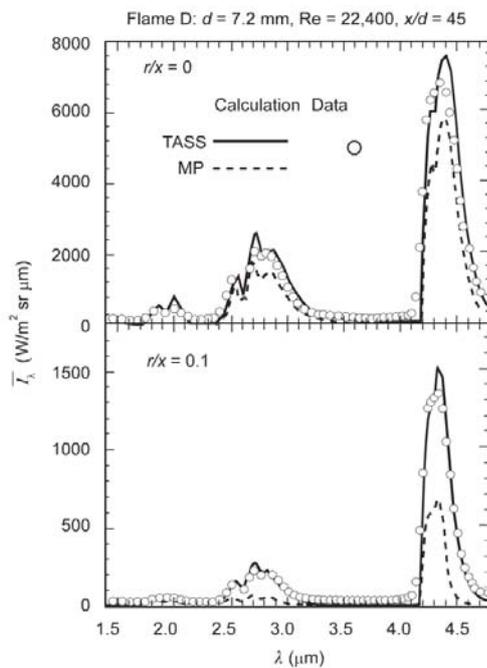


FIG. 4.3 – Luminances monochromatiques dans une flamme D à  $x/d=45$  calculé à partir des propriétés moyennes (MP) et à partir des simulation stochastiques dans le temps et l'espace (TASS). Les symboles représentent les données expérimentales. [96].

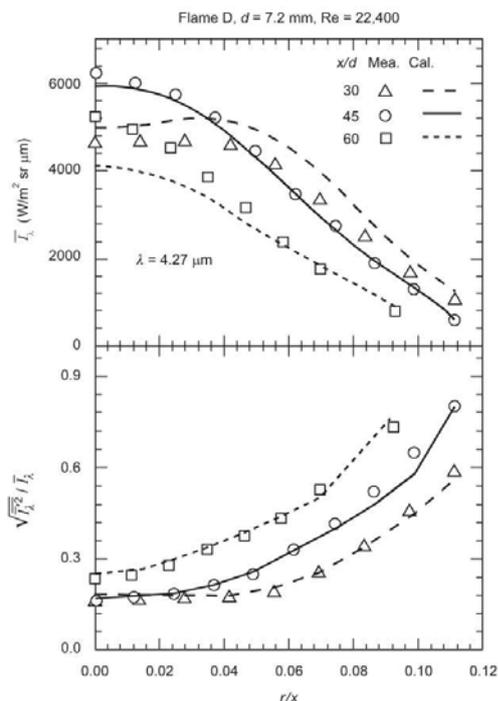


FIG. 4.4 – Luminance monochromatique moyenne et fluctuante pour une longueur d'onde  $\lambda = 4,27\mu\text{m}$  le long de différentes cordes traversant la flamme Sandia D [97].

Dans les applications pratiques, aucune donnée ne donne accès à l'échelle intégrale nécessaire aux modèles stochastiques. Coelho [99] apporte des prédictions précises de la luminance monochromatique pour la flamme D en employant trois méthodes différentes, illustrées sur Fig. 4.5 (d'après [99]) comparable à la Fig. 4.3. Les propriétés radiatives sont calculées à l'aide d'un modèle SNB. Dans la première méthode les calculs sont effectués en utilisant un modèle stochastique pour tenir compte de la TRI. Dans la seconde, la moyenne temporelle de l'ETR est utilisée mais en ne considérant que les fluctuations de température (TRI partielle,  $R_{T^4}$ ) et les fluctuations de la transmittivité du milieu sont négligées dans le calcul des coefficients d'absorption ( $R_{Ib}$ ,  $R_{\kappa_p}$ ). Enfin dans la dernière, la TRI est complètement ignorée. Il apparaît que le modèle stochastique prédit une plus forte luminance monochromatique pour la bande à  $2,7 \mu\text{m}$  de l' $\text{H}_2\text{O}$  et du  $\text{CO}_2$ , et surtout pour la bande à  $4,3 \mu\text{m}$  du  $\text{CO}_2$ . Bien que le modèle TRI partielle donne des luminances monochromatiques inférieures à celles du modèle stochastique, elles sont toujours supérieures à celle du modèle sans TRI. Les différences entre ces trois méthodes qui traitent de la TRI sont particulièrement importantes sur une corde (chemin optique ne passant pas par le centre de la flamme, voir la Fig. 4.2). Ces résultats sont en parfait accord avec les résultats de Zheng *et al.* [98].

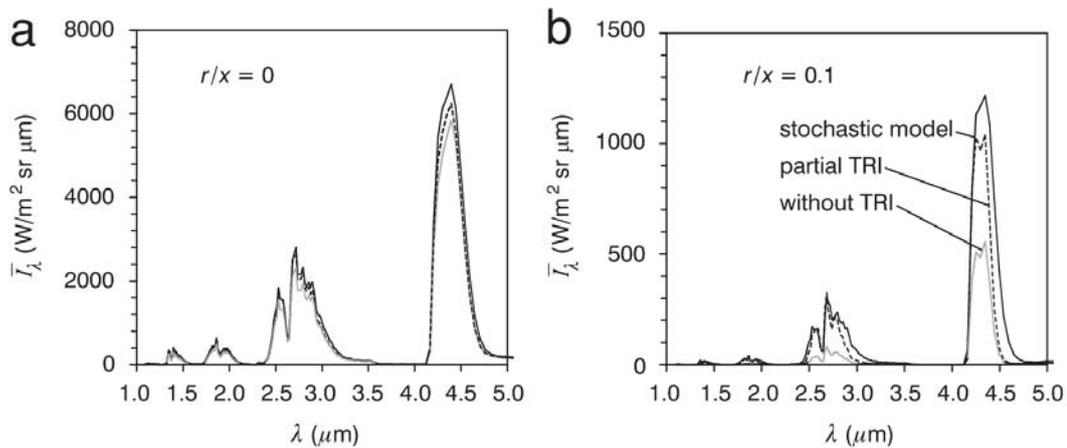


FIG. 4.5 – Luminance monochromatique pour la flamme Sandia D à  $x/d=45$  [99].

#### 4.2.2 Validations de l'OTFA sur différentes configurations

L'OTFA est une hypothèse assez complexe à vérifier en raison de sa dépendance avec la longueur d'onde. Elle peut être validée pour une grande partie du spectre d'absorption des gaz mais complètement erronée pour des centres de raie d'absorption. Différentes études ont été menées pour évaluer la pertinence de cette hypothèse sur différents cas particuliers.

Krebs *et al.* [86] ont étudié la TRI par une analyse de sensibilité dans la zone primaire d'une chambre de combustion d'une turbine à gaz fonctionnant à 10 atm. Les échelles turbulentes et les corrélations sont introduites de façon paramétrique. L'effet des fluctuations de température sur le coefficient d'absorption spectral est négligé ( $R_{\kappa_p} = 1$ ) dans l'analyse de sensibilité. Les calculs ont été effectués à  $\lambda = 1,5 \mu\text{m}$  dans le cas des suies et  $\lambda = 4,3 \mu\text{m}$  dans le cas du  $\text{CO}_2$ . A ces longueurs d'onde et pour une température de 1800 K, le rayonnement émis par les espèces considérées atteint son maximum. L'intensité des fluctuations de concentration des espèces rayonnantes

est de 30% de la valeur moyenne. Pour l'émission du  $\text{CO}_2$ , l'augmentation du rayonnement émis due aux fluctuations de température et de coefficient d'absorption est relativement faible. Elle ne dépasse pas 25% pour des fluctuations de température de 600K, même si la corrélation entre les fluctuations de température et de concentration de  $\text{CO}_2$  est importante. Pour les suies, l'augmentation du terme d'émission est par contre très importante pour des fluctuations de température de 300 K et atteint 100% si les fluctuations sont de 600 K. La corrélation entre la luminance incidente et le coefficient d'absorption peut être négligée (OTFA), si l'épaisseur optique est telle que  $\kappa_v l_e$  reste inférieure à 0,3.

Kabashnikov [100] a montré que si l'épaisseur optique dépasse 0,1, l'OTFA donne des erreurs significatives. Cette valeur doit être prise avec précaution car ces simulations ne sont pas appliquées à des flammes réelles et l'extrapolation de ce résultat peut être incertaine.

Aussi Coelho [99] a étudié la précision de l'OTFA en comparant les prédictions d'une méthode stochastique et la solution exacte de l'ETR sur la flamme Sandia D. Les propriétés radiatives du milieu sont calculées en utilisant un modèle SNB puis CK. La Fig. 4.6 (d'après [99]) montre les luminances prédites le long de l'axe  $x/d=45$ . Les données expérimentales de température et de concentration ont été utilisées pour les calculs radiatifs. Comme la luminance n'a pas été expérimentalement déterminée les prédictions du modèles SNB/stochastique sont prises comme référence. Trois modèles sont considérés, un sans TRI, un second avec une TRI partielle ( $R_{T^4}$ ) et un modèle de TRI complète ( $R_{T^4}$  et  $R_{Ib}$  faisant l'hypothèse de l'OTFA). Les résultats montrent que, en accord avec les travaux précédents, la TRI contribue à augmenter le bilan radiatif. La TRI partielle qui néglige les fluctuations de l'absorption sous estime l'influence de la TRI, que ce soit avec le modèle SNB ou CK. Le modèle CK/TRI complète en en très bon accord avec les prédictions du modèle CK/stochastique. Cela signifie que l'OTFA est très précise pour cette ligne de visée et que la corrélation entre le coefficient d'absorption et la luminance incidente est négligeable, l'erreur maximum entre la TRI complète et le modèle stochastique étant de 2,5%.

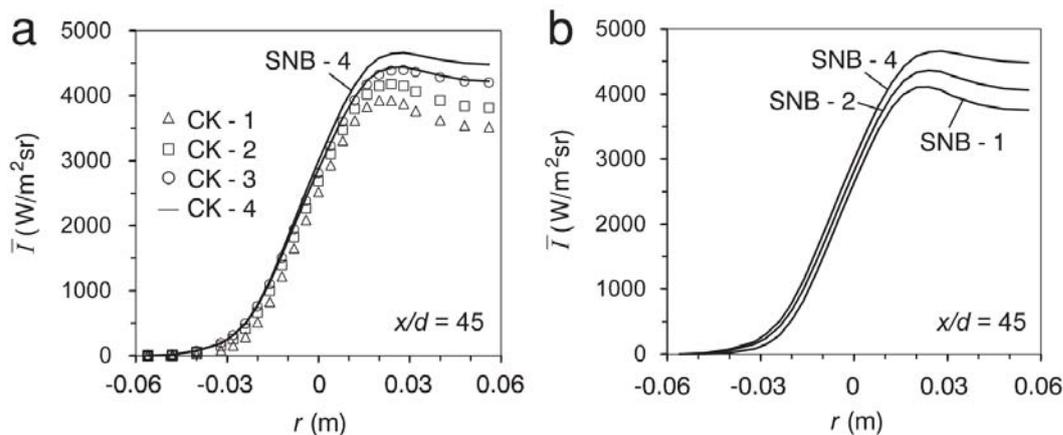


FIG. 4.6 – Luminance monochromatique pour la flamme Sandia D à  $x/d=45$ , 1 :sans TRI, 2 :TRI partielle, 3 :TRI complète, 4 :modèle stochastique [99].

### 4.3 INFLUENCE DU RAYONNEMENT ET DE LA TRI SUR LA COMBUSTION

L'usage de modèles stochastiques pour tenir compte de la TRI dans le cadre de calculs couplés devient prohibitif en temps de calcul et d'autres approches sont nécessaires. Si la configuration le permet l'hypothèse de milieu optiquement fin est utilisée. Le couplage combustion-rayonnement est réalisé dans le contexte RANS en utilisant la moyenne temporelle de l'ETR, cf Eq. 4.3. Les corrélations sont calculées à partir de la pdf du modèle de combustion. Certains calculs couplés ont également été menés en utilisant la méthode de Monte Carlo.

#### 4.3.1 Calculs basés sur des méthodes approchées pour le rayonnement

Song et Viskanta sont les premiers à effectuer des calculs couplés de CFD-rayonnement [101] sur une flamme de méthane/air prémélangée dans une géométrie 2D, se basant sur l'approximation  $P_1$  pour le rayonnement et un modèle statistique pour la combustion. Il a été trouvé que la TRI sur les propriétés de l'écoulement pouvait être négligée pour les calculs, en raison du petit volume de la flamme devant le volume du four. Les pertes radiatives sont plus importantes en considérant la TRI près de la flamme mais les flux thermiques (convection et rayonnement) sont modifiés de seulement 1% par la TRI. Une étude paramétrique a montré que les effets de la TRI devenaient importants quand la taille de la flamme devenait significative en comparaison avec le volume du four car les effets radiatifs de la flamme sont plus importants.

Adams et Smith [102] ont étudié un four industriel tridimensionnel brûlant du gaz naturel. Ils ont utilisé une méthode DOM avec l'OTFA, le milieu étant traité comme gris. Plusieurs cas étudiés montrent que les effets de la TRI sont faibles si les suies ne sont pas prises en compte. Ils deviennent plus prononcés sur les flux aux parois et sur la puissance émise en présence de suies. Ces résultats ne sont pas validés par des mesures expérimentales mais corroborent les résultats de Grosshandler et Joulain [85]. Dans de telles flammes les fluctuations turbulentes peuvent soit augmenter l'émission soit la diminuer en fonction des conditions de température, de concentration de suie, d'intensité turbulente et de longueur d'onde. Cependant les effets de la TRI sur la température sont relativement faibles avec des *différences de température d'environ 50K pour les flammes pauvres et 100K pour les flammes riches*.

Coelho *et al.* [99, 103] ont également mené des calculs couplés sur la flamme Sandia D. Le rayonnement est calculé en utilisant une méthode DOM et les propriétés radiatives du milieu utilisent un modèle spectral global SLW. Les profils de température calculés ainsi que les mesures sont faits le long de l'axe et sont représentés sur Fig. 4.7 (d'après [103]). Différentes approches sont étudiées : sans pertes radiatives, avec un modèle optiquement fin, et l'approche de TRI complète ( $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$  avec l'OTFA). Les variations des prédictions de température, en utilisant différents modèles, sont du même ordre que les incertitudes de mesure. De plus la différence entre les températures calculées avec rayonnement ou dans des conditions adiabatiques n'excède pas 150K (quel que soit le modèle radiatif employé). Le profil de température de la flamme est assez peu influencé par les fluctuations du coefficient d'absorption, les prédictions de la TRI complète et de la TRI partielle sont très similaires. La perte radiative totale est de 887 W, ce qui représente une fraction de 5,1% de la puissance dégagée par la flamme.

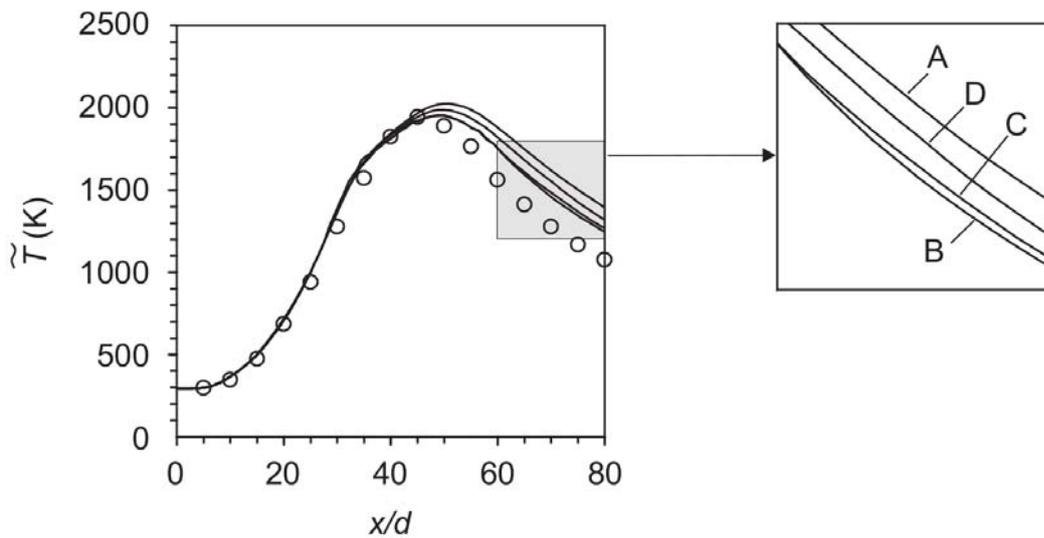


FIG. 4.7 – Profils de température prédits pour la flamme Sandia D (symboles : mesures ; ligne A : flamme adiabatique ; ligne B : milieu optiquement fin,  $\kappa_P$ , OTFA ; ligne C : DOM,  $\kappa_P$ , TRI complète ; ligne D : DOM, SLW, TRI complète [103]).

Modest *et al.* [104, 6, 105, 106, 107, 108] ont réalisé des calculs couplés où la combustion utilise une équation de transport pour la pdf et l'ETR est résolue avec l'approximation  $P_1$ . Les propriétés d'absorption sont décrites avec un modèle à bande large et l'OTFA est considérée. L'équation de transport de la pdf est résolue avec une méthode de Monte Carlo.

Une première étude est conduite sur une flamme de diffusion de méthane/air. La TRI est calculée en utilisant la pdf du modèle de combustion. Elle a pour conséquence d'augmenter l'émission radiative, ce qui amène à une augmentation d'environ 40% des flux aux parois, alors que l'absorption des régions froides autour de la flamme est relativement faible. La température de la flamme décroît d'environ 100K à cause de la TRI. Cependant le couplage avec Monte Carlo est coûteux en temps de calcul et ses auteurs reconnaissent qu'elle est difficilement applicable à des problèmes 2D ou 3D.

Modest *et al.* ont également simulé un brûleur axisymétrique de méthane en négligeant le rayonnement des suies. La comparaison des calculs, avec et sans TRI, confirme les résultats précédents : la flamme devient plus froide si la TRI est prise en compte : le pic de température décroît de 1985K à 1875K. Les pertes radiatives sont généralement plus importantes si la TRI est considérée. Afin de mieux isoler les différents effets de la TRI, des calculs découplés ont été réalisés. Il a été montré que l'autocorrélation du coefficient d'absorption ( $R_\kappa$ ) n'avait pas d'influence sur les pertes radiatives. L'autocorrélation en température ( $R_{T_4}$ ) a pour conséquence d'augmenter le terme source radiatif de 30%. Si la corrélation entre le coefficient d'absorption et la température est considérée ( $R_{Ib}$ ), le terme source radiatif augmente de plus de 50%. L'examen de profils révèle que l'émission est toujours augmentée par la TRI. L'absorption augmente également mais pas avec une amplitude beaucoup plus faible que l'émission. Par conséquent la TRI contribue à une augmentation des pertes radiatives.

La démarche utilisée pour investiguer les différentes approximations a été utilisée sur la flamme Sandia D. Deux autres flammes artificielles ont été dérivées de la flamme

D en doublant ou quadruplant le diamètre du jet et par conséquent l'épaisseur optique [107]. La Fig. 4.8 (d'après [107]) présente les contours de températures prédits pour la flamme avec un diamètre quatre fois supérieur à celui de la flamme D.

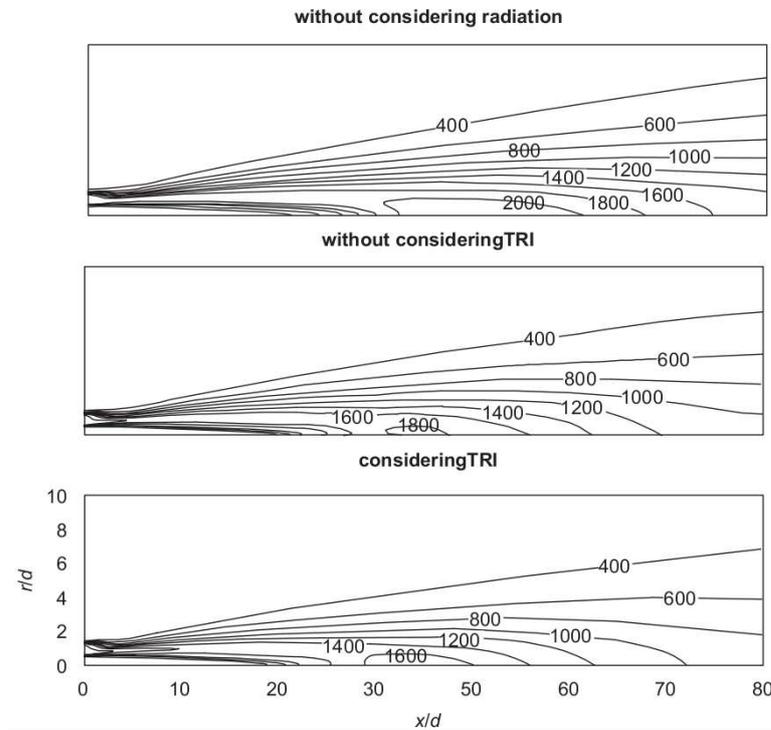


FIG. 4.8 – Contours de température (K) pour une flamme similaire à la flamme D avec un diamètre quatre fois supérieur : 1 sans rayonnement, 2 avec rayonnement mais sans TRI, 3 avec rayonnement et TRI. [107].

Les résultats confirment que la flamme se refroidit à cause des pertes radiatives. La TRI contribue à diminuer la température, comptant pour  $1/3$  de la baisse du pic de température. Pour les flammes les plus optiquement épaisses, le pic de température décroît significativement avec la TRI, ce qui démontre son importance dans les cas optiquement plus épais. Les résultats présentés montrent que l'autocorrélation du coefficient d'absorption ( $R_{\kappa_p}$ ) est faible. L'autocorrélation en température ( $R_{T^4}$ ) est la plus importante et cause une augmentation des pertes radiatives comprise entre 36% et 39%. La corrélation croisée coefficient d'absorption-température ( $R_{I_b}$ ) ajoutée à l'autocorrélation en température ( $R_{T^4}$ ) contribue à augmenter les pertes radiatives augmentent entre 59% et 72%. L'autocorrélation du coefficient d'absorption ( $R_{\kappa_p}$ ) dans le terme d'absorption contribue à légèrement diminuer les pertes radiatives mais son impact est faible.

#### 4.3.2 Calculs basés sur la méthode de Monte Carlo

Snegirev [80] a étudié une flamme de diffusion turbulente avec un modèle simple pour prédire les concentrations de suies. Le milieu est traité comme gris ou en utilisant un modèle à somme pondérée de gaz gris. Le rayonnement est résolu par la méthode de Monte Carlo en faisant l'hypothèse OTFA. Il est proposé une réduction des corrélations de la TRI qui ne requiert que des constantes et la variance de la température  $\overline{T'^2}$ , pour

laquelle une équation de transport est résolue. Cette approche nécessite d'ajuster les constantes du modèle de façon *ad hoc* pour correspondre aux valeurs expérimentales.

La méthode, basée sur des calculs Monte Carlo, utilisée par Tessé *et al.* [60] ne requiert pas l'OTFA. Dans une première étape les équations de Navier Stokes moyennées en temps (RANS) sont résolues en utilisant un modèle  $k - \epsilon$  et un modèle de combustion simple (sans espèces mineures ni suies). Dans un deuxième temps un calcul Lagrangien est réalisé en suivant un grand nombre de particules fluides de l'écoulement. Cette procédure donne accès aux pdf des différentes grandeurs (température, concentration des espèces absorbantes) sur des volumes de contrôle. L'analyse de la puissance radiative émise dans une flamme turbulente en jet d'acétylène-air avec des suies montre que, dans le centre de la flamme l'émission est plus importante sans TRI mais elle est plus étendue avec la TRI (Fig. 4.9, d'après [60]). Par conséquent la puissance globale émise est plus importante avec la TRI (123,5W) que sans TRI (93W), la puissance nette avec la TRI (76,7W) est aussi plus importante que sans TRI (58,7W). Les pertes radiatives représentent 30% de l'énergie dégagée par les réactions chimiques.

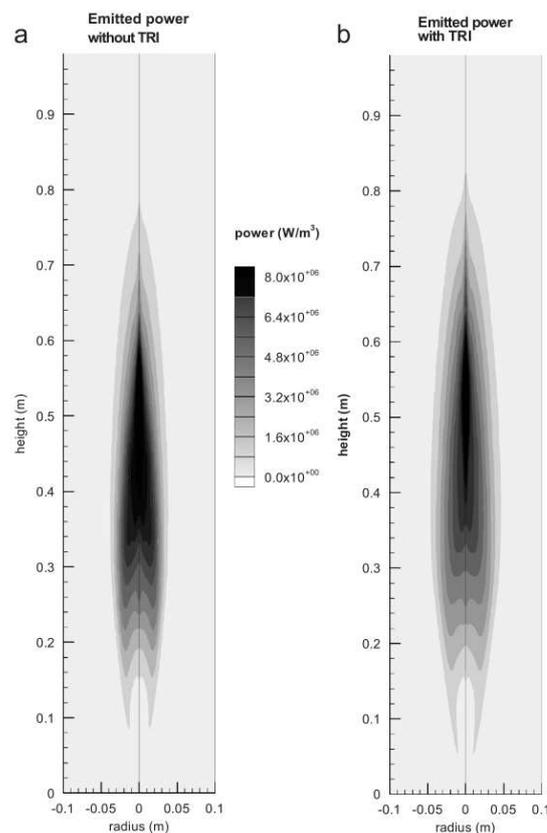


FIG. 4.9 – Contours prédits de la puissance radiative émise par une flamme lumineuse en jet d'air-éthylène [60] : (a) sans TRI et (b) avec TRI.

Wang et Modest [109] ont également réalisé un couplage en utilisant la méthode de Monte Carlo pour le rayonnement. Cette étude, proche de [107], est faite sur une flamme similaire à la flamme Sandia D mais dont le diamètre a été doublé et les vitesses divisées par deux. Les calculs réalisés sans TRI sous-estiment les pertes radia-

tives totales de 16%, ce qui montre la nécessité de la considérer. Par ailleurs ce travail montre que la validité de l'OTFA sur cette configuration.

### 4.3.3 Simulation Numérique Directe

Les exigences en ressources informatiques de la DNS sont trop importantes pour les applications pratiques et sont limitées à des configurations simples pour des nombres de Reynolds petits. Cependant la DNS apporte des nouvelles connaissances sur la TRI car toutes les fluctuations sont résolues ce qui permet de valider certaines approches et hypothèses [110].

Deshmukh, Modest et Haworth [111, 107, 112] ont étudié une flamme prémélangée statistiquement unidimensionnelle par la DNS. La méthode de Monte Carlo est utilisée pour résoudre l'ETR, dont la résolution est couplée avec l'écoulement. Les propriétés radiatives du milieu sont modélisées comme un gaz gris fictif représentant un mélange des produits d'une combustion d'hydrocarbure-air. Les contributions individuelles de chaque espèce sont isolées et quantifiées pour différentes épaisseurs optiques.

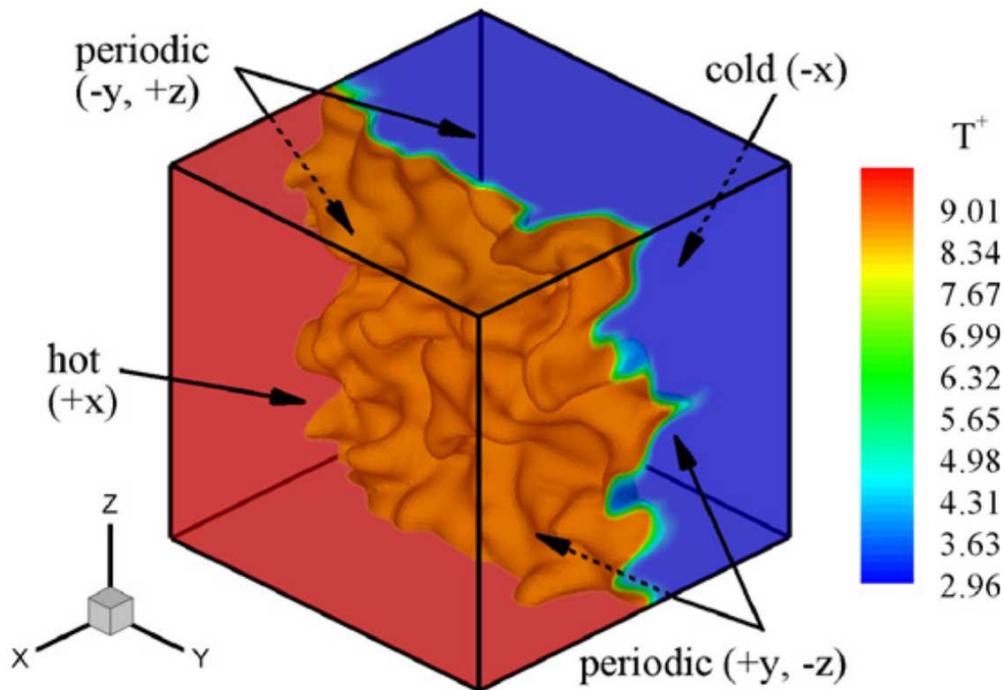


FIG. 4.10 – DNS pour une flamme de diffusion turbulente et statistiquement unidimensionnelle [111].

Les termes d'émission de la TRI sont étudiés à un instant donné, Fig. 4.13 (d'après [111]). L'importance des corrélations de la TRI a été étudiée de façon paramétrique avec l'épaisseur optique.

L'autocorrélation en température ( $R_{T^4}$ ) présente des pics dans la zone de diffusion proche de la flamme. La température dans cette région augmente rapidement à cause du transport des produits chauds de la flamme, du préchauffage des réactifs et de l'émission radiative de la flamme.

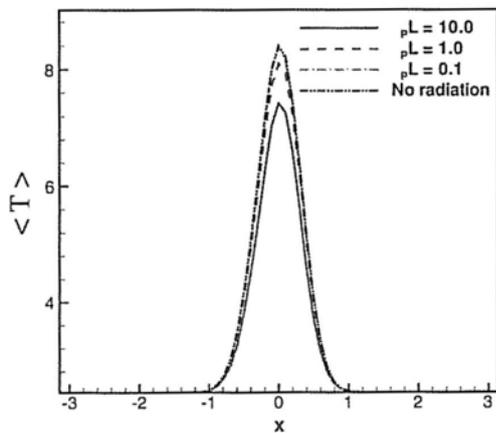


FIG. 4.11 – Température moyenne normalisée le long de l'axe de la flamme [111].

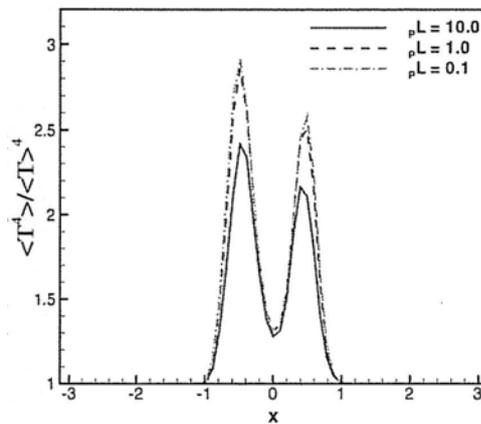


FIG. 4.12 – Autocorrélation en température pour différentes épaisseurs optiques [111].

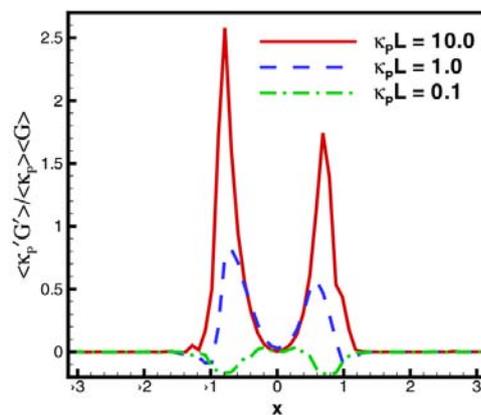
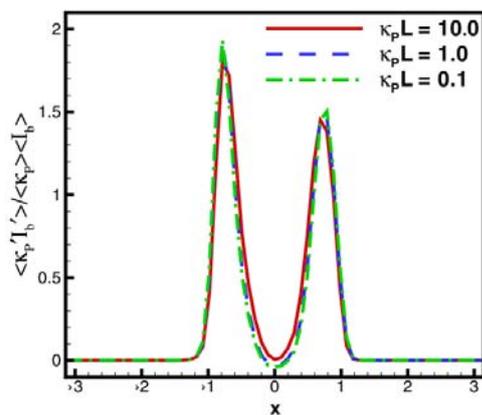


FIG. 4.13 – Corrélation croisée température-coefficient d'absorption ( $R_{Ib}$ ) et corrélation du rayonnement incident avec le coefficient d'absorption pour différentes épaisseurs optiques [111].

La corrélation croisée température coefficient d'absorption ( $R_{Ib}$ ) suit une tendance similaire.  $R_{Ib}$  est quasi nulle loin de la flamme où les réactifs sont froids et les fluctuations seulement causées par le mélange des espèces. Le coefficient de corrélation augmente rapidement dans la zone de diffusion et atteint un pic, ce qui indique que l'émission est augmentée dans cette région. Dans la région très proche de la flamme, le coefficient de corrélation décroît jusqu'à devenir négatif, ce qui indique qu'à cet endroit la TRI inhibe l'émission. Cela peut être expliqué par la forme fonctionnelle de  $\kappa_p$  avec la température et les concentrations, voir la discussion au paragraphe 4.1.1 sur  $R_{Ib}$ .

La corrélation intervenant sur le rayonnement incident a été estimée pour différentes épaisseurs optiques. Si elle est faible pour le cas optiquement mince, elle est du même ordre de grandeur que les autres corrélations pour les cas optiquement épais.

Cette étude montre que l'autocorrélation en température ( $R_{T^4}$ ), la corrélation croisée température-coefficient d'absorption ( $R_{Ib}$ ) et la corrélation du rayonnement incident sont toutes significatives à des épaisseurs optiques fortes ou intermédiaires. Ainsi négliger leur contribution peut entraîner des erreurs sur le calcul des termes radiatifs. Les corrélations atteignent leur maxima dans la zone de diffusion proche de la flamme.

L'extrapolation de résultats de DNS doit être faite avec prudence à des écoulements réactifs turbulents en raison de la nature fortement idéalisée des configurations. De plus, alors que le DNS est trop coûteuse en temps de calcul pour des applications pratiques.

## 4.4 CONCLUSION

La connaissance actuelle sur la TRI, induite par les fluctuations temporelles d'écoulement réactifs turbulents démontrent que ses effets sont importants et ne peuvent être négligés. Si des prédictions précise des niveaux de température et de flux aux parois sont requis, le rayonnement doit être pris en compte. La TRI résulte d'un couplage non linéaire entre les fluctuations température et de concentration des espèces qui interviennent dans le calcul de la luminance. Les conclusions principales peuvent être résumées ainsi :

- Les corrélations qui apparaissent dans l'ETR se décomposent en quatre groupes. Premièrement l'autocorrélation en température ( $R_{T^4}$ ); deuxièmement l'autocorrélation du coefficient d'absorption ( $R_{\kappa_p}$ ); troisièmement la corrélation croisée du coefficient d'absorption et de la température ( $R_{Ib}$ ); quatrièmement la corrélation entre le coefficient d'absorption et la luminance incidente.
- Les trois premières corrélations sont généralement calculées grâce aux pdf de l'écoulement. La pdf des grandeurs considérées pouvant être présumée ou résolue. La dernière corrélation est souvent négligée en faisant l'hypothèse de l'OTFA. De nombreux travaux se sont appuyés sur cette approximation avec des résultats positifs, bien que sont utilisation puisse être remise en cause dans le cas des fortes raies d'absorption.
- L'analyse de l'importance des différentes corrélations responsables de la TRI a montré que l'autocorrélation du coefficient d'absorption,  $R_{\kappa_p}$ , n'est pas très importante. L'autocorrélation en température,  $R_{T^4}$ , est très importante mais ne

suffit pas à décrire la TRI. Il faut tenir compte de la corrélation du coefficient d'absorption avec la température,  $R_{Ib}$ , pour décrire correctement la TRI.

- La TRI cause une augmentation de la luminance moyenne dans le cas où la corrélation coefficient d'absorption-température est positive le long du chemin optique.  $R_{Ib}$  est généralement positive dans les flammes non lumineuses, sauf dans la cas où la fraction de mélange est proche des conditions stoechiométriques. Bien que cette corrélation soit négative dans des flammes chargées de suies, la TRI peut continuer d'augmenter le bilan radiatif car l'autocorrélation en température reste plus importante.
- La TRI peut contribuer à une augmentation de la luminance dans des flammes de diffusion turbulente d'un facteur deux ou plus. Les données expérimentales dans des flammes non lumineuses révèlent une augmentation de la luminance moyenne de 100% dans les flammes d'hydrogène. Bien que cet effet soit plus limité dans des flammes de monoxyde de carbone, méthane et gaz naturel, il peut aller de 10% à plus de 50%. Dans le cas de flammes lumineuses, les données expérimentales montrent que la TRI cause une augmentation significative de la luminance moyenne : de 40% à 100% dans des flammes d'acétylène et de 50% à 300% dans des flammes d'éthylène.
- Les flammes se refroidissent à cause du rayonnement et les calculs couplés montrent que la TRI contribue à diminuer plus encore la température de flamme. Elle compte pour environ 1/3 de la perte totale dans le pic de température dans une flamme de diffusion turbulente libre de méthane/air. Ceci est suffisant pour avoir un impact important sur la prédiction d'émission de polluants.

Les effets notoires de la TRI ont été présenté dans le contexte RANS. Dans ce contexte, toutes les échelles de la turbulence sont moyennées pour le calcul des grandeur moyennes. La prise en compte du rayonnement en LES pose la question de l'influence de la turbulence aux échelles de sous-maille sur le rayonnement. **Existe-t-il un effet de la turbulence des échelles non résolues qui nécessite de développer un modèle de sous-maille pour le rayonnement?** D'autre part, les calculs LES donnent une grande quantité d'informations sur les fluctuations résolues et peuvent être utilisés comme un nouvel outil d'analyse de la TRI dans le contexte RANS pour calculer des corrélations à partir des fluctuations résolues.



# DIAGNOSTIC DE L'INTERACTION RAYONNEMENT TURBULENCE DANS LE CONTEXTE DE LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES

Dans le chapitre précédent, un résumé des différents travaux sur la TRI a été présenté. Toutes ces études ont montré un impact des fluctuations turbulentes sur les grandeurs moyennes (statistiques ou temporelles). La résolution de l'ETR à partir des grandeurs moyennes nécessite le développement de modèles pour la prise en compte des fluctuations.

Le même problème est traité ici dans le contexte LES, où il s'agit cette fois de caractériser l'influence des **fluctuations spatiales** de petite échelle (*i.e.* de sous-maille) sur le rayonnement. En effet si ces fluctuations sous-maille ont un effet important il faudra, pour résoudre l'ETR, en utilisant des champs de température et de concentration provenant d'une solution LES, donc filtrés, développer un modèle sous-maille. Dans la review proposée par Coelho [4] cette question fait partie des problèmes ouverts de la TRI. Au début de ce projet de thèse aucun travail n'existait dans ce domaine. Aussi l'étude préliminaire proposée dans ce chapitre a fait l'objet d'une publication dans Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences [113] dont le texte original est reproduit au paragraphe 5.1.

Par ailleurs la plupart des études ont considéré des flammes de diffusion. Or la majorité des flammes dans des configurations industrielles relèvent plutôt d'un régime partiellement prémélangé dont la flamme étudiée dans ce chapitre est un cas représentatif.

L'analyse conduite ici, dite *a priori*, cherche à déduire les effets d'une action de filtrage spatial sur une solution DNS pour analyser les conséquences induites sur le terme source radiatif. L'impact des fluctuations spatiales de sous-maille est ainsi quantifié. Nous proposons d'évaluer l'impact de ce filtrage en formulant le problème de la TRI avec le même formalisme et corrélations développées dans le contexte RANS.

## 5.1 ÉTUDE DE LA L'INTERACTION TURBULENCE-RAYONNEMENT DANS LE CONTEXTE DE LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES

Turkish J. Eng. Env. Sci.  
 31 (2007) , 371 – 381.  
 © TÜBİTAK

## Diagnosis of Turbulence Radiation Interaction in Turbulent Flames and Implications for Modeling in Large Eddy Simulation

**Damien POITOU, Mouna EL HAFI**

*RAPSODEE research centre - UMR EMAC-CNRS 2392 Ecole des Mines d'Albi  
 Carmaux - Campus Jarlard-81013 Albi Cedex 9, FRANCE*

*e-mail: poitou@enstimac.fr*

**Benedicte CUENOT**

*CERFACS - 42, Avenue Gaspard Coriolis - 31057 Toulouse Cedex 01, FRANCE*

Received 19.11.2007

### Abstract

An *a priori* study of the turbulence radiation interaction (TRI) is performed on numerical data from Direct Numerical Simulation (DNS) of a turbulent flame. The influence of the various correlations that appear in the radiative emission is investigated and their impact is evaluated in the context of Large Eddy Simulation (LES). In LES, only filtered quantities are computed, where the filter is the grid. The radiative emission is reconstructed first from the exact, then filtered solution variables and the sensitivity to the filter size is evaluated. Three approaches are used to take into account the subgrid scale correlations: the no-TRI, partial TRI and full TRI approaches. Results show that the full TRI is exact compared to the reference emission and that the partial TRI performs worse than the no-TRI for the studied configuration. This indicates that in the studied case, the TRI must be considered in LES in a full formulation.

**Key words:** Turbulence-Radiation Interaction, Large Eddy Simulation, turbulent combustion, radiative transfer.

### Introduction

Turbulence is one of the most common state of fluid flows, either in industrial applications or natural phenomena. They develop for example when the Reynolds number  $Re=UL/\nu$  (where  $U$  is the characteristic flow velocity,  $L$  is a flow characteristic length and  $\nu$  is the viscosity), reaches sufficiently high values. Although the general equations of fluid dynamics allow to describe both turbulent and laminar flows, computational constraints limit their resolution and different approaches may be used. Direct numerical simulation (DNS) reproduces exactly the turbulent flow but due to a high CPU cost it is restricted to simple geometries and moderate  $Re$ . On the contrary Reynolds-Average-Navier-Stokes (RANS) simulations are very fast and handle complex high  $Re$  flows, but compute only mean solutions of steady flows. The introduction

of Large Eddy Simulations (LES) gives access to filtered variables in high  $Re$ , non stationary complex turbulent flows. However it still requires modeling for the subgrid scale phenomena. In all these simulations the radiative transfer is often omitted because of its complexity and prohibitive calculation time. Nevertheless the concerns about energy savings and environment safeguarding impose significant increase of efficiency and decrease of pollutant emissions. As the production of polluting species, like nitrogen oxide ( $NO_x$ ) and soot, is known to be very sensitive to temperature levels, radiation has now become a key point in modern combustion simulations.

The importance of turbulence-radiation interaction (TRI) is by now well recognized in the scientific community (Coelho, 2007). This observation is supported by experimental studies, conducted mostly by Faeth and Gore and theirs co-workers over the last

twenty years for a number of fuels (Gore and Faeth, 1988; Kounalakis et al., 1989; Gore et al., 1987a). This experimental data demonstrate that, depending on the fuel, the radiative emission of a turbulent flame may be up to 50 to 300% higher than it would be evaluated from the mean values of temperature and absorption coefficient.

Theoretical studies provide an additional support for the importance of TRI in combustion applications. Cox (1977) shows that the temperature fluctuations may increase the radiative emission by 100% if the level of fluctuation exceeds 41%. He also suggests that the turbulent fluctuations may affect the absorption coefficient leading to an increase of flame emission. Kabashnikov and Myasnikova (1985) formalized the optically thin eddy approximation (OTFA) commonly used for closure models in TRI. They conclude that TRI may increase the radiative intensity by a factor two or three.

In addition, numerous numerical studies have been carried out to demonstrate the effects of TRI and to evaluate the impact of different parameters (Burns, 1999). In uncoupled calculations, the radiative transfer is computed from the temperature and species concentrations provided by experiment or combustion simulation results. The fluctuations are commonly generated by stochastic models. Predictions using stochastic models give results in good agreement with experimental data. With this approach Grosshandler et al. (Grosshandler and Joulain, 1986; Ficher et al. 1987) shows that TRI may increase the radiative intensity by a factor two. In the case of very sooty flames the emission may decrease because of the negative cross-correlation between soot volumetric fraction and temperature. Jeng et al. points out that TRI is weak in carbon monoxide/air flames (in order of 10%) (Gore et al., 1987b), moderate in methane/air flames (in order of 10% to 30%) (Jeng and Lai, 1984) and important in hydrogen/air flames (in order of 100%) (Gore et al., 1987a). Kounalakis, Faeth, Sivathanu, Zheng (Zheng et al., 2002, 2003) or Coelho (2004) also give results in agreement with an increase of radiative emission by TRI. Coupled calculations show that TRI contributes to lower the flame temperature and increase the wall fluxes. Adams and Smith (2003) report temperature reductions by 50K to 100K. These results are confirmed by the work of Li and Modest (2003) also showing that wall fluxes may increase by 40%. Coelho et al. (2003) find that the radiative heat loss may increase by 50% if taking into account

all TRI effects.

DNS is a powerful tool to diagnose different effects of TRI and to test usual approximations like the OTFA. It was used recently by Wu et al. (2005) to study TRI in the context of RANS, to evaluate the effect of the deviation from the mean of the solution variables. In LES, only the subgrid part of the fluctuations is unknown and it is a deviation from the local filtered value. Therefore the impact of TRI might be very different and it is the purpose of the present work to analyze it using the same methodology: the radiation calculations are performed as a post-processing treatment of available DNS results (Jiménez and Cuenot, 2007), i.e. in an uncoupled approach. In the following, section 1 gives the basic theoretical elements of the analysis, section 2 describes the configuration and the radiation calculations, and finally section 3 presents the results.

## Turbulence Radiation Interaction

### LES of turbulent flows

Turbulence is a complex phenomenon involving non-linear processes and developing over a wide range of spatial and temporal scales. In industrial applications it is characterized by the Reynolds number introduced above and some particular length scales such as the integral length scale  $l_e$  corresponding to the largest flow structures or the Kolmogorov scale  $\eta$  associated to the smallest eddies. In the LES description of turbulence, a low-pass filter is used to decompose turbulent quantities into two parts:

$$X = \bar{X} + X' \quad (1)$$

where  $\bar{X}$  is the filtered value and  $X'$  is the fluctuation. The filtered value is obtained by applying a spatial filter  $H$  (Poinot and Veynante, 2001):

$$\bar{X}(x) = \int_D H(x - x') X(x) dx' \quad (2)$$

where  $x$  is the spatial location vector. The filter is characterized by a size  $\Delta$ . In practice the filter is the grid itself and  $\Delta$  is directly linked to the mesh size. Note that in general  $\bar{\bar{X}} \neq \bar{X}$  and  $\bar{X}' \neq 0$ . The relations that are true in the case of a cut-off filter in the spectral space are  $\bar{\bar{X}} = \bar{X}$  and  $\bar{X}' = 0$ . However, as will be seen later, they are usually assumed to allow model derivations, but it will be also shown that the induced error is weak.

POITOU, EL HAFI, CUENOT

### Radiative transfer

In a non-scattering medium, the differential form of the radiative transfer equation is (Modest, 1993; Siegel and Howell, 2002):

$$\frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \frac{\partial I_\nu}{\partial s} = \kappa_\nu (I_{b\nu} - I_\nu) \quad (3)$$

with  $I_\nu$  the radiative intensity,  $I_{b\nu}$  the blackbody radiation intensity,  $\kappa_\nu$  the spectral absorption coefficient and  $s$  the coordinate along the line of sight.

### Spectral model

To take into account the spectral dependence of the radiative properties, several approaches are possible, listed here from the simplest to the highest complexity (and CPU cost): global models (gray gas or weighted sum of gray gases), narrow bands models and finally line-by-line models. In the context of combustion applications, obviously line-by-line models are the most accurate but they have a prohibitive CPU cost. On the other hand global models are not accurate enough in case of non-homogeneous and non-isothermal medium. In a combustion chamber the radiant species being able to contribute to the radiation are  $H_2O$ ,  $CO_2$  and should be included.

Therefore the Malkmus model using narrow bands represents the best compromise between accuracy and rapidity in this context. The average transmissivity for a narrow band  $\Delta\nu$  of a gas thickness layer  $l$  is expressed as:

$$\langle \tau \rangle_{\Delta\nu}(l) = \exp \left[ \Phi \left( 1 + \left( 1 + \frac{\langle \kappa \rangle_{\Delta\nu}}{\Phi} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (4)$$

where  $\langle \kappa \rangle_{\Delta\nu}$  is the average value of the absorption coefficient over the narrow band, and  $\Phi$  is the shape parameter.

Data for  $(\langle \kappa \rangle_{\Delta\nu}, \Phi)$  were taken from the spectroscopic database of Taine and Soufiani (Soufiani and Taine, 1997), that gives values for temperatures between 300K and 2900K and for 367 bands of widths  $\Delta\nu=25$  cm. In order to take into account the mixture composition several models are proposed by Liu et al. (2001). The one chosen has the main advantage to insure a good compromise between accuracy CPU time and is based on the optically thin limit, it provides  $\langle \kappa_{mix} \rangle$  and  $\Phi_{mix}$  for a mixture of  $N_{gas}$  of parameters  $\kappa_n$  and  $\Phi_n$ :

$$\langle \kappa_{mix} \rangle_{\Delta\nu} = \sum_{n=1}^{N_{gas}} \langle \kappa_n \rangle_{\Delta\nu} \quad (5)$$

$$\frac{\langle \kappa_{mix} \rangle_{\Delta\nu}^2}{\Phi_{mix}} = \sum_{n=1}^{N_{gas}} \frac{\langle \kappa_n \rangle_{\Delta\nu}^2}{\Phi_n} \quad (6)$$

The spectral dependence of  $\kappa$  is reconstructed from the above average quantities by the k-distribution method that consists in using a distribution function of the absorption coefficients  $f(\kappa)$  (Joseph, 2004). The average transmissivity on a narrow band is written as:

$$\langle \tau \rangle_{\Delta\nu}(l) = \int_0^\infty \exp(-\kappa l) f(\kappa) d\kappa \quad (7)$$

It is possible to determine  $f(\kappa)$  by observing that  $\langle \tau \rangle_{\Delta\nu}$  is the Laplace transform of  $f$ :

$$f(\kappa) = T.L.^{-1}(\langle \tau \rangle_{\Delta\nu}(l)) \quad (8)$$

In general  $f(\kappa)$  is not monotonous and two different values of  $\kappa$  may correspond to the same value of  $f$ . It is more convenient to introduce the cumulative sum of the probability density function:

$$g(\kappa) = \int_0^\kappa f(\kappa') d\kappa' \quad (9)$$

This function is now bijective and defined in the interval  $[0,1]$ , which makes it easy to inverse.

In addition for non-homogeneous and non-isothermal media it is necessary to use the so-called assumption of correlated-k, stating that the variations of pressure and temperature on the optical paths do not modify the spectrum or only in a uniform way. This approximation could be used in this application.

To inverse the function  $g(\kappa)$  a method developed by Lataillade (2001) based on tabulated values and linear interpolations is used. In this method the coefficients  $h_{(i,j)}$ , tabulated as functions of the discretized  $\Phi_i$  (over  $N_{quad}$  points) and for each spectral band  $j$ , allow to calculate  $\kappa_{mix(i,j)}$  as:

$$\kappa_{mix(i,j)} = h_{(i,j)}(\Phi_{mix,i}) \langle \kappa_{mix} \rangle_{\Delta\nu_j} \quad (10)$$

Finally, to calculate the Planck absorption coefficient, Eq. (14), the integral over each narrow band is calculated:

$$\begin{aligned} \kappa_P &= \frac{\pi}{\sigma T^4} \int_0^\infty \kappa_\nu I_{b\nu} d\nu \\ &= \sum_{i=1}^{N_{quad}} \sum_{j=1}^{N_{band}} w_i \kappa_{mix(i,j)} \langle I_b \rangle_{\Delta\nu_j} \Delta\nu_j \end{aligned} \quad (11)$$

In the above expression,  $\langle I_b \rangle_{\Delta\nu_j}$  represents the mean Planck function over the narrow band  $j$  of width  $\Delta\nu$ .

### Radiative flux

The divergence of the radiative flux  $\mathbf{q}$  is written as:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{q}} = \int_0^{+\infty} \kappa_\nu (4\pi I_{b\nu} - G_\nu) d\nu \quad (12)$$

where  $G_\nu = \int_{4\pi} I_\nu d\Omega$  is the direction-integrated incident radiation. By integrating over frequencies, one obtains:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{q}} = 4\sigma\kappa_P T^4 - \int_0^{+\infty} \kappa_\nu G_\nu d\nu \quad (13)$$

with  $\int_0^\infty I_{b\nu} d\nu = \sigma T^4 / \pi$  ( $\sigma$  being the Stephan constant), and introducing the mean Planck absorption coefficient:

$$\kappa_P = \frac{\int_0^\infty \kappa_\nu I_{b\nu} d\nu}{\int_0^\infty I_{b\nu} d\nu} = \frac{\pi}{\sigma T^4} \int_0^\infty \kappa_\nu I_{b\nu} d\nu \quad (14)$$

### Radiative transfer in turbulent flames

To study the radiative transfer and TRI in turbulent flames in the LES context, the filtered form of the radiative source term is investigated. By definition:

$$\overline{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{q}}} = 4\sigma\overline{\kappa_P T^4} - \int_0^{+\infty} \overline{\kappa_\nu G_\nu} d\nu \quad (15)$$

Usually in DNS calculations, the quantity  $\kappa_P L$ , where  $L$  is the length of the domain, is small and the medium is optically thin. In the studied case for example  $\kappa_P L = 10m^{-1} \times 3mm = 3 \cdot 10^{-2}$ . By considering the optically thin approximation (absorption in the medium is negligible), absorption exchanges occur mainly with the walls so that Eq. (15) reduces to:

$$\overline{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{q}}} = 4\sigma\overline{\kappa_P T^4} - \overline{\kappa_P T_\infty^4} = \nabla \cdot \mathbf{q}_E - \nabla \cdot \mathbf{q}_A \quad (16)$$

where  $T_\infty$  is the wall temperature. This approximation is commonly made in combustion applications, and fairly valid for small-scale non-luminous flames. Finally correlations of fluctuating quantities appear only in the emission term  $\nabla \cdot \mathbf{q}_E$  and the term  $\nabla \cdot \mathbf{q}_A$  is not investigated in the following.

The emission part of Eq. (15) reveals a correlation between the absorption coefficient and the fourth power of temperature. Using the decomposition of Eq. (1) for  $\kappa_P$ , one gets:

$$\overline{\kappa_P T^4} = \overline{\kappa_P} \overline{T^4} + \overline{\kappa'_P T^4} \quad (17)$$

where it is supposed that  $\overline{\overline{\kappa_P}} = \overline{\kappa_P}$  and  $\overline{\overline{T^4}} = \overline{T^4}$ . This allows to introduce two terms  $R_{T^4}$  and  $R_{Ib}$  as:

$$\begin{aligned} \overline{\kappa_P T^4} &= \overline{\kappa_P} \overline{T^4} \left( \frac{\overline{T^4}}{\overline{T^4}} + \frac{\overline{\kappa'_P T^4}}{\overline{\kappa_P} \overline{T^4}} \right) \\ &= \overline{\kappa_P} \overline{T^4} (R_{T^4} + R_{Ib}) \end{aligned} \quad (18)$$

These two distinct correlations,  $R_{T^4}$  and  $R_{Ib}$  indicate respectively the temperature auto-correlation and the cross-correlation between temperature and fluctuations of the absorption coefficient. Introducing now the temperature fluctuations, and assuming that  $\overline{\kappa'_P} = \overline{(T^4)'} = 0$ , it is possible to develop the two contributions as:

$$R_{T^4} = 1 + \frac{\overline{T'^2}}{\overline{T^2}} + \frac{\overline{T'^3}}{\overline{T}} + \frac{\overline{T'^4}}{\overline{T^4}} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} R_{Ib} &= 4 \frac{\overline{\kappa'_P T'}}{\overline{\kappa_P} \overline{T}} + 6 \frac{\overline{\kappa'_P T'^2}}{\overline{\kappa_P} \overline{T^2}} \\ &\quad + 4 \frac{\overline{\kappa'_P T'^3}}{\overline{\kappa_P} \overline{T^3}} + \frac{\overline{\kappa'_P T'^4}}{\overline{\kappa_P} \overline{T^4}} \end{aligned} \quad (20)$$

Assuming that the intensity of fluctuations is low, correlations of higher order than two may be dropped, leading to as proposed by Snegirev (2004):

$$R_{T^4} \approx 1 + \frac{\overline{T'^2}}{\overline{T^2}} \quad \text{and} \quad R_{Ib} \approx 4 \frac{\overline{\kappa'_P T'}}{\overline{\kappa_P} \overline{T}} \quad (21)$$

Assuming that the impact of species concentration fluctuations is negligible on  $\kappa_P$ , this has been checked numerically, a second-order Taylor expansion of  $\kappa_P(T) = \kappa_P(T + T')$  is performed:

$$\begin{aligned} \kappa_P(T) &= \kappa_P(\overline{T}) + T' \left( \frac{\partial \kappa_P}{\partial T} \right)_{\overline{T}} \\ &\quad + \frac{T'^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial T^2} \right)_{\overline{T}} + \dots \end{aligned} \quad (22)$$

and after filtering:

$$\overline{\kappa_P}(T) = \overline{\kappa_P}(\overline{T}) + \frac{\overline{T'^2}}{2} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial T^2} \right)_{\overline{T}} + \dots \quad (23)$$

Multiplying  $\kappa_P - \overline{\kappa_P} = \kappa'_P$  (from Eq. (22) and Eq. (23)), by  $T'$  and filtering, one finally obtains (at the second order):

$$R_{Ib} \approx 4 \frac{\overline{T'^2}}{\overline{\kappa_P} \overline{T}} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial T^2} \right)_{\overline{T}} \quad (24)$$

POITOU, EL HAFI, CUENOT

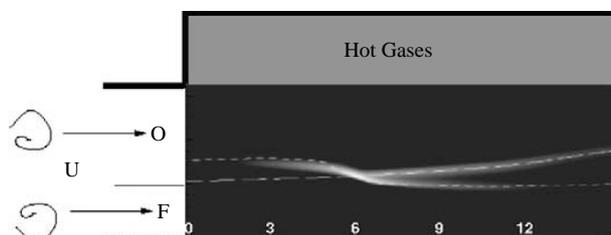
Not surprisingly, the cross-correlation between  $T$  and  $\kappa_P$  is expressed through the derivative  $\partial\kappa_P/\partial T$ .

From this development it is possible to identify three different approaches to describe the TRI process. The most simple is the no-TRI approach, where  $R_{T^4} = 1$  and  $R_{Ib} = 0$ , so where the TRI effects are ignored. In the partial TRI approach only the temperature auto-correlation is considered and  $R_{Ib} = 0$ , whereas in the full TRI approach both correlations are considered. These three approaches are evaluated and compared in the next sections.

### Configuration and Physical Model

#### DNS calculation

Results of the direct numerical simulation (DNS) of a reactive turbulent flame are used for the TRI analysis. The data were provided by Jiménez (Jiménez and Cuenot, 2007), and reproduced the stabilization of a triple flame by inert hot gas. The flow configuration is a mixing layer of diluted methane ( $CH_4$  20%,  $N_2$  80% in volume) and air, as seen on Figure 1. A hot gas layer is set above the air flow to stabilize the flame.

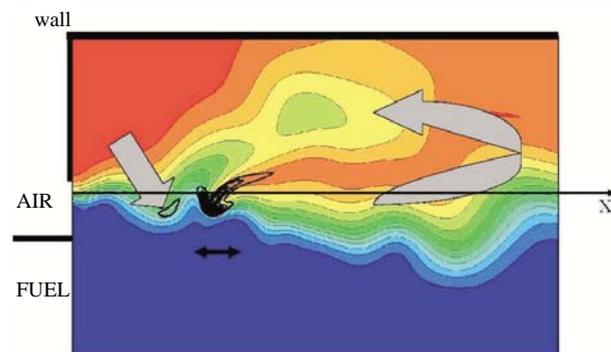


**Figure 1.** Simulation configuration and initial laminar flame. The rate of reaction is represented in levels of gray where the white represents the maximum. The lines represent the stoichiometric contour (long dash) and isotherm (short dash), where  $T_i = T_0 + 0.5(T_{ad} + T_0)$  (short dash), where  $T_0$  is the temperature for fresh gases and  $T_{ad}$  the adiabatic flame temperature (Jiménez and Cuenot, 2007).

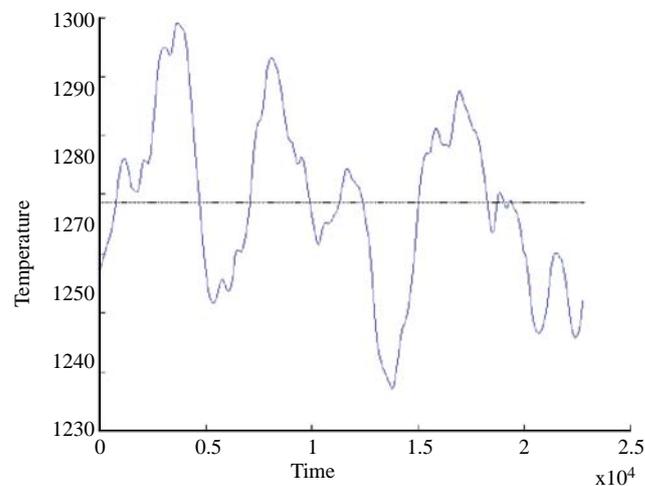
The DNS are run by solving the fully compressible conservation equations for mass, momentum, energy and chemical species in a two dimensional Cartesian domain with a grid of  $300 \times 200$  points, representing a physical space of  $3 \times 2$  mm (Jiménez and Cuenot, 2007).

After the laminar flame is stabilized, turbulence is injected into the domain to obtain a turbulent flame (Figure 2). The hot gas layer allows flame

stabilization by the recirculation of hot gas. A zone of recirculation is created in the left higher corner, where the hot gas are trapped, providing the energy necessary to stabilize the flame (shown by the left arrow on Figure 2), that otherwise would be convected downwards and finally blow off. The hot gas produced by combustion are brought back by the recirculation towards the left higher corner to maintain the reserve of energy (right arrow on Figure 2).



**Figure 2.** Instantaneous fields of temperature (in levels of gray) and isocontours of rate of reaction (black lines) in the turbulent flame.



**Figure 3.** Evolution of the space mean temperature versus time.

After sufficient time the average temperature remains close to constant, and the mean flow may be considered stationary, allowing to collect statistics (Figure 3).

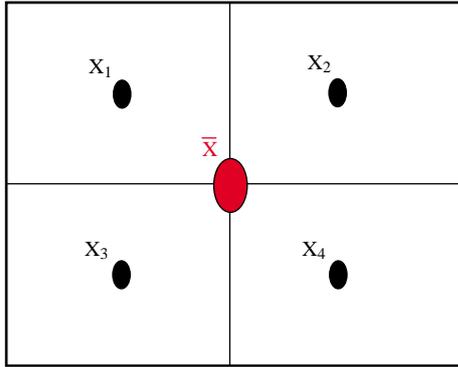
The available data include density, velocity, total energy, mass fraction of the reactants (fuel and oxidant) as well as the temperature. These two last variables are used in our study to calculate the radiative terms in a post-processing approach.

### TRI analysis

This study is performed in two steps. First, a diagnosis allows to evaluate the impact of filtering. Then modeling aspects are considered.

DNS results provide exact data for  $T$  and  $\kappa_P$  and give access to the exact emission  $\kappa_P T^4$ . DNS also allows to compute “exact” filtered quantities ( $\overline{T}, \overline{\kappa_P}, \overline{T^4} \dots$ ) and fluctuations ( $T', \kappa'_P, \dots$ ), as well as all types of correlations ( $\overline{\kappa'_P T'}, \dots$ ). By definition, and supposing all assumptions valid, the full TRI approach should recover the “exact” filtered radiation terms.

In a LES only the filtered values of temperature and species concentrations are available but the filtered value of  $T^4$  or the correlation  $\overline{\kappa'_P T'}$  for example are unknown. Models are therefore needed to reconstruct them and DNS is used to evaluate and validate them.



**Figure 4.** Example of mesh filter.

To reproduce the filter of a LES calculation, a box filter is applied to the DNS data as illustrated in Figure 4. In this example the size of the filter is  $2\Delta x$  ( $\Delta x$  being the mesh size of the uniform mesh used in DNS) and the filtered value is obtained by  $\overline{X} = (X_1 + X_2 + X_3 + X_4)/4$ . More generally the expression of the filtered value at a node  $(i, j)$  is:

$$\overline{X}_{i,j} = \frac{1}{N_{filt}^2} \sum_{k=i-N_{filt}/2}^{i+N_{filt}/2} \sum_{l=j-N_{filt}/2}^{j+N_{filt}/2} X_{kl} \quad (25)$$

where  $N_{filt}^2$  is the number of cells involved and  $X_{kl}$  is the exact value from the DNS. The filter size is  $N_{filt}\Delta x$ . The subgrid fluctuations are then given by the difference between the exact value (from the DNS) and the filtered value:

$$X'_{kl} = X_{kl} - \overline{X}_{ij} \quad (26)$$

The spatial mean over the whole domain of the intensity of fluctuation is then defined as:

$$X_{RMS} = \left\langle \frac{\sqrt{\overline{X'^2}}}{\overline{X}} \right\rangle \quad (27)$$

In a first step the analysis was done only along the central axis (in the longitudinal direction) of the configuration, where the fluctuations are most important and to better visualize the effects of filtering. In this case the filter operator is applied in the longitudinal direction only. The analysis of the total emission over the whole domain is made in a second step using a “box” filter as presented previously. Calculations were carried out for various filter sizes going from  $1 \times 1 \Delta x$  (i.e. no filter) to  $100 \times 100 \Delta x$ .

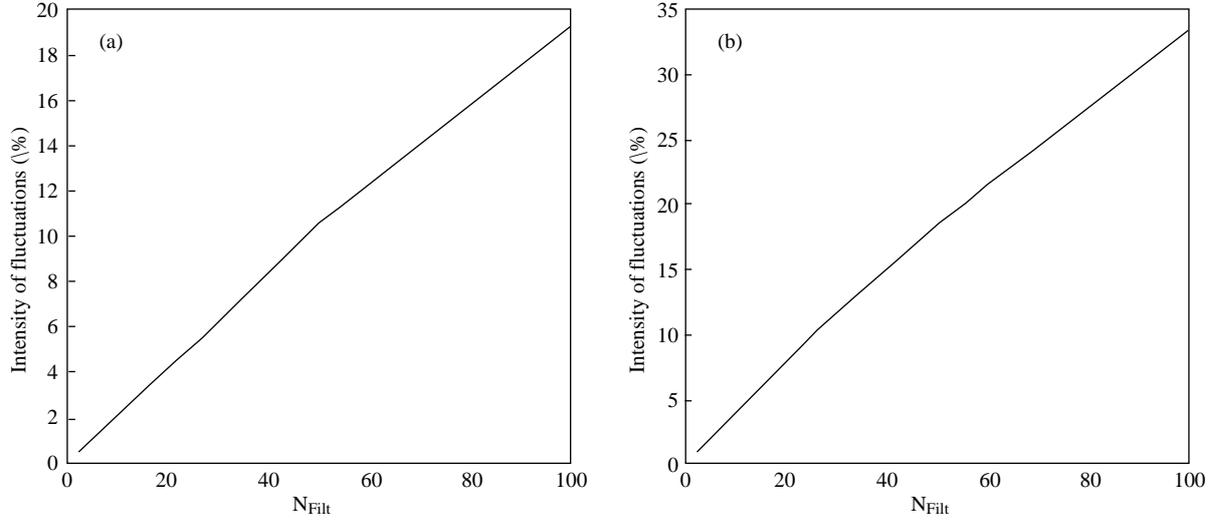
### Results

#### Filtered data analysis

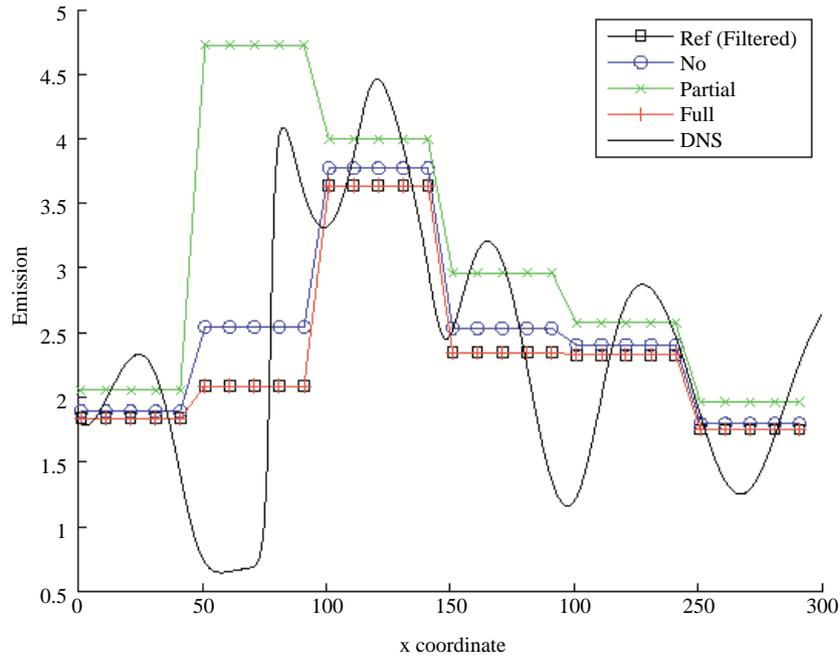
If the subgrid fluctuations are homogeneously distributed in the domain, the intensity  $X_{RMS}$  first increases with the filter size to reach a constant value after some point. If on the contrary there are important heterogeneities in the fluctuations, the intensity  $X_{RMS}$  also starts to increase with the filter size but may either continue to increase or decrease when heterogeneity is reached by the filtering box. In the studied case there are heterogeneities in temperature and species concentrations fluctuations, with important levels in the vicinity of the flame and much lower levels away from the flame. As shown on Figure 5, these homogeneities are sufficient to modify the slope of the curve  $X_{RMS}$  versus  $N_{filt}$  but not to change its sign that stays always positive up to the maximum size filter.

On Figure 6 the exact emission profile  $\nabla \cdot q_{E,DNS}$  is shown along the central axis (see Figure 2) and exhibits strong variations due to the presence of the flame. For comparison purposes, the exact filtered emission  $\nabla \cdot q_{E,ref}$  (called the reference emission) as well as the emission resulting from the no-TRI, partial TRI and full TRI approaches are also plotted. As expected the full TRI approach is in exact agreement with the reference, demonstrating the validity of the assumptions made on the filter operator. However what is more surprising is that the no TRI approach, although not as good as the full TRI, is by far much better than the partial TRI approach.

POITOU, EL HAFI, CUENOT



**Figure 5.** Fluctuation intensity over the whole domain, in percentage, of a. temperature, b. absorption coefficient, versus the filter size.



**Figure 6.** Emission profile along the flame axis for a filter of  $50 \Delta x$ .

Figure 7a shows the relative error along the flame axis, for different filter sizes, defined as:

$$\varepsilon = \left\langle \left( \frac{\nabla \cdot q_E}{\nabla \cdot q_{E,ref}} - 1 \right) \times 100 \right\rangle \quad (28)$$

where the mean  $\langle \rangle$  is taken along the axis. Also shown is the variance of the deviation from this mean value, represented by a vertical bar. The full TRI approach error is below  $10^{-6}$  and even has a tendency

to decrease when the filter size increases. On the contrary the no TRI and partial TRI approaches show errors up to 10% and even higher for the latter. This is due to the sign of the correlation between the temperature and the absorption coefficient, that is negative in all present cases. The two correlations ( $R_{T^4}$  and  $R_{Ib}$ ) have then opposite effects that are of the same order of magnitude and tend to unity. Taking into account only one of them introduces therefore

large errors. In this case TRI should never be taken into account in a partial way but always in a complete way, including all terms of the development.

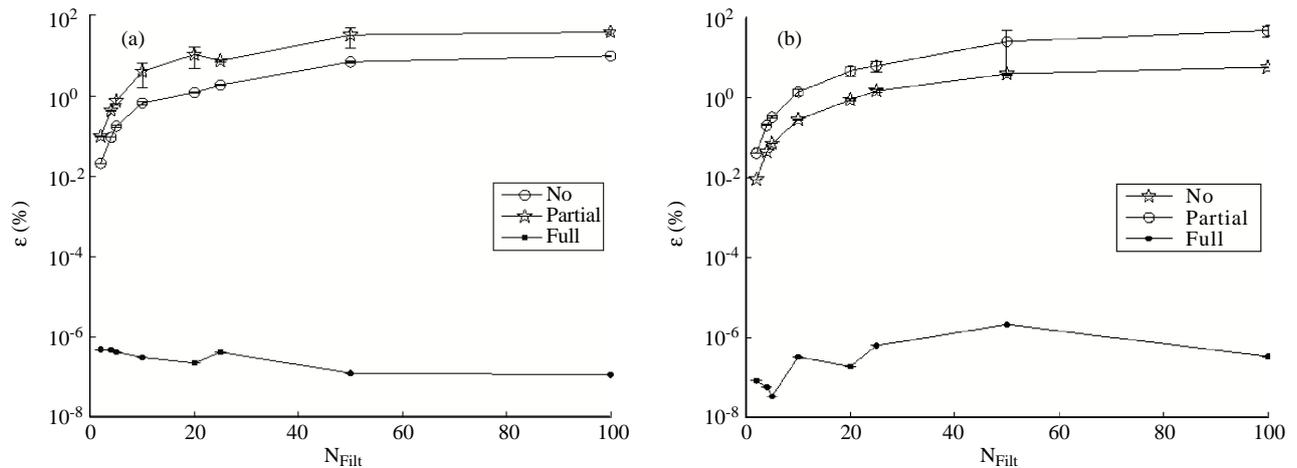
This result show a reverse trend to the vast majority of the TRI literature, because in this configuration the correlation  $R_{Ib}$  is negative, it is usually shown that TRI contribute to increase radiative emission . In the literature this correlation is generally positive for gaseous media, the absorption coefficient depends on both mole fractions of the species and temperature, and the dependence on mole fraction is dominant, except for mixture fraction close to the stoichiometric value (see Figure 6 in Deshmukh et al., 2006). In this configuration fluctuations responsible for TRI are only important along the central axis, this region is closed to stoichiometric values (see Figure 1) so only the temperature contribution on the absorption coefficient is important in a negative way.

The same analysis performed over the whole domain shows similar results and leads to the same conclusions, as seen on Figure 7b where the error curves are very similar to the curves plotted along the flame axis.

### Modeling

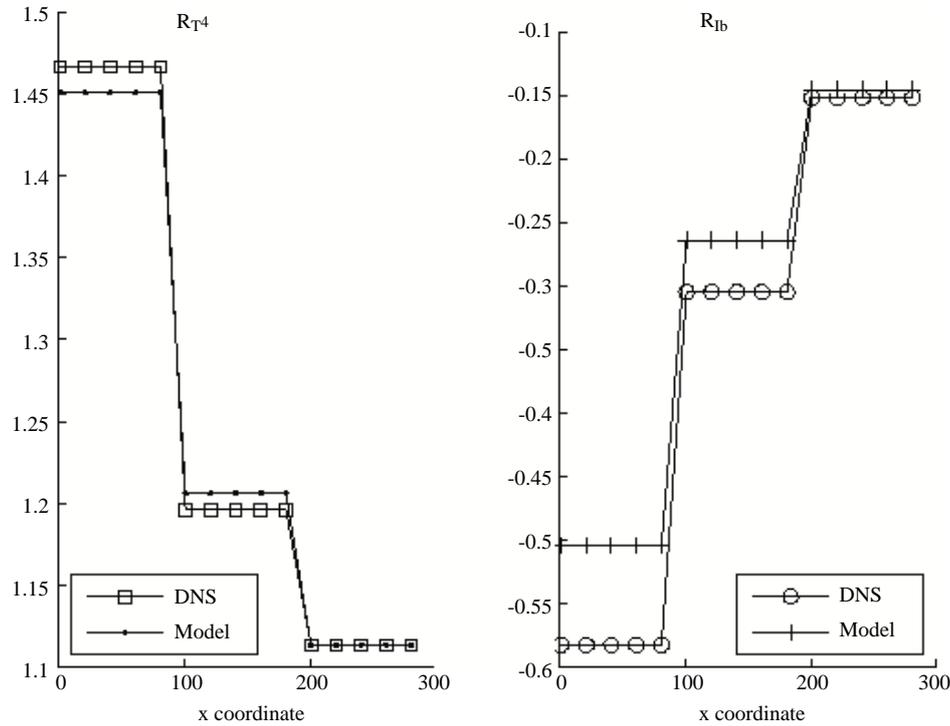
Taking into account the TRI implies then the reconstruction of both  $R_{T^4}$  and  $R_{Ib}$ . These correlations are not available in LES and need to be modeled.

They may be evaluated from Eq. (19) and Eq. (20), using the filtered temperature  $\overline{T}$  and absorption coefficient  $\overline{\kappa_P}$ , and their subgrid scale fluctuations  $T'$  and  $\kappa'_P$ . However LES gives  $\overline{T}$  but not  $T'$ , and several approaches may be used to calculate it, that are largely presented in the literature and are not developed here. For the purpose of the present work,  $T'$  is directly reconstructed from the DNS data, as well as  $\kappa'_P$  and the other correlations of Eq. (20). This was done along the central axis for a  $100 \Delta x$  filter. The relative error found on  $R_{T^4}$  and  $R_{Ib}$  is null. This is not surprising as Eq.(19) and Eq. (20) are exact expressions of the correlations in the full TRI approach. The difficulty is in the evaluation of the above-mentioned subgrid scale variables, that are unknown in LES. In an attempt to reduce the number of unknown  $\kappa'_P - T'$  correlations and high order moments of temperature, terms of higher order than two have been dropped in Eq. (19) and Eq. (20) leading to Eq. (21). This led to an error lying between 0.1% and 1% on  $R_{T^4}$ , still acceptable, but between 3% and 6% on  $R_{Ib}$ . Then, a first consideration towards LES modeling, Eq. (24) is tested. It requires the calculation of the term  $\partial\kappa_P/\partial T$ , that was evaluated with a simplified spectral model considering water emission only and the weighted sum of gray gas model. Second order correlations calculated from DNS and model based on a Taylor expansion are shown on Figure 8.



**Figure 7.** Relative error  $\varepsilon$ , a. along the axis of the flame, b. over the whole domain, versus the filter size for the various approaches.

POITOU, EL HAFI, CUENOT



**Figure 8.** Correlation for  $R_{T^4}$  and  $R_{I_b}$ , for a filter of  $100 \Delta x$  along the central axis. Calculated exactly from DNS and modeled by dropping correlation of higher order than two, the Taylor expansion is used to model  $R_{I_b}$ .

An important error on  $R_{I_b}$  appears for low values of the filter size (29%), due to the fact that the dependence of  $\kappa_P$  with the species was neglected, and for large filter sizes, temperature fluctuations dominate. Adding the species dependency of  $\kappa_P$  allowed to decrease the error to few percents for the low values of the filter size, but increased the error for larger sizes (from 10% to 16%). In this case, the best result is obtained around a filter size of  $20 \Delta x$ , corresponding to a filtering mesh size of 0.2 mm, which is approximately one order of magnitude smaller than usual LES mesh sizes. This preliminary results give first trends for  $R_{T^4}$  and  $R_{I_b}$  modeling. Further analysis is needed to better understand the physical mechanisms and improve the models.

## Conclusions

An a priori study was conducted from DNS of turbulent flames to characterize the influence of the various correlations that appear in the emission part of the radiative flux in the context of LES. The comparison between the exact and the filtered radiation emission calculated from the DNS and the same quantity calculated from the filtered data showed im-

portant discrepancies. Three approaches were defined in taking into account the various correlations in the radiation calculation: the no TRI ignores the correlations, the partial TRI involves the temperature auto-correlation only, and the full TRI adds the temperature/absorption coefficient correlation. As expected the full TRI is exact compared to the reference emission but the partial TRI approach performs worse than the no TRI approach. This shows that in the studied configuration, using only one of the two parts of the subgrid TRI is nonsense and that the full formulation should always be used. The effect of the filter size on the subgrid scale fluctuations is also investigated.

Simple models are evaluated to reconstruct the correlations in a LES framework. Results showed that if the dependency of the absorption coefficient with the species concentrations is included, good predictions may be obtained at small and moderate filter sizes. However all models failed for large filter sizes, in particular for the temperature-absorption coefficient correlation.

One major difficulty that was not addressed in the present paper is to evaluate subgrid scale variances and correlations needed by the radiation calcu-

lation and not directly available in a LES. This will be the next step of the present work, that will be now based on a posteriori analysis of LES calculations in both uncoupled and coupled way.

## Nomenclature

### Latin

|             |  |
|-------------|--|
| $f(\kappa)$ | distribution function of the absorption coefficient  |
| $g(\kappa)$ | cumulative sum of the probability density function $f(\kappa)$                                       |
| $G_\nu$     | direction-integrated incident radiation  |
| $H(x)$      | filter function  |
| $h_{(i,j)}$ | tabulated values of the function $h = g(\kappa)/\langle\kappa_{mix}\rangle$                          |
| $I_\nu$     | spectral radiation intensity   |
| $I_{b\nu}$  | Planck function  |
| $l$         | gas thickness layer  |
| $N_{filt}$  | filter size  |
| $N_{gas}$   | number of species  |
| $\vec{q}$   | radiative flux   |
| $q_A$       | absorption term  |
| $q_E$       | emission term  |
| $R_{Ib}$    | cross-correlation between temperature and fluctuations of fluctuations of the absorption coefficient |
| $R_{T^4}$   | autocorrelation temperature coefficient  |
| Re          | Reynold number   |
| $s$         | coordinate along the direction of propagation of a radiation beam                                    |
| T           | temperature  |
| $t$         | time   |
| $T.L.$      | Laplace transform  |
| $T_\infty$  | wall temperature   |
| $w$         | quadrature weight in the SNB-CK model  |
| $x$         | axial coordinate   |

### Greek

|                                    |   |
|------------------------------------|---|
| $\Delta x$                         | mesh size   |
| $\varepsilon$                      | relative error for each approach averaged along the flame axis for a given filter size                      |
| $\kappa$                           | absorption coefficient  |
| $\kappa_n$                         | spectral absorption coefficient over a narrow band $\Delta\nu$ for the $n$ th gas                           |
| $\kappa_P$                         | mean Planck coefficient   |
| $\kappa_\nu$                       | spectral absorption coefficient   |
| $\langle\kappa\rangle_{\Delta\nu}$ | spectral absorption coefficient averaged over a narrow band of width $\Delta\nu$                            |
| $\langle\kappa_{mix}\rangle$       | spectral absorption coefficient averaged over a narrow band of width $\Delta\nu$ for the mixture of species |
| $\Omega$                           | solid angle   |
| $\Phi$                             | shape parameter for the Malkmus model   |
| $\Phi_n$                           | shape parameter for the Malkmus model for the $n$ th gas  |
| $\Phi_{mix}$                       | shape parameter for the Malkmus model for the mixture of species  |
| $\sigma$                           | Stephan-Boltzmann constant  |
| $\langle\tau\rangle_{\Delta\nu}$   | spectral transmittivity averaged over a narrow band of width $\Delta\nu$                                    |

### Subscripts and Superscripts

|               |                             |
|---------------|-----------------------------|
| $( )_{RMS}$   | fluctuation intensity value |
| $\nu$         | wavenumber                  |
| $i$           | quadrature point            |
| $j$           | number of spectral band     |
| $( )'$        | fluctuating component       |
| $( \bar{ } )$ | filtered value              |

## References

- B.R. Adams and P.J. Smith, "Modelling of soot and turbulent-radiation coupling on radiative transfer in turbulent gaseous combustion", *Comb Sci Technol*, 109: 121–140, 2003.
- S.P. Burns, "Turbulence radiation interaction modeling in hydrocarbon pool fire simulation", SANDIA Report, SAND99-3190, 1999.
- P.J. Coelho, "Detailed numerical simulation of radiative transfer in a non-luminous turbulent jet diffusion flame", *Combustion and Flame*, 136: 481–492, 2004.
- P.J. Coelho, "Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows", *Progress in Energy and Combustion Science*, 33: 311–383, 2007.
- P.J. Coelho, O.J. Teerling, and D Roekaerts, "Spectral radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous turbulent jet diffusion flame", *Comb Flame*, 133: 75–91, 2003.
- G. Cox, "Radiant Heat Transfer in Turbulent Flames", *Combustion Science and Technology*, 17: 75–78, 1977.

POITOU, EL HAFI, CUENOT

- K.V. Deshmukh, M.F. Modest, and D.C. Haworth, "Direct numerical simulation of turbulence radiation in a statistically one-dimensional non premixed system", In Lybaert P Lemmonier D, Selçuk N, editor, Proceedings of Eurotherm seminar 78 - computational thermal radiation in participating media II, pages 235–244. Lavoisier, 2006.
- S.J. Fisher, B. Hardoium-Duparc, and W.L. Grosshandler, "The structure and radiation of an ethanol pool fire", *Combust Flame*, 70: 291–306, 1987.
- J.P. Gore and G.M. Faeth, "Structure and Radiation Properties of Luminous Turbulent Acetylene/Air Diffusion Flames", *Journal of Heat Transfer*, 110: 173–181, 1988.
- J.P. Gore, S.M. Jeng, and G.M. Faeth, "Spectral and Total Radiation Properties of Turbulent Hydrogen/Air Diffusion Flames", *Journal of Heat Transfer*, 109: 165–171, 1987a.
- J.P. Gore, S.M. Jeng, and G.M. Faeth, "Spectral and Total radiation proprieties of turbulent carbon monoxyde/air diffusion flames", *AIAA J*, 25: 339–345, 1987b.
- W.L. Grosshandler and P. Joulain, "The effect of large-scale fluctuations on flame radiation", *Prog Aeronaut Astronaut*, 52(105-123), 1986.
- S.M. Jeng and G.M. Faeth M.C. Lai, "Non luminous radiation in turbulent buoyant axisymmetric flames", *Combust Sci Technol*, 40: 41–53, 1984.
- C. Jiménez and B. Cuenot, "DNS study of stabilisation of turbulent triple flames by hot gases", In The Combustion Institute, editor, *Proceedings of the combustion institute*, volume 31(I), pages 1649–1656, 2007.
- D. Joseph, "Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels", PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004.
- V.P. Kabashnikov and G.I. Myasiwkova, "Thermal Radiation in Turbulent Flows - Temperature and Concentration Fluctuations", *Heat Transfer - Soviet Research*, 17(6): 116–125, 1985.
- M.E. Kounalakis, J.P. Gore, and G.M. Faeth, "Mean and fluctuating radiation proprieties of non premixed turbulent carbon monoxide/air flames", *Journal of Heat Transfer*, 111: 1021–1030, 1989.
- A. De Guilhem De Lataillade, "Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans des système en combustion", PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2001.
- G. Li and M.F. Modest, "Importance of turbulence radiation interactions in turbulent diffusion jet flames", *J Heat Transf*, 125: 831–838, 2003.
- F. Liu, G.J. Smallwood, and O.L. Gülder, "Application of the statistical narrow-band correlated-k method to no grey gas radiation in mixtures ; Approximate treatment of overlapping bands", *J Quant Spectrosc Radiative Transfer*, 68: 401–417, 2001.
- M.F. Modest, "Radiative Heat Transfert", Mc Graw Hill International Editions, 1993.
- T. Poinot and D. Veynante, "Theoretical and Numerical Combustion", Edwards, 2001.
- R. Siegel and J.R. Howell, "Thermal Radiation Heat Transfer", Taylor and Francis, 4th edition edition, 2002.
- A.Y. Snegriev, "Statistical modelling of thermal radiation transfer in buoyant turbulent diffusion flames", *Comb Flame*, 136: 51–71, 2004.
- A. Soufiani and J. Taine, "High temperature gas radiative propriety parameters of statistical narrow-band model for  $H_2O$ ,  $CO_2$  and  $CO$  and correlated-K model for  $H_2O$  and  $CO_2$ ", Technical note in *International Journal of Heat and mass transfer*, 40: 987–991, 1997.
- Y. Wu, D.C. Haworth, M.F. Modest, and B. Cuenot, "Direct numerical simulation of turbulent radiation interaction in premixed combustion systems", *Proc Combust Int*, 30: 639–646, 2005.
- Y. Zheng, Y.R. Sivathanu, and J.P. Gore, "Measurements and stochastic time and space series simulations of spectral radiations intensities for turbulent non-premixed and partially premixed flames", *Proc Comb Inst*, 29: 1957–1963, 2002.
- Y. Zheng, R.S. Barlow, and J.P. Gore, "Spectral radiation proprieties of partially premixed turbulent flames", *Journal of Heat Transfer*, 125(1065-1073), 2003.

Erratum :

- Page 372, dernier paragraphe :  $\overline{\overline{X}} \neq \overline{X}$  au lieu de  $\overline{X} \neq \overline{X}$  et  $\overline{\overline{X}} = \overline{X}$  au lieu de  $\overline{X} = \overline{X}$ .
- Page 374, Eq. 24 :  $R_{I_b} \approx 4 \frac{T^2}{\kappa_P T} \left( \frac{\partial \kappa_P}{\partial T} \right)$  au lieu de  $R_{I_b} \approx 4 \frac{T^2}{\kappa_P T} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial^2 T} \right)$ .

## 5.2 DISCUSSIONS

Dans le paragraphe 5.1, la méthodologie développée dans le contexte RANS est appliquée dans le contexte LES. En utilisant l'hypothèse de milieu optiquement fin, seul l'impact de la TRI sur le terme d'émission a été évalué.

En suivant l'approche développée en RANS, trois approches ont été utilisées pour comparer l'émission exacte de la DNS filtrée et l'émission calculée à partir des champs filtrés. Il faut noter que l'impact de l'autocorrélation  $R_{\kappa_P}$  n'a pas été pris en compte dans cette étude. On observe que si les fluctuations sous-maille atteignent une intensité suffisamment importante ( $\sim 20\%$  pour une taille de filtre de  $100\Delta x$ , voir Fig. 5) un effet sensible existe sur le terme d'émission (erreur entre 6% et 40% selon l'approche considérée pour un filtre de  $100\Delta x$ ). Ces résultats sont discutés plus en détails dans cette section.

### 5.2.1 TRI complète, TRI partielle

On rappelle que la TRI partielle ne considère que de l'autocorrélation en température  $R_{T^4}$  alors que la TRI complète tient compte de la corrélation croisée température-coefficient d'absorption  $R_{I_b}$ . On vérifie tout d'abord que l'approche TRI complète est suffisante pour reconstruire exactement le terme d'émission de référence filtré (cf. paragraphe « Filtered data analysis »). Cela montre la validité la méthode d'analyse issue du contexte RANS et appliquée avec des opérateurs de filtrage.

Dans la configuration étudiée l'approche de TRI partielle n'est pas suffisante pour reconstruire correctement l'émission et induit même une erreur plus importante que dans l'approche sans TRI. Ceci est dû aux signes opposés des corrélations  $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$ , qui se compensent dans la TRI complète. Cet effet est en contradiction avec plusieurs études RANS présentées précédemment, qui en majorité tendent à montrer que les deux corrélations  $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$  sont toutes deux positives.

Afin de vérifier que cet effet n'est pas dû au filtrage spatial, un calcul de moyenne dans le contexte RANS est été réalisé. L'émission moyenne sur tout le domaine est calculée puis moyennée en temps en utilisant les 3 approches (sans, partielle, complète) pour reconstruire les corrélations temporelles. Le tableau 5.2.1 donne les résultats obtenus. L'approche de la TRI partielle donne toujours une erreur plus importante que l'approche sans TRI. Cet effet est donc bien lié à la configuration elle-même où la corrélation  $R_{I_b}$  est fortement négative.

Cela s'explique par une double dépendance à la concentration et à la température du coefficient d'absorption (comme expliqué dans [111] et repris dans le paragraphe 4.1.1). Dans l'Eq. 24 de l'article au paragraphe 5.1, la dépendance aux concentrations a été négligée. Pour prendre en compte l'influence des fluctuations

| Référence  | Sans TRI   | TRI partielle  | TRI complète  |
|--|--|--|---|
| $\langle \kappa_P T^4 \rangle$<br>$2.2425 \cdot 10^{12}$ | $\langle \kappa_P \rangle \langle T \rangle^4$<br>$2.2227 \cdot 10^{12}$ | $\langle \kappa_P \rangle \langle T \rangle^4 R_{T^4}$<br>$3.7293 \cdot 10^{13}$ | $\langle \kappa_P \rangle \langle T \rangle^4 (R_{T^4} + R_{Ib})$<br>$2.2425 \cdot 10^{12}$ |
| Erreur relative $\epsilon =$                             | 13,83%   | 66,31%   | $4,55 \cdot 10^{-7}\%$  |

TAB. 5.1 – Approches de TRI : sans, partielle, complète dans le contexte RANS sur la configuration étudiée.

de concentration, un développement de Taylor au deuxième ordre de  $\kappa_P(T, Y) = \kappa_P(\bar{T} + T', \bar{Y} + Y')$  est utilisé :

$$\begin{aligned} \kappa_P(T, Y) = & \kappa_P(\bar{T}) + T' \left( \frac{\partial \kappa_P}{\partial T} \right)_{\bar{T}} + Y' \left( \frac{\partial \kappa_P}{\partial Y} \right)_{\bar{Y}} \\ & + \frac{T'^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial T^2} \right)_{\bar{T}} + \frac{Y'^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial Y^2} \right)_{\bar{Y}} + \frac{T'Y'}{2} \left( \frac{\partial^2 \kappa_P}{\partial T \partial Y} \right)_{\bar{T}} \end{aligned} \quad (5.1)$$

En ne gardant que les termes de premier ordre une expression approchée de la corrélation  $R_{Ib}$  peut être donnée :

$$R_{Ib} \approx \frac{4}{\bar{\kappa} \bar{T}} \left( \overline{T'^2} \left( \frac{\partial \kappa_P}{\partial T} \right)_{\bar{T}} + \overline{T'Y'} \left( \frac{\partial \kappa_P}{\partial Y} \right)_{\bar{Y}} \right) \quad (5.2)$$

Le coefficient moyen de Planck ( $\kappa_P$ ) a une dépendance inversement proportionnelle à  $T$ , illustrée sur pour un mélange  $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$  le par le cas SNBcK de la Fig. 5.5, et proportionnelle aux concentrations. Il y a donc une compétition entre la température (terme en  $\frac{\partial \kappa_P}{\partial T} \leq 0$ ) et les concentrations (terme en  $\frac{\partial \kappa_P}{\partial Y} \geq 0$ ).

Le calcul des différents termes de  $R_{Ib}$  moyennés sur tout le domaine donne les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned} - \left\langle \overline{T'^2} \right\rangle &= 6.83 \cdot 10^4 K^2, \\ - \left\langle \overline{\frac{\partial \kappa_P}{\partial T}} \right\rangle &= -1.50 \cdot 10^{-3} m^{-1} K^{-1}, \\ - \left\langle \overline{T'Y'} \right\rangle &= 1.27 K, \\ - \left\langle \overline{\frac{\partial \kappa_P}{\partial Y}} \right\rangle &= 3.53 m^{-1}. \end{aligned}$$

ainsi le premier terme de l'équation 5.2 est de l'ordre de  $-100$  et le second de l'ordre de  $4,5$ .

La corrélation des fluctuations de concentration est très faible comparée à la variance de température. Pour confirmer ce résultat, la densité de probabilité est représentée pour la température (Fig. 5.1) et pour les concentrations de  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  (Fig. 5.2). Ces densités de probabilité ont été obtenues par moyenne temporelle sur tout le domaine. Les distributions de concentrations ont un comportement monomodal avec des pics très étroits (peu de fluctuations). La distribution de température a un comportement bi-modal, par la présence de gaz frais et de gaz brûlés, avec des pic très étalé (beaucoup de fluctuations). Les Fig. 5.3 et 5.4 donnent des champs instantanés de température et de  $\text{H}_2\text{O}$ . On constate que la zone de recirculation de la flamme rend la configuration très homogène en concentration excepté près de la zone de réaction (voir Fig. 2 de l'article). Ce résultat est donc lié à la configuration où la zone de recirculation homogénéise les produits sur le domaine.

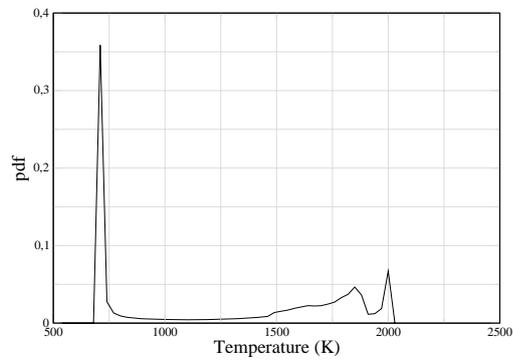


FIG. 5.1 – Densité de probabilité de la température.

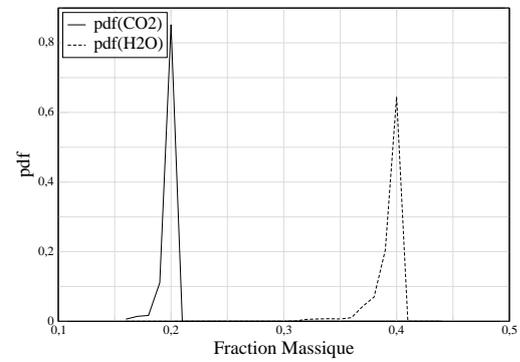


FIG. 5.2 – Densité de probabilité des concentrations.

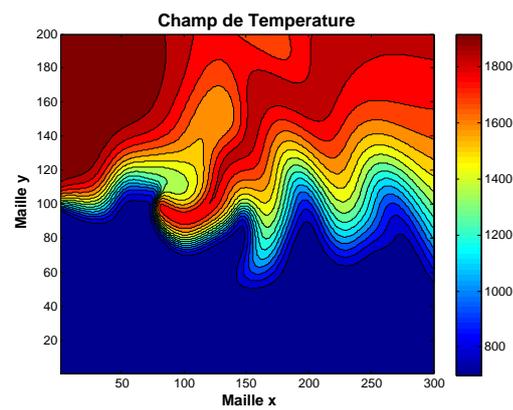


FIG. 5.3 – Champ instantané de température.

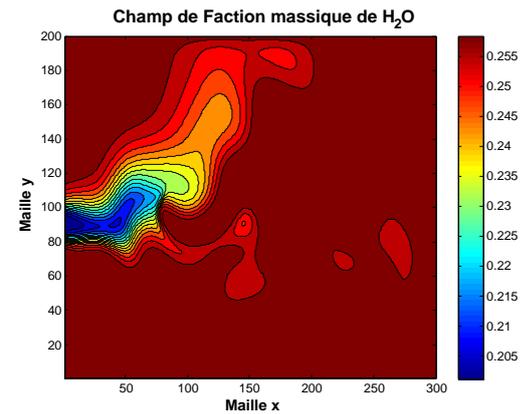


FIG. 5.4 – Champ instantané de H<sub>2</sub>O.

### 5.2.2 Modèle spectral

Le diagnostic sur le filtrage a été réalisé en utilisant un modèle SNBcK pour calculer le coefficient moyen de Planck, comme cela est expliqué dans le paragraphe « Spectral Model » de l'article. Dans le paragraphe « Modeling » de l'article un modèle plus simple a été utilisé pour calculer  $\kappa_P$  et  $\partial\kappa_P/\partial T$ . C'est un modèle en somme pondérée de gaz gris qui a déjà été utilisé dans des études antérieures [112].

Les données fournies par SANDIA [114] utilisées ne considèrent que l'absorption de H<sub>2</sub>O. Ces données permettent d'estimer le coefficient moyen de Planck par une expression polynomiale de la température, dont les coefficients, ajustés pour chaque gaz, sont de la forme suivante :

$$\kappa_P = Y_{gaz} \sum_{i=0}^5 c_i \times \left(\frac{1000}{T}\right)^i \quad (5.3)$$

où  $Y_{gaz}$  est la fraction massique du gaz considéré et  $c_i$  les coefficients du polynôme.

Une limite majeure d'un tel modèle est de ne pas calculer correctement le coefficient d'absorption pour un mélange, comme le montre la Fig. 5.5. Le coefficient d'absorption de Planck est représenté en fonction de la température pour un mélange H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> de concentration. Le résultat du mélange calculé par le modèle SNBcK est très différent de celui de la somme de l'absorption en somme de gaz gris de deux gaz. Ce modèle plus simple a permis de calculer simplement le terme en  $\partial\kappa_P/\partial T$  pour montrer qu'il était possible de reconstruire les corrélations dans une approche de modélisation.

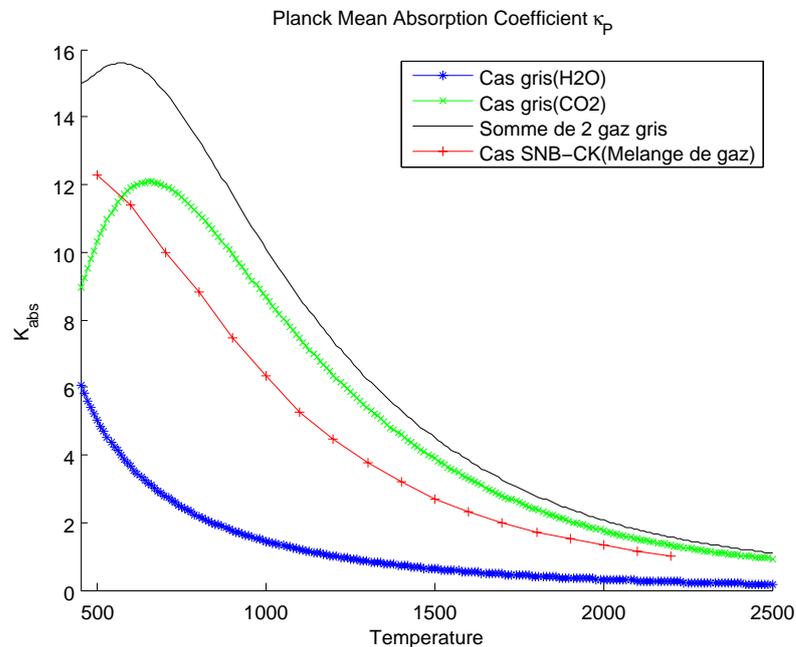


FIG. 5.5 – Evolution du coefficient d'absorption pour un mélange  $Y_{CO_2} = 0.2589$  et  $Y_{H_2O} = 0.3164$  avec un modèle somme de gaz gris et un modèle SNB-cK.

### 5.2.3 Taille de Filtre

Une large gamme de tailles de filtres a été étudiée allant de  $2\Delta x$  jusqu'à une taille maximale de  $100\Delta x$ , ce qui peut être discutable du point de vue de la résolution de la turbulence en LES. La Fig. 5.6 illustre les fréquences de coupure associées aux spectres de la turbulence de la configuration étudiée. Les plus grandes tailles de filtre sont largement dans la zone inertielle de la turbulence.

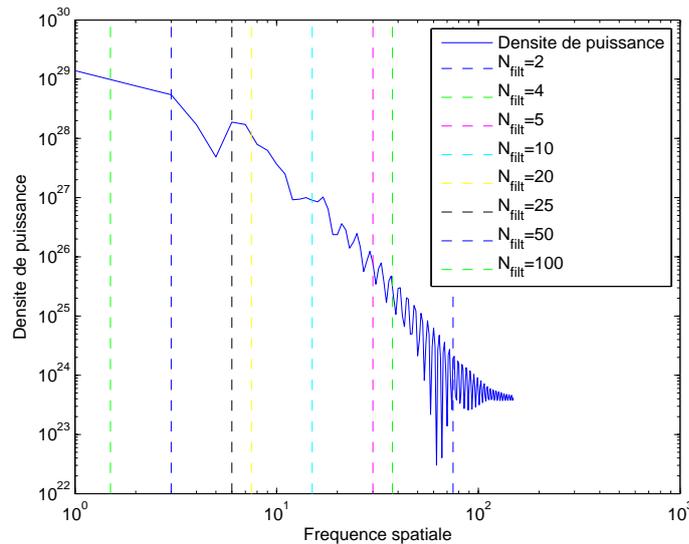


FIG. 5.6 – Densité spectrale de puissance de la température le long de l'axe central.

En réalité la taille des mailles d'un calcul LES, ou la taille du filtre, est plutôt de l'ordre de  $20\Delta x$ . Pour cette taille de filtre, l'erreur commise est de l'ordre de 1% pour l'approche sans TRI (Fig. 7 de l'article). **L'erreur maximale de l'approche sans TRI pour la plus grande taille de filtre reste inférieure à 10%**, comme illustré sur la Fig. 5.7 qui reprend les résultats présentés dans la Fig. 7b de l'article pour l'approche sans TRI avec une échelle linéaire.

Ces résultats sont à rapprocher de deux analyses menées récemment par Roger *et al.* [115] et Coelho [116]. Avec une stratégie similaire d'étude *a priori*, ces deux études ont consisté à filtrer des solutions d'écoulement turbulent pour évaluer les termes radiatifs. Dans ces deux études le transfert radiatif a entièrement été résolu sans faire l'hypothèse de milieu optiquement mince, c'est-à-dire que les corrélations apparaissant dans le terme d'absorption ont aussi été évaluées. L'autocorrélation du coefficient d'absorption  $R_{\kappa_p}$  a été supposée négligeable dans les deux cas. La première étude [115] utilise une méthode de lancer de rayon dans une turbulence homogène isotrope. Plusieurs filtres ont été testés, soit dans l'espace physique (filtres boîte), soit dans l'espace spectral (filtres passe-bas). Dans cette étude la corrélation  $R_{I_b}$  est de l'ordre de 10% et la corrélation du rayonnement incident avec le coefficient d'absorption de l'ordre de 1% pour les plus grandes tailles de filtre ( $32\Delta x$ ). En conclusion les auteurs suggèrent que la corrélation du terme incident peut être négligée et que  $\overline{\kappa_\nu G} \approx \overline{\kappa_\nu} \overline{G}$ . Cette conclusion est très similaire à l'OTFA faite dans le contexte RANS. Le pendant de cette approximation consisterait à dire, dans le contexte LES, que si l'épaisseur optique de la maille LES ( $\kappa_\nu \Delta_{LES}$ ) est faible, alors les fluctuations de sous mailles sont décorréliées

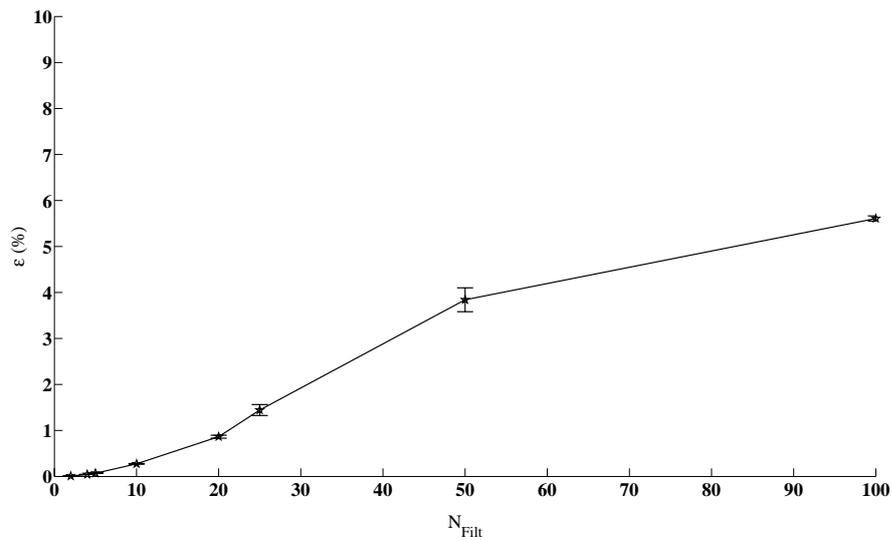


FIG. 5.7 – Erreur relative sur tout le domaine en fonction de la taille du filtre pour l'approche sans TRI.

du rayonnement incident  $G$ . Bien que cette configuration soit académique et que l'extension de ces résultats à un cas d'écoulement réactif puisse être discutée les résultats vont dans le même sens que l'analyse menée précédemment.

Dans la deuxième étude Coelho [116] reprend la configuration de la flamme de diffusion Sandia D. Cette étude utilise des pdf présumées pour générer des fluctuations des variables considérées sur des grandeurs filtrées spatialement et montre que les effets de la TRI sont beaucoup plus faibles que dans le contexte RANS. De plus, les effets de la TRI en LES sont plus importants sur le terme d'émission que sur le terme d'absorption. Les erreurs les plus importantes commises en négligeant les corrélations de la TRI dans le calcul du terme source radiatif apparaissent sur les chemins optiques qui ne passent pas le centre de la flamme et où la turbulence est plus importante. Une modélisation des corrélations est proposée, basée sur un modèle de combustion à pdf pour calculer la valeur de termes d'émission filtrée. Le modèle de TRI permet d'obtenir d'excellents résultats sont obtenus avec une erreur moyenne inférieure à 0.3%.

#### 5.2.4 Maillage et rayonnement

L'étude systématique menée pour des grandes tailles de filtre, supérieures à  $20\Delta x$  ouvre la voie à la détermination d'un indicateur de maillage minimal pour le rayonnement. En effet lors de la mise en place d'un couplage rayonnement-combustion, le maillage fluide est souvent beaucoup trop fin pour les besoins du rayonnement car de nombreuses zones homogènes en température et en concentration sont présentes. Les temps de calcul associés au rayonnement étant relativement plus importants que ceux de la combustion mais aussi l'occupation mémoire, l'utilisation d'un maillage réduit devient intéressante. Il faut cependant s'assurer que cette réduction de maillage n'altère pas la précision du résultat.

Dans le paragraphe « Modelling » nous avons montré qu'il est possible de reconstruire correctement les corrélations à partir de la variance de la température, suggé-

rant que les fluctuations de température ont un rôle de premier ordre par rapport aux fluctuations de concentration. Dans une autre configuration les fluctuations de températures pourraient être plus importantes. Un indicateur peut donc être proposé pour réduire le nombre de mailles dans les zones homogènes en température et/ou en concentration et de conserver la maillage aussi fin que possible dans les zones où la variance de température et/ou de concentration est importante. Cet indicateur sera appliqué dans un calcul LES au chapitre 8 pour la construction d'un maillage plus grossier pour le rayonnement.

### 5.3 CONCLUSION

Dans ce chapitre, une étude *a priori* de l'interaction rayonnement-turbulence en LES a été menée en utilisant le formalisme développé dans le contexte RANS pour un milieu optiquement fin. L'interaction rayonnement-turbulence dans le contexte LES s'avère induire des corrélations moindres que dans le contexte RANS : pour les plus grandes tailles de filtre l'approche sans corrélation induit des erreurs restant inférieures à 10%, ce qui est en accord avec les études menées par la suite dans le même contexte [115, 116].

Un modèle simple basé sur un développement de Taylor, similaire à celui proposé par Snegirev [80], a montré que la variance (des fluctuations de sous-maille) de température était suffisante dans une première approche pour reconstruire les termes d'émission.

Enfin les résultats obtenus pour les plus grandes tailles de filtre, permettront de définir un indicateur de réduction de maillage pour le rayonnement, basé sur la variance de température  $\overline{T'^2}$ . Ce critère sera très utile pour la mise en place des calculs couplés sur des configurations complexes.



## **Troisième partie**

# **De l'influence du modèle de flamme épaissie sur le rayonnement**



## Introduction

Dans cette partie l'influence du modèle de combustion turbulente sur le rayonnement est discuté. Le modèle de combustion étudié ici est le modèle de flamme épaissie [20, 21] qui consiste à appliquer une similitude d'échelle pour résoudre le front de flamme épaissi (tel qu'il soit résolu sur le maillage), tout en conservant les propriétés de la flamme.

D'un point de vue radiatif, un milieu est caractérisé par son épaisseur optique. Aussi le fait d'épaissir le front de flamme peut avoir une incidence importante sur les transferts radiatifs. Dans un premier chapitre, le rayonnement dans une flamme laminaire est étudiée pour plusieurs épaississements. La sensibilité à l'épaisseur optique du front de flamme épaissie est étudiée de façon paramétrique en ajoutant des suies au milieu pour le rendre optiquement plus épais. Dans un deuxième chapitre l'influence de l'épaississement sur l'interaction rayonnement-turbulence est discutée pour une situation instationnaire d'interaction flamme-vortex. L'objectif de cette étude est de déterminer si l'usage des modèles de combustion dans les simulations à grande échelle modifie de façon sensible les transferts radiatifs et s'il est correct d'effectuer un calcul radiatif sur une flamme ayant été épaissie.



# Sommaire

---

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| <b>6</b> | <b>Épaississement et rayonnement en laminaire</b>                       | <b>133</b> |
| 6.1      | CONFIGURATION . . . . .   | 134        |
| 6.2      | PROFILS DE FLAMME . . . . .   | 136        |
| 6.3      | INFLUENCE DE L'ÉPAISSISSEMENT SUR LES TERMES RADIATIFS . . . . .        | 136        |
| 6.4      | INFLUENCE DE L'ÉPAISSEUR OPTIQUE EN PRÉSENCE DE SUIES . . . . .         | 144        |
| 6.5      | CONCLUSION . . . . .  | 149        |
| <b>7</b> | <b>Influence de l'épaississement sur la TRI</b>                         | <b>151</b> |
| 7.1      | ÉTUDE <i>a priori</i> SUR UNE CONFIGURATION D'INTERACTION FLAMME-VORTEX | 151        |
| 7.2      | CONCLUSION . . . . .  | 158        |

---



# INFLUENCE DE L'ÉPAISSISSEMENT SUR LES ÉPAISSEURS OPTIQUES POUR UNE FLAMME LAMINAIRE

Le but de ce chapitre consiste à évaluer la modification des transferts radiatifs dans le front de flamme lorsqu'on applique le modèle de flamme épaissie, présenté au paragraphe 1.3.1. En effet la similitude d'échelle appliquée pour épaissir artificiellement le front de flamme peut modifier de façon sensible l'épaisseur optique du front de flamme et par conséquent les échanges radiatifs. Bien que les épaisseurs optiques de flamme soient faibles (terme en  $\exp(-\kappa l)$ ), les échanges radiatifs sont importants en raison du fort gradient de température entre les gaz frais et les gaz brûlés et peuvent donc se trouver modifiés.

Dans un premier temps on considère un cas laminaire. C'est un cas d'étude préalable en combustion qui permet de s'affranchir des complexités issues de la turbulence. Les études conduites en combustion turbulente pour des applications pratiques se placent le plus souvent dans le régime de flammelettes. Ce régime consiste à considérer que les plus petites échelles du système sont fixées par la combustion est donc par l'épaisseur de flamme (*i.e.* le choix du maillage en flamme épaissie en fonction de  $\delta_f^0$ ) et que la turbulence n'intervient qu'à des échelles supérieures. En régime de flammelettes la structure locale du front de flamme est supposée conserver les propriétés de la flamme laminaire c'est pourquoi il est important de bien comprendre ce cas. La Fig. 6.1 représente un front de flamme turbulent, « flame brush ».

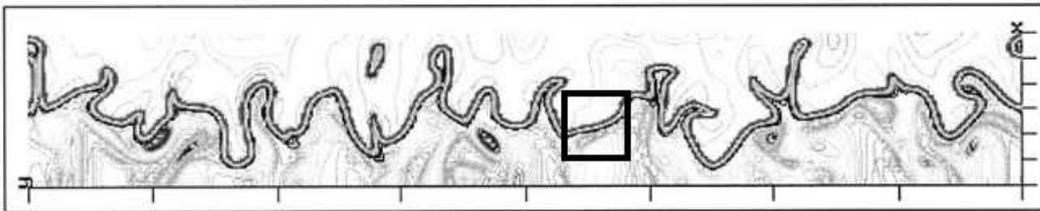


FIG. 6.1 – Front de flamme turbulent, en régime de flammelettes la structure locale du front de flamme (encadré) conserve les propriétés de la flamme laminaire, d'après [7].

## 6.1 CONFIGURATION

La configuration mono-dimensionnelle de la flamme laminaire est illustrée sur la Fig. 6.2. La flamme est une flamme de prémélange air/CH<sub>4</sub> avec une richesse de  $\phi = 0.8$ .

Le domaine physique est de 7 cm de long sur 2 cm de haut. Le maillage contient  $16000 \times 2$  cellules. La taille des mailles horizontales est  $\Delta x = 4,375 \cdot 10^{-6} m$ , largement suffisant pour résoudre le front de flamme et considérer cette simulation comme une DNS. Pour imposer une symétrie verticale les parois haute et basse ont une condition de périodicité pour la combustion. Le prémélange air/carburant est injecté par la gauche à la vitesse de flamme laminaire  $s_l^0 = 0,281 m.s^{-1}$  afin d'obtenir une flamme stationnaire dans le domaine. La chimie de la flamme est un schéma à 2 étapes pour décrire une flamme d'air/CH<sub>4</sub>. La température des gaz frais en entrée est de 300 K et la température des gaz brûlés est de 2010 K.

La flamme est résolue par AVBP en utilisant un schéma Lax-Wendroff. La solution initiale est produite par allumage du prémélange en imposant une zone chaude de gaz brûlés. Partant de cette solution initiale, le calcul converge vers une solution stationnaire en imposant comme vitesse d'entrée la vitesse du prémélange.

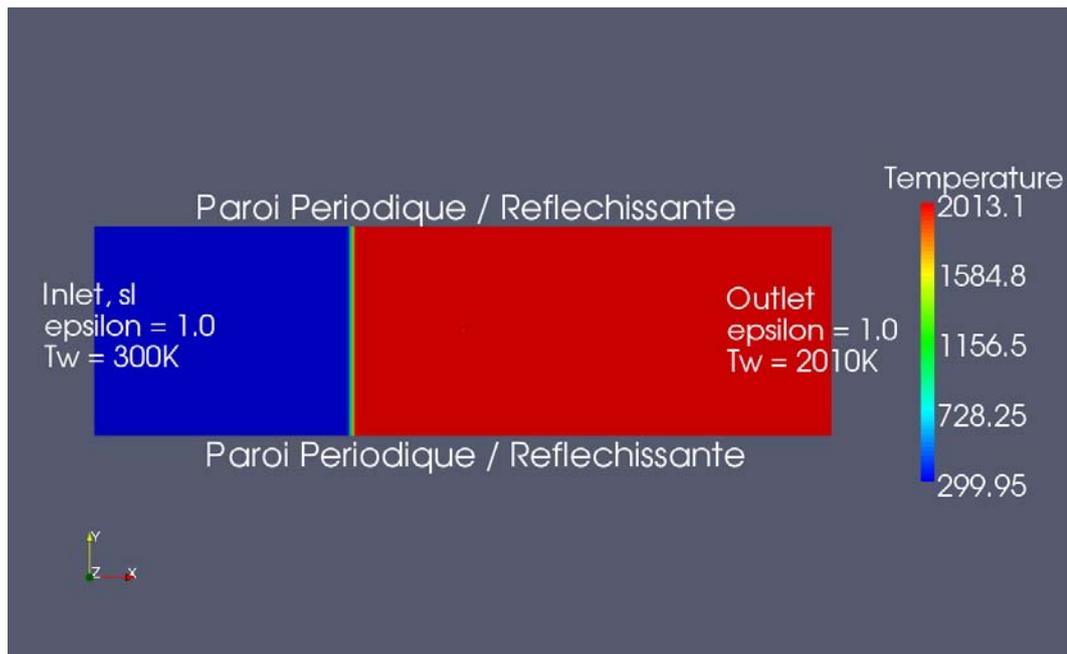


FIG. 6.2 – Configuration du calcul mono-dimensionnel pour le rayonnement et la combustion.

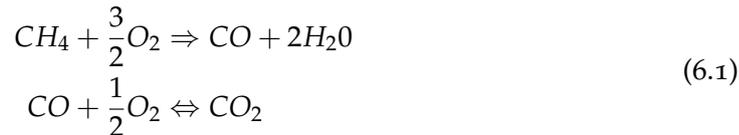
Le calcul radiatif a été réalisé avec PRISSMA par la méthode des DOM sur 24 directions. Un calcul avec 96 directions pour le cas non épaissi a permis de valider le calcul sur 24 directions. Les propriétés spectrales sont calculées à l'aide du modèle SNBcK.

| Paramètres    | $\alpha_i$ | $\beta_i$ | $A_i(\text{cgs})$    | $E_{a_i}(\text{cal.mol}^{-1})$ |
|---------------|------------|-----------|----------------------|--------------------------------|
| Réaction (I)  | +0.90      | +1,10     | $2,0 \times 10^{15}$ | 35000,0                        |
| Réaction (II) | +1.0       | +0.50     | $-2,0 \times 10^9$   | 12000,0                        |

TAB. 6.1 – Paramètres pour le modèle chimique de combustion du méthane à deux étapes.

### 6.1.1 Modélisation de la chimie

La chimie a été résolue avec un schéma à deux étapes :



Les taux de réaction correspondants sont données par :

$$\dot{\omega}_1 = A_1[\text{CH}_4]^{\alpha_1}[\text{O}_2]^{\beta_1} \exp(-E_{a_1}/RT) \quad (6.2)$$

$$\dot{\omega}_2 = A_2[\text{CO}_2]^{\alpha_2}[\text{O}_2]^{\beta_2} \exp(-E_{a_2}/RT) \quad (6.3)$$

où  $[X]$  est la fraction molaire de l'espèce  $X$ ,  $\alpha_i$  et  $\beta_i$ , les coefficients correspondants.  $A_i$  est le facteur pré-exponentiel,  $E_{a_i}$  est l'énergie d'activation.  $R$  et  $T$  sont respectivement la constante des gaz parfaits et la température. Les taux de réactions  $\dot{\omega}_i$  sont calculés à partir des équations 6.2 et 6.3. Les paramètres chimiques utilisés sont résumés dans le tableau 6.1.

### 6.1.2 Conditions aux limites pour le rayonnement

La question des conditions aux limites pour le rayonnement dans des configurations sans parois est sujet à discussions. Le rayonnement étant un processus de transfert à distance les échanges avec l'environnement peuvent être de premier ordre, d'autant plus dans les systèmes à faible épaisseur optique. Cependant l'environnement du front de flamme résolu n'étant pas connu *a priori*, la définition des conditions aux limites pour le rayonnement nécessite de faire hypothèses sur l'environnement de la flamme.

Dans le cas présent, des conditions limites de parois noires ont été utilisées ( $\epsilon = 1$ ), ce qui correspondrait à une épaisseur de gaz infinie à la température du gaz à la frontière en dehors du domaine. En effet si la couche de gaz est infinie tout le rayonnement sera absorbé par cette couche ce qui correspond bien au cas du corps noir. Cette étude ne se prétend donc pas être significativement représentative d'une configuration physique réelle mais elle permet néanmoins de comparer les échanges radiatifs pour différents épaississements de flamme.

La température à gauche est la température des gaz frais (300K) et la température à droite correspond à celle des gaz chauds (2010K). Pour reproduire une condition de périodicité, une condition de réflexion spéculaire a été imposée sur les parois haute et basse. Ceci permet, d'un point de vue radiatif, d'avoir une configuration infinie selon l'axe vertical. Les conditions aux limites sont résumées sur la Fig. 6.2.

## 6.2 PROFILS DE FLAMME

Pour étudier l'influence de l'épaississement plusieurs valeurs de facteur d'épaississement ont été choisies :  $F = 1$  (cas de référence non épaissi),  $F = 5$ ,  $F = 10$ ,  $F = 20$  et  $F = 30$ . Les champs intervenant dans le calcul du terme source radiatif, température, fractions molaires de  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  ont été représentés respectivement sur les Fig. 6.3 à 6.6.

Le modèle de flamme épaissi conserve la vitesse de flamme : la vitesse d'entrée imposée pour conserver la flamme stationnaire reste la même quel que soit l'épaississement. L'épaississement conserve également les valeurs minimales et maximales de température et de concentration. Les Fig. 6.3 à 6.6 montrent que l'épaississement dilate le front de flamme de façon homothétique. Cependant certaines quantités ne sont pas conservées, par exemple l'intégrale de la concentration de  $CO$  est modifiée par l'épaississement.

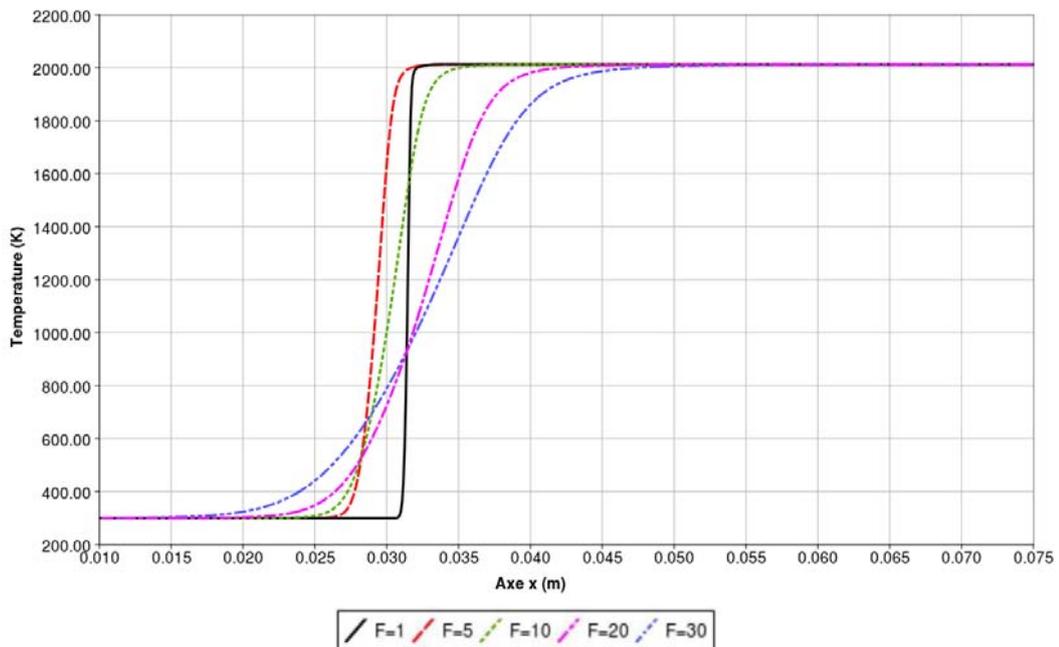
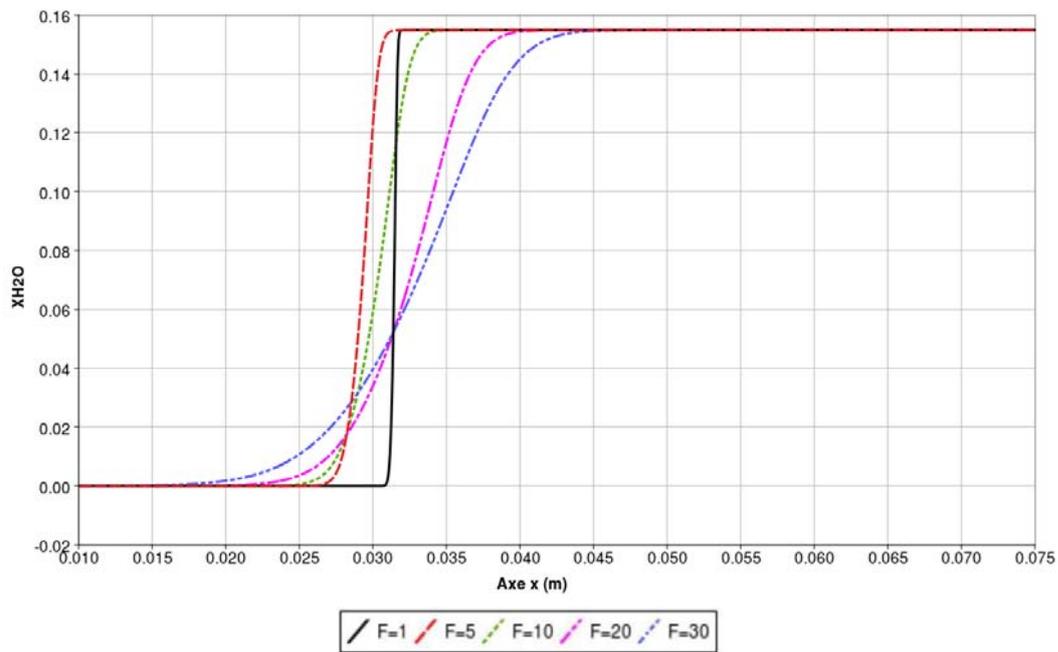
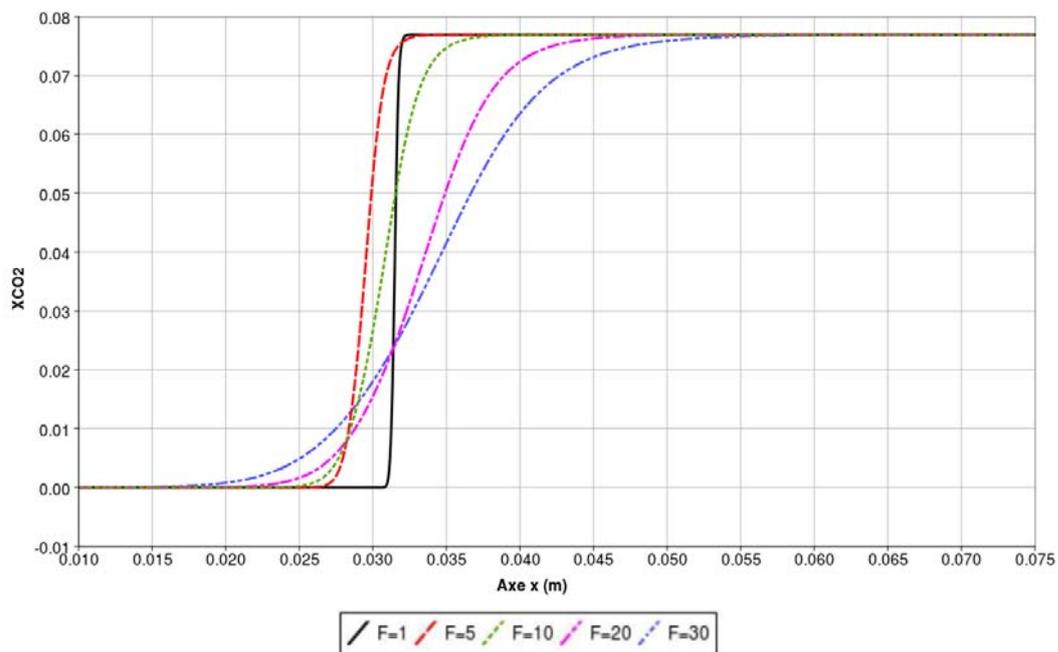


FIG. 6.3 – Profils de température pour différents épaississements  $F$  le long de l'axe.

## 6.3 INFLUENCE DE L'ÉPAISSISSEMENT SUR LES TERMES RADIATIFS

Pour les différentes valeurs de d'épaississement le terme source à été calculé, Fig. 6.7. Le terme source est nul dans les gaz frais car ils sont transparents au rayonnement (pas d'absorption). Dans la zone de front de flamme le terme source est négatif, en effet les produits de combustion à température intermédiaire absorbent, et sont chauffés par les gaz chauds. Puis le terme source atteint sa valeur maximale après le front de flamme car les gaz chauds rayonnent vers les gaz à température intermédiaire et vers la frontière froide. Enfin le terme source diminue vers la frontière chaude à la même température que le gaz et donc quasiment à l'équilibre radiatif (*i.e.* l'équilibre serait atteint si les gaz chauds rayonnaient comme un corps noir).

FIG. 6.4 – Profils de  $H_2O$  pour différents épaisseur  $F$  le long de l'axe.FIG. 6.5 – Profils de  $CO_2$  pour différents épaisseur  $F$  le long de l'axe.

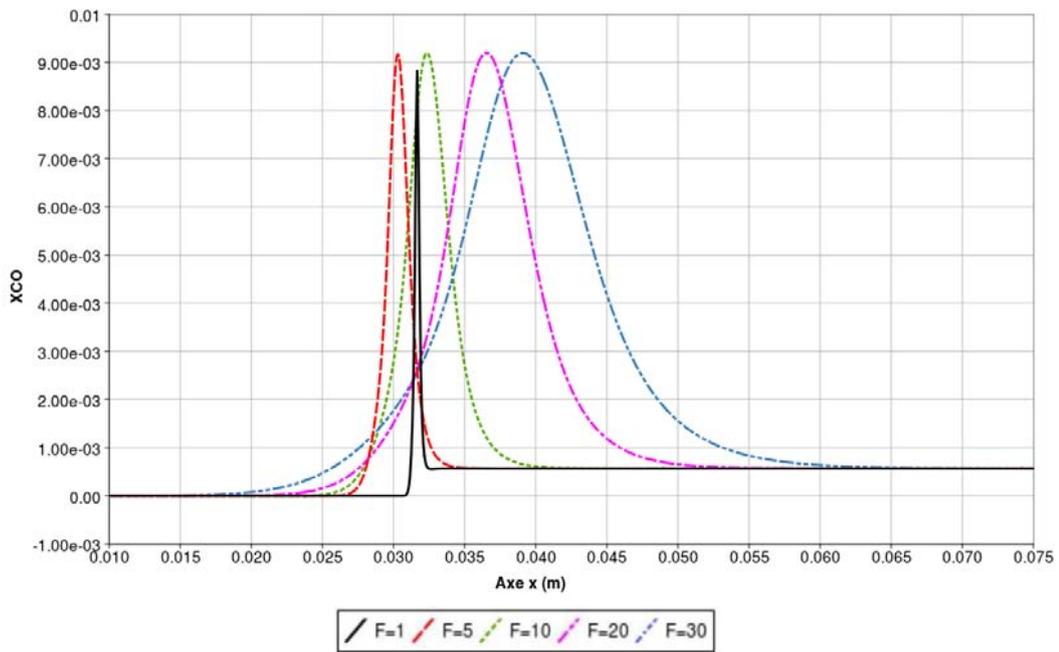


FIG. 6.6 – Profils de CO pour différents épaississement  $F$  le long de l'axe

En tenant compte de l'épaississement les profils sont assez similaires. Toutefois le maximum du terme source diminue avec l'épaississement en raison du volume plus important de gaz à des températures intermédiaires. Cet écart est de l'ordre de 26% pour l'épaississement le plus important entre la flamme de référence et la flamme épaissie. Cependant avec un épaississement plus modéré ( $F = 10$ ), cette erreur reste relativement faible (7%).

Afin de mieux comparer les différents profils, donnés pour des épaississements différents, la variable de progrès est introduite :

$$c = \frac{T - T_0}{T_1 - T_0} \quad (6.4)$$

où  $T_0$  est la température des gaz frais et  $T_1$ , la température des gaz brûlés. En effet les profils tracé en fonction de  $c$  sont similaires quel que soit l'épaississement (il n'est pas possible de comparer les résultats précédents dans l'espace physique car en une position donnée, la température est différente). La Fig. 6.8 trace le terme source radiatif en fonction de  $c$ . Les profils sont très proches sauf vers  $c = 1$  qui correspond à la zone de gaz brûlés et dans la zone réactive des températures intermédiaires.

Il est également intéressant de regarder comment se comportent les flux avec l'épaississement. Le terme source correspond à un bilan local volumique alors que le flux radiatif est une grandeur intégrée qui tient compte des échanges.

Le flux radiatif, pour un cas 1D, correspond à l'aire sous la courbe de  $S_r$ , soit l'ensemble de l'énergie perdue par rayonnement le long du profil. Aussi le flux rend compte de l'échange global entre les gaz chauds et les gaz frais.

Il y a certes un impact de l'épaississement mais celui-ci est beaucoup plus faible que sur le terme source. L'erreur due à l'épaississement le plus important ne dépasse

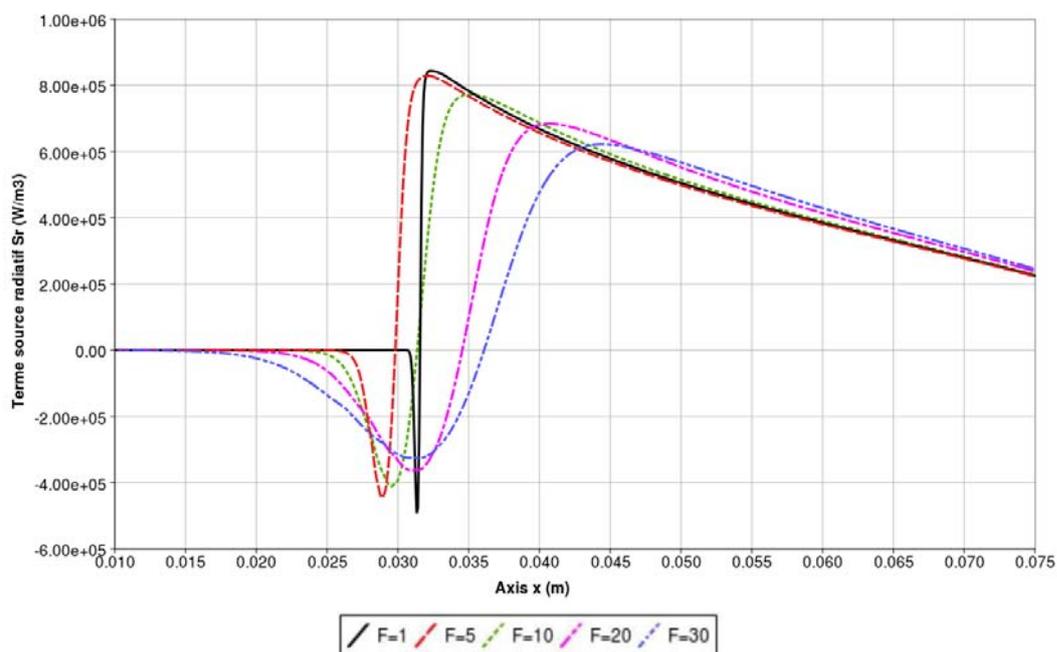


FIG. 6.7 – Terme source radiatif  $S_r$  le long de l'axe central pour différentes valeurs d'épaissement  $F = 1$  (cas non épaissi),  $F = 5$ ,  $F = 10$ ,  $F = 20$  et  $F = 30$ .

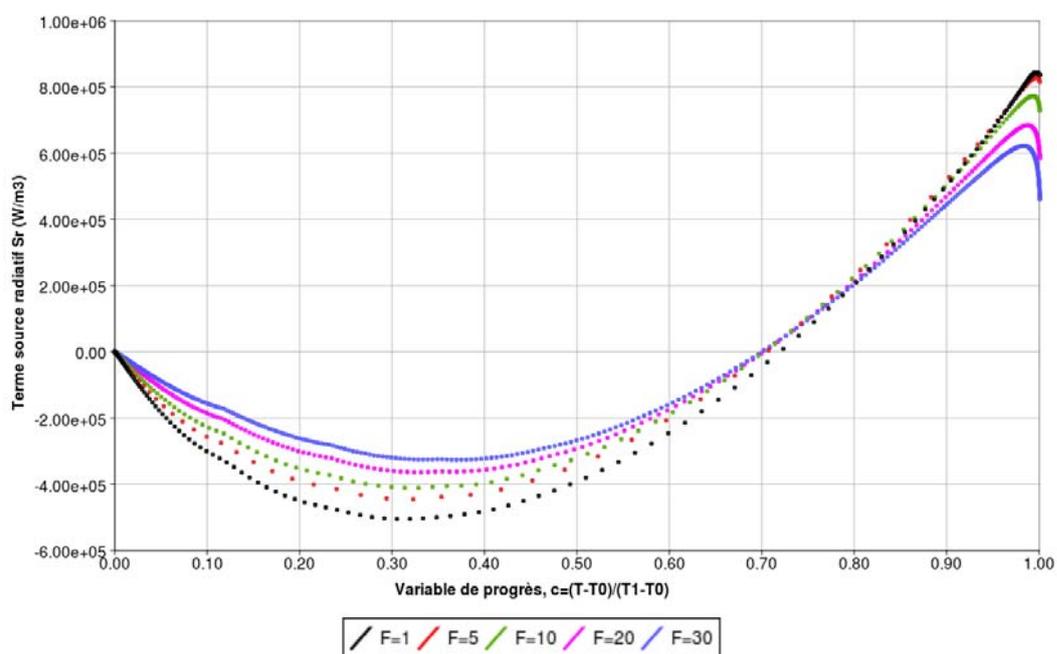


FIG. 6.8 – Terme source radiatif  $S_r$  représenté en fonction de la variable de progrès  $c = \frac{T - T_0}{T_1 - T_0}$  pour différents épaissements (scatter plot).

pas 2%. Ceci montre que si localement le terme source  $S_r$  est modifié, sur l'ensemble du profil le flux est conservé et donc le bilan radiatif est peu modifié.

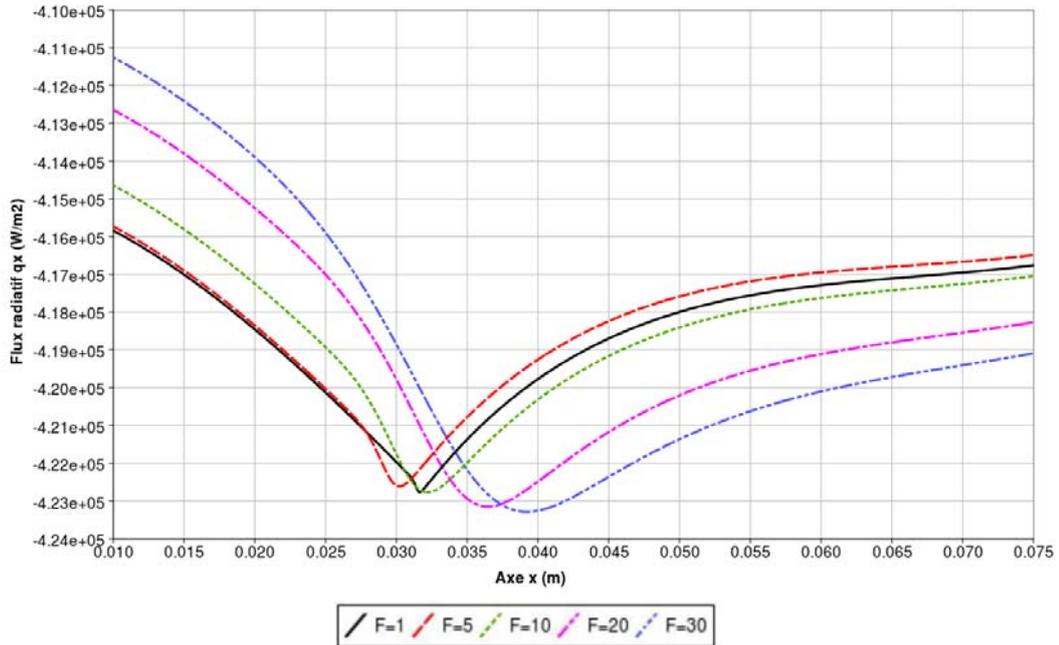


FIG. 6.9 – Composante  $x$  du flux radiatif,  $q_{r,x}$ , le long de l'axe central pour différentes valeurs d'épaisseur  $F = 1$  (cas non épaissi),  $F = 5$ ,  $F = 10$ ,  $F = 20$  et  $F = 30$ .

Les profils de la composante  $x$  du flux radiatif ont également été représentés en fonction de la variable de progrès sur la Fig. 6.10. Les modifications sont localisées principalement dans la zone de réaction mais elles ont une très faible amplitude.

Dans le but de compléter cette analyse les échanges radiatifs ont été calculés en utilisant le formalisme des puissances nettes échangées [117]. Ces calculs ont été réalisés avec le code de calcul KARINE<sup>1</sup>, code 1D (géométrie plans parallèles infinis) analytique-Monte Carlo. Ce code a été développé par V. Eymet [117] pour des applications atmosphériques. La description des propriétés d'absorption des gaz utilise le modèle SNB-cK. Pour ce calcul le profil a été décomposé en 30 couches homogènes, 5 mailles équidistantes dans les gaz frais, 20 mailles dans le front de flamme et 5 mailles dans les gaz chauds, quel que soit l'épaisseur (voir Fig 6.11 et 6.13). Aussi les couches, pour différents épaisseurs, ont des tailles physiques différentes mais sont à des températures représentatives du front de flamme. Ces résultats sont donnés sur les Fig. 6.12 et 6.14 pour le cas non épaissi et le cas avec un épaisseur  $F = 30$ .

<sup>1</sup>KARINE : <http://web.lmd.jussieu.fr/~eymet/karine.html>

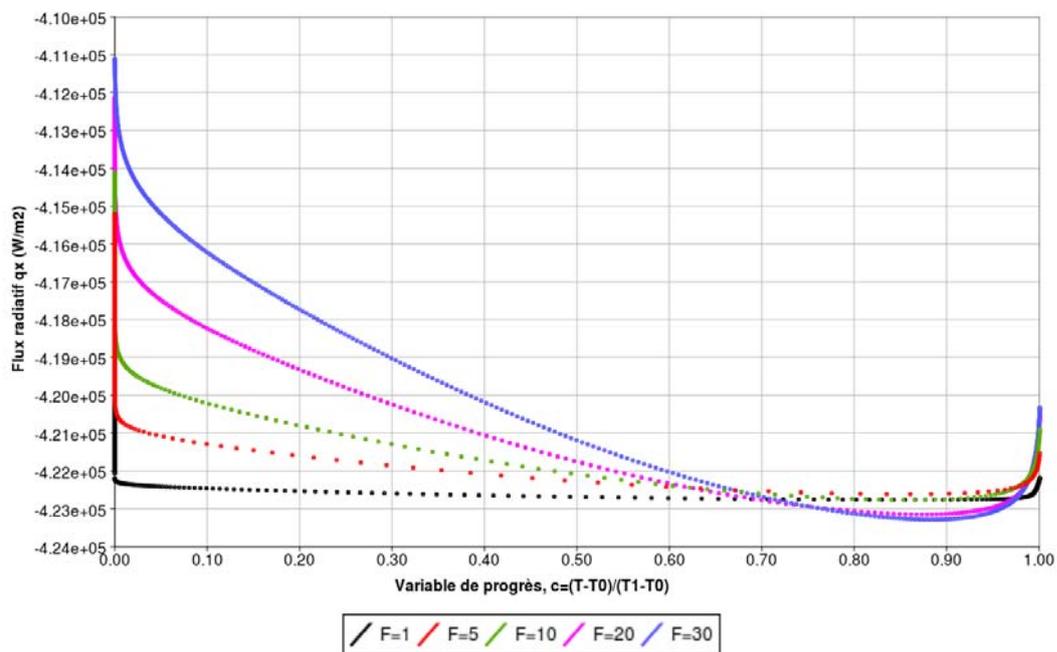


FIG. 6.10 – Composante  $x$  du flux radiatif,  $q_{r,x}$  représenté en fonction de la variable de progrès  $c = \frac{T-T_0}{T_1-T_0}$  pour différents épaissements (scatter plot).

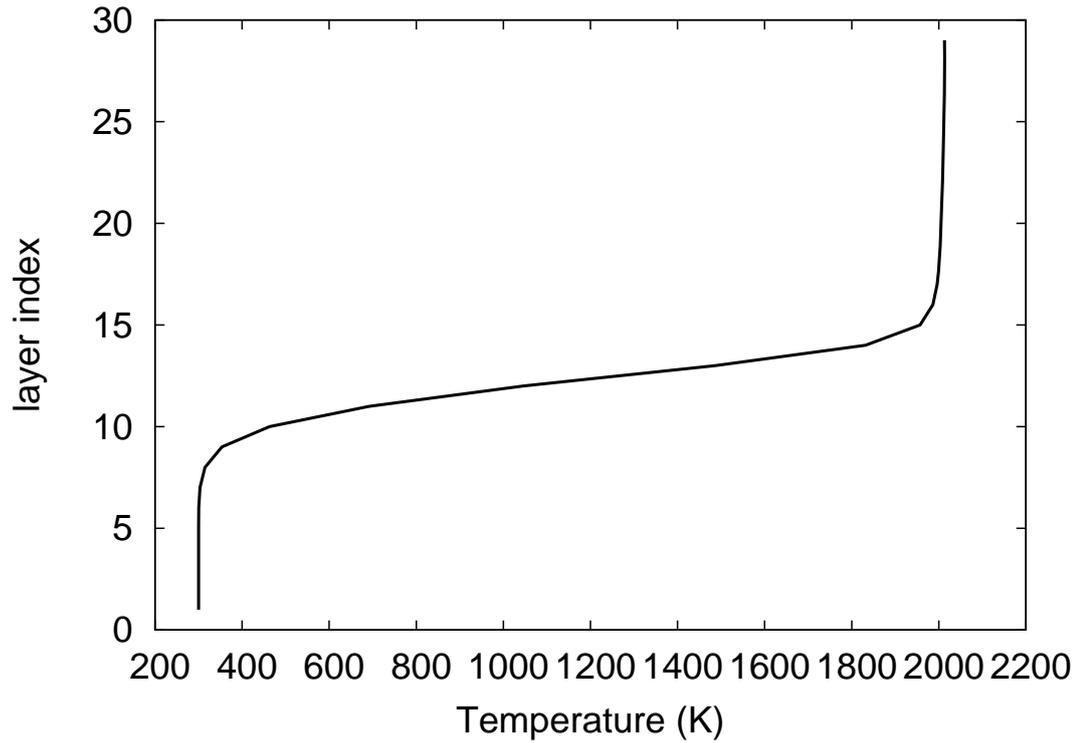


FIG. 6.11 – Profil de température suivant les couches de gaz pour  $F=1$ .

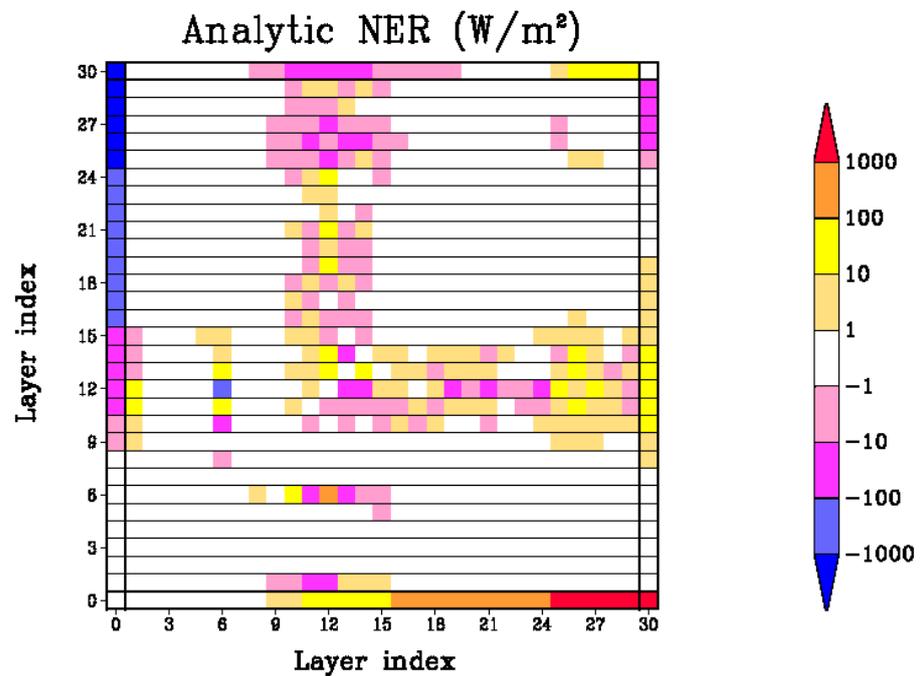
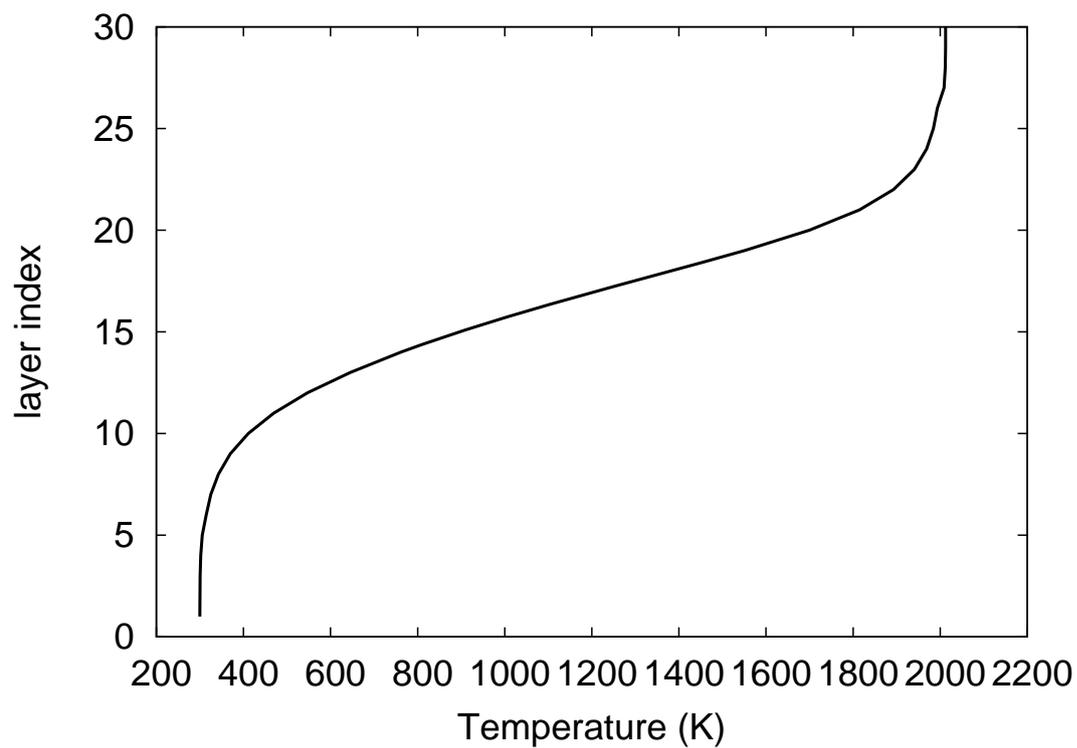
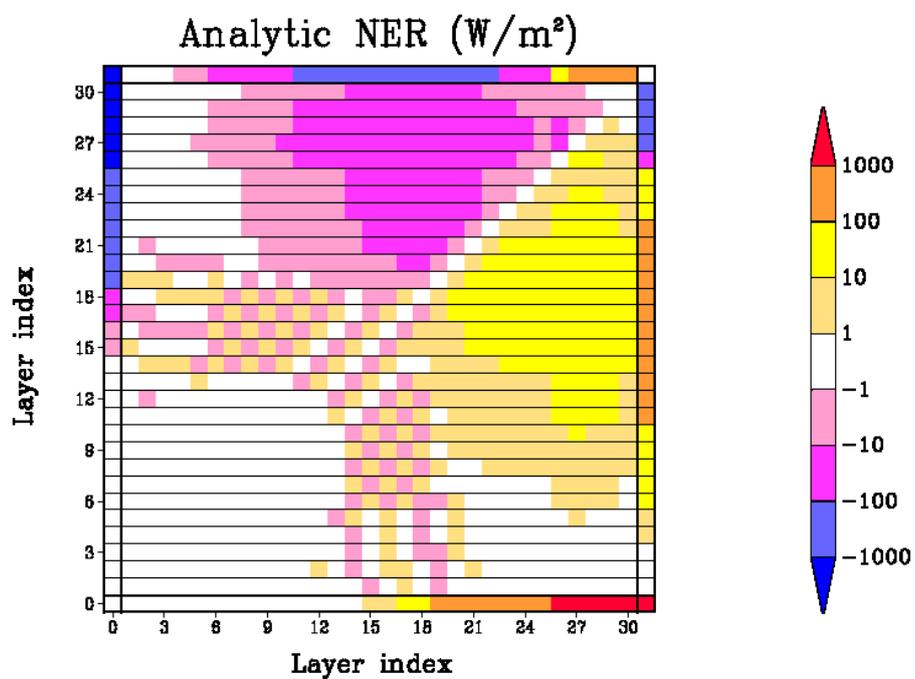


FIG. 6.12 – Matrice des puissances nettes échangées sur le profil  $F=1$ .

FIG. 6.13 – Profil de température suivant les couches de gaz pour  $F=30$ .FIG. 6.14 – Matrice des puissances nettes échangées sur le profil  $F=30$ .

La lecture de la matrice des puissances nettes échangées se fait d'un côté ou de l'autre de la diagonale, la seconde partie étant symétrique. Chaque point  $(i, j)$  de la matrice représente l'échange entre la maille  $i$  et la maille  $j$  du profil, voir la section 2.1.6 où les échanges s'expriment comme  $\phi_{v, V_i \rightarrow V_j} = \xi_{v, ij}^{VV} [L_v^0(\mathbf{x}_j - L_v^0(\mathbf{x}_i))]$  pour un échange volume-volume. Les mailles aux extrémités correspondent aux limites du domaine.

Dans le cas non épaissi, Fig. 6.12, la matrice des échanges est essentiellement vide. Dans ce cas le milieu est optiquement mince et les échanges les plus importants se font entre le gaz chaud et la paroi froide (ligne inférieure). Dans le cas épaissi ( $F = 30$ ), Fig. 6.14, la matrice des échanges est beaucoup plus non nulle. Les mailles contenant des gaz absorbants étant plus épaisses, l'épaisseur optique augmente. Les échanges avec la paroi froide restent dominants mais des échanges gaz-gaz entre les gaz frais et les gaz chauds apparaissent. Ceci explique la baisse de  $S_r$  avec l'épaississement (cf. Fig. 6.7) car les échanges entre mailles adjacentes existent; les échanges à courte distance deviennent non nuls.

En résumé, l'épaississement modifie le terme source local de façon faible pour des épaississements faibles. Si l'épaississement est important, l'erreur commise sur le terme source radiatif devient non négligeable. Toutefois l'erreur sur les flux radiatifs reste faible et les échanges énergétiques par rayonnement intégrés sur le profil, sont peu modifiés par l'épaississement. En conclusion, le front de flamme reste optiquement mince même s'il est épaissi et les échanges radiatifs dominants se font toujours avec les parois.

## 6.4 INFLUENCE DE L'ÉPAISSEUR OPTIQUE EN PRÉSENCE DE SUIES

Les suies ont un fort impact sur le rayonnement car elles ont un fort pouvoir d'absorption et augmentant ainsi l'épaisseur optique. La flamme précédemment étudiée a été chargée en suies afin d'étudier de façon paramétrique l'épaisseur optique critique au-delà de laquelle l'impact de l'épaississement sur le rayonnement serait non négligeable. Pour cela une fraction volumique de suies a été ajoutée, proportionnelle à la température :

$$f_v = f_{v, max} \times \frac{T}{T_{max}} \quad (6.5)$$

où différentes valeurs de  $f_{v, max}$  ont été utilisées :  $10^{-6}$ ,  $10^{-5}$  et  $10^{-4}$ . Ce profil de fraction volumique de suies n'est pas réaliste pour la plupart des flammes mais permet d'amplifier l'absorption des gaz brûlés.

En utilisant le découpage du domaine en couches homogènes utilisé pour le calcul des PNE (la position de la flamme est indiquée sur la Fig 6.11), le coefficient d'absorption est représenté en fonction du numéro de maille (verticalement) et de chaque bande étroite (horizontalement) que les Fig. 6.15 à 6.18 pour les différentes valeurs de suies.

Si dans le cas sans suies la dépendance spectrale est fortement marquée, la présence de suies tend à rendre le milieu plus homogène en fréquence. Dans le cas extrême  $f_{v, max} = 10^{-4}$ , la dépendance spectrale est presque complètement masquée. Avec l'augmentation de la fraction volumique de suies, l'absorption augmente de façon importante et rend le milieu beaucoup plus épais ( $\kappa_{max} \sim 100m^{-1}$  pour  $f_{v, max} = 10^{-4}$ ), ce qui va augmenter la sensibilité à l'épaississement du front de flamme.

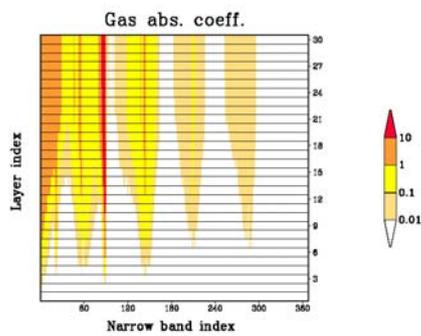
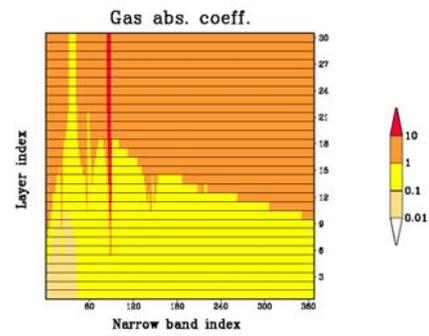
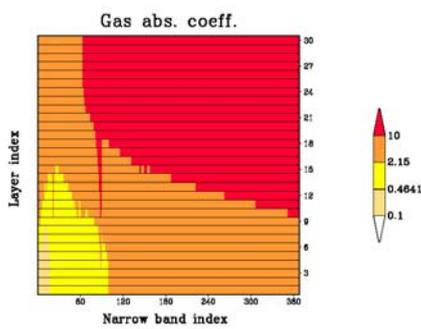
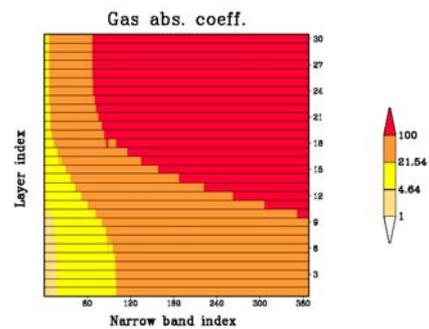


FIG. 6.15 – Coefficient d'absorption sans suies.

FIG. 6.16 – Coefficient d'absorption avec des suies,  $f_{v,max} = 10^{-6}$ .FIG. 6.17 – Coefficient d'absorption avec des suies,  $f_{v,max} = 10^{-5}$ .FIG. 6.18 – Coefficient d'absorption avec des suies,  $f_{v,max} = 10^{-4}$ .

Pour chacune de ces valeurs et pour les différents épaisseurs,  $S_r$  et la composante  $x$  du flux radiatif ont été représentés en fonction de la variable de progrès, Fig. 6.19 à 6.21 et Fig. 6.22 à 6.24 respectivement.

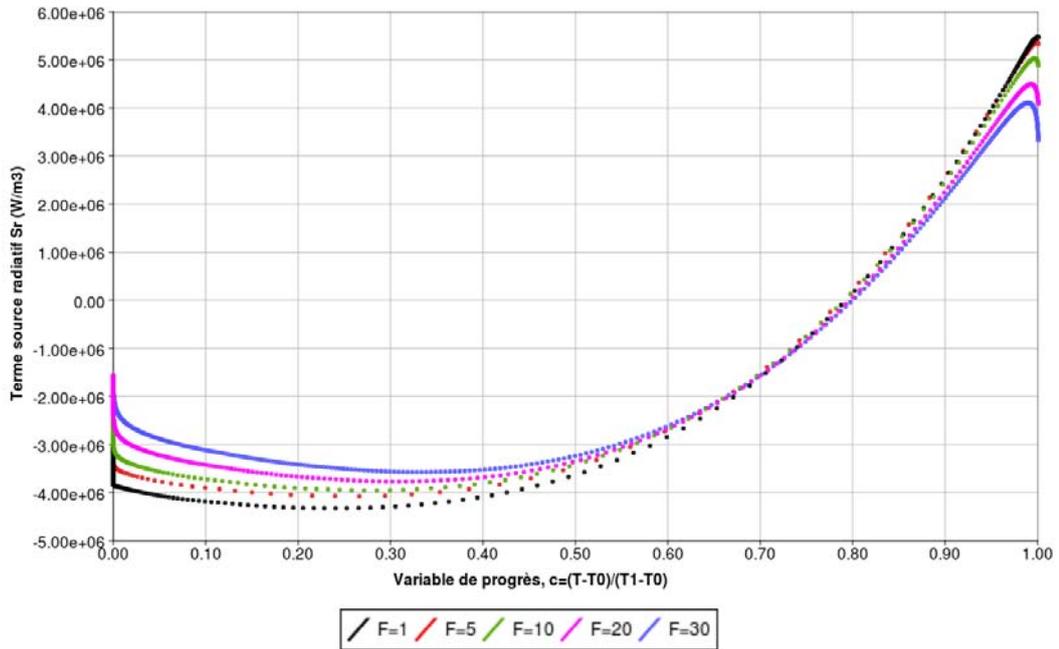


FIG. 6.19 – Terme source radiatif  $S_r$  représenté en fonction de la variable de progrès pour  $f_{v,max} = 10^{-6}$ .

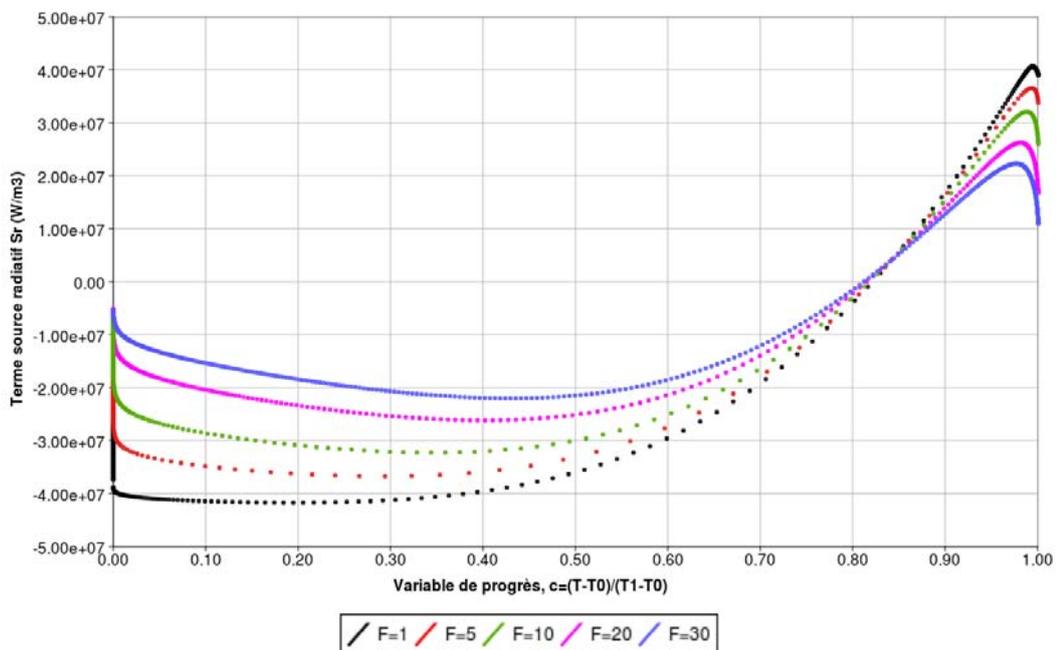


FIG. 6.20 – Terme source radiatif  $S_r$  représenté en fonction de la variable de progrès pour  $f_{v,max} = 10^{-5}$ .

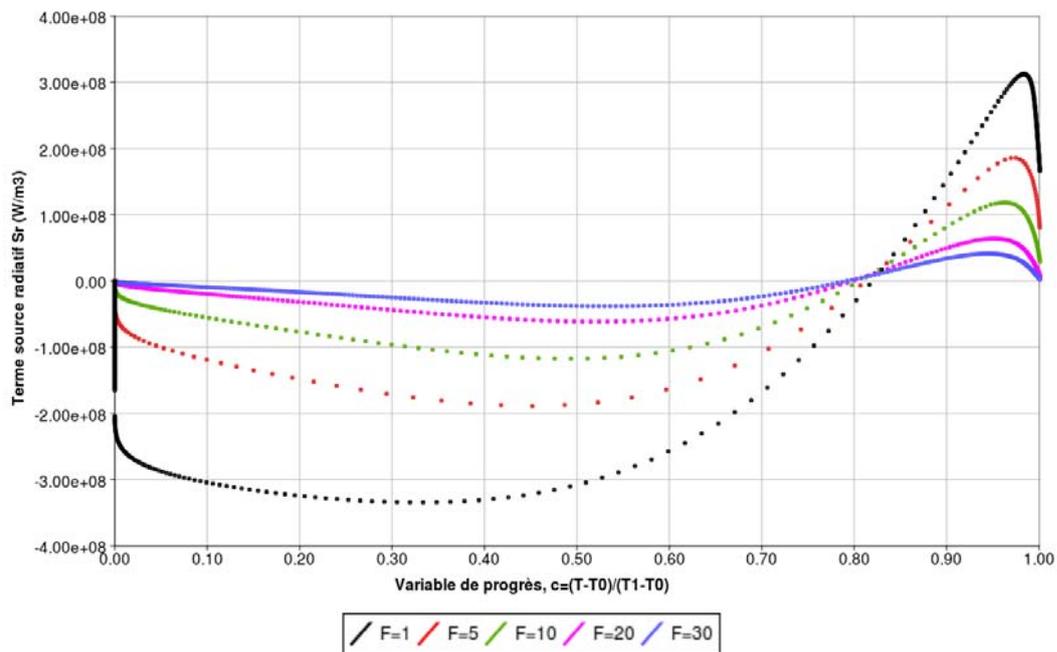


FIG. 6.21 – Terme source radiatif  $S_r$  représenté en fonction de la variable de progrès pour  $f_{v,max} = 10^{-4}$ .

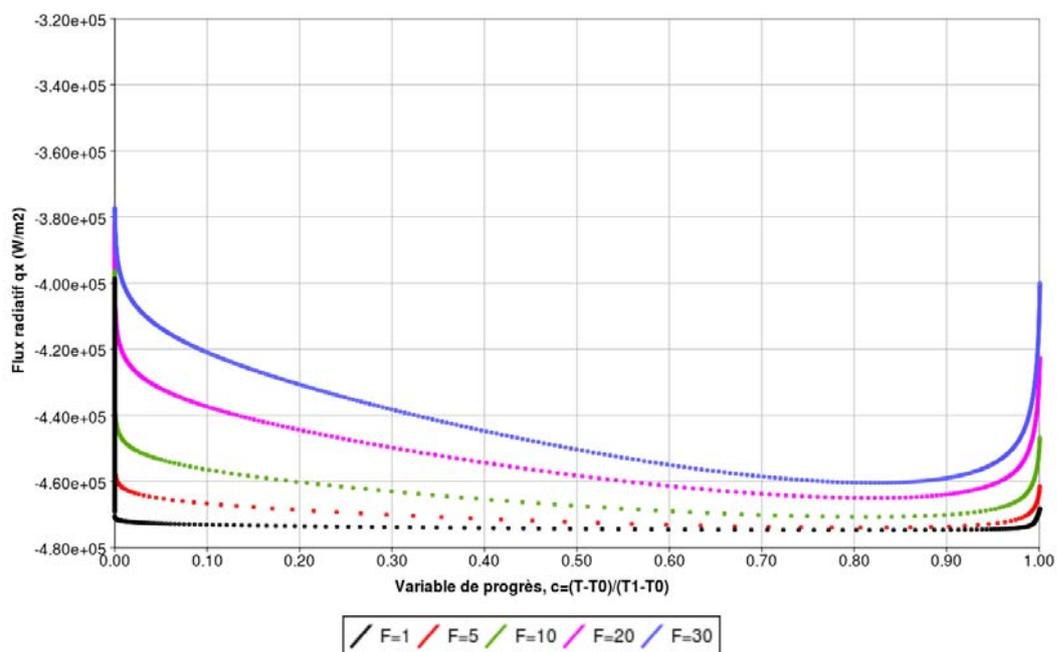


FIG. 6.22 – Composante  $q_{r,x}$  du flux radiatif représentée en fonction de la variable de progrès pour  $f_{v,max} = 10^{-6}$ .

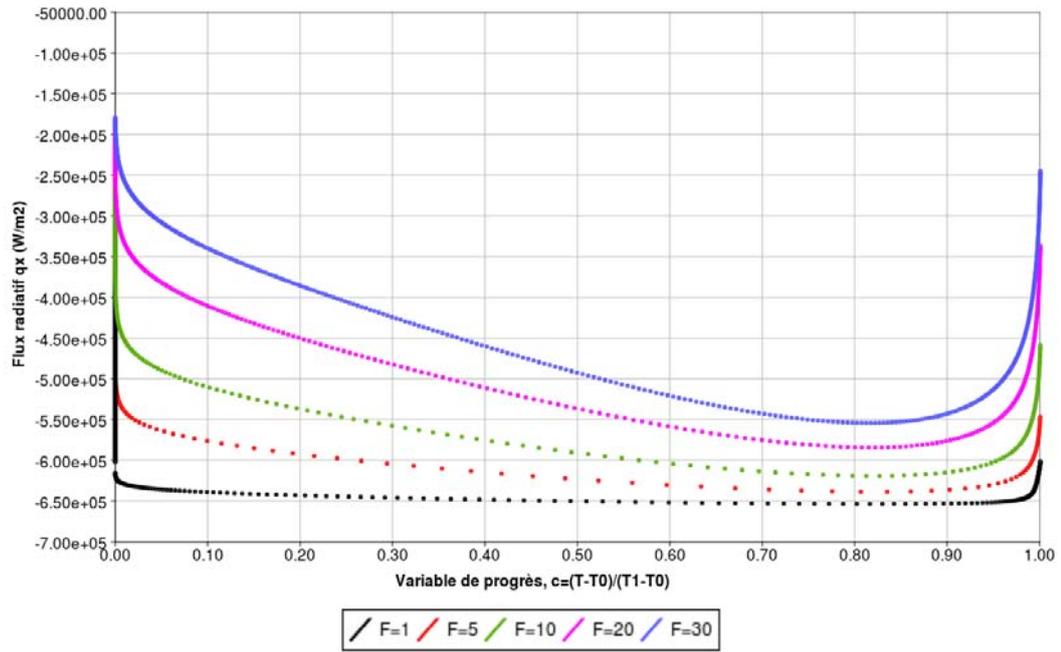


FIG. 6.23 – Composante  $q_{r,x}$  du flux radiatif représentée en fonction de la variable de progrès pour  $f_{v,max} = 10^{-5}$ .

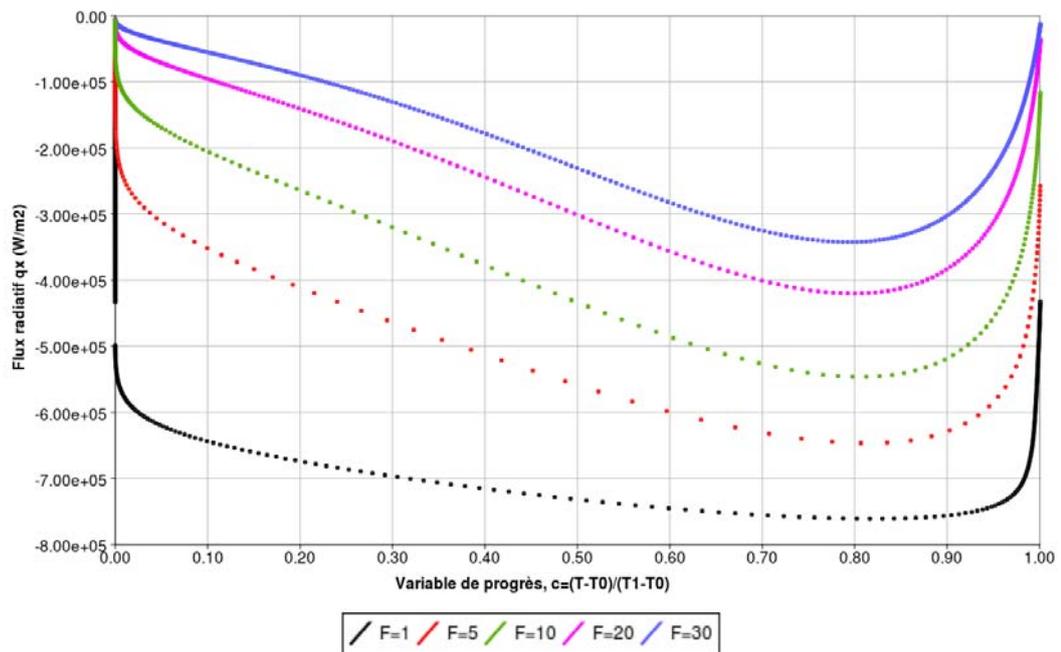


FIG. 6.24 – Composante  $q_{r,x}$  du flux radiatif représentée en fonction de la variable de progrès pour  $f_{v,max} = 10^{-4}$ .

| $f_{v,max} =$                  | $10^{-7}$ | $10^{-6}$ | $10^{-5}$ | $10^{-4}$ |
|--------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| $\epsilon(S_r)_{max} \sim$     | 26%       | 26%       | 75%       | 99%       |
| $\epsilon(q_{r,x})_{max} \sim$ | 2,4%      | 4,2%      | 17%       | 76%       |

TAB. 6.2 – Erreurs relatives maximales sur  $S_r$  et  $q_{r,x}$  pour  $F = 30$  par rapport au cas non épaissi en fonction de la concentration de suies.

Il apparaît clairement que l'augmentation de l'épaisseur optique du milieu a une incidence directe sur l'erreur induite sur les termes radiatifs par le modèle de flamme épaissie. Une estimation des erreurs maximales sur  $S_r$  et sur  $q_{r,x}$  pour chaque concentration de suies est résumée dans le tableau 6.2. Il est à noter que si localement l'erreur sur le terme source peut devenir importante, pour  $f_{v,max} = 10^{-5}$ ,  $\epsilon(S_r)_{max} \sim 75\%$ , l'erreur sur les flux reste beaucoup plus modérée :  $\epsilon(q_{r,x})_{max} \sim 17\%$ . Pour le cas extrêmes,  $f_{v,max} = 10^{-4}$ , l'utilisation du modèle de flamme épaissie est à proscrire pour effectuer un calcul radiatif. Les Fig. 6.21 et 6.24 montrent que la similitude d'échelle n'est plus du tout respectée (la variation en fonction de la variable de progrès est fortement modifiée) et les amplitudes sont également modifiées.

Cependant, une telle fraction de suies maximale  $f_{v,max} = 10^{-4}$ , n'est pas représentative des fractions volumiques de suies rencontrées dans les flammes d'hydrocarbures, le maximum se situe plutôt autour de  $10^{-6}$  [118, 119].

## 6.5 CONCLUSION

L'influence du modèle de flamme épaissie sur le calcul radiatif à été étudiée dans une configuration de flamme laminaire avec des conditions aux limites radiative absorbantes (« parois noires »).

Différents profils, correspondant à des cas plus ou moins épaissis ont été comparés relativement entre eux. Tout d'abord dans un cas sans suies, les valeurs d'épaississement faibles donnent une erreur assez faible sur le niveau du terme source radiatif. Cette erreur monte à 20% localement pour un épaississement de 30. Cependant le profil de  $S_r$  en fonction de la variable de progrès est bien conservé et l'épaississement agit de façon quasi homothétique sur  $S_r$ . Enfin les flux radiatifs, qui sont des grandeurs intégrées, sont également conservés pour tous les épaississements. Donc les échanges radiatifs intégrés sur le profil sont conservés malgré l'épaississement.

Afin d'accroître la sensibilité des termes radiatifs à l'épaississement et mettre en valeur d'éventuels comportement du terme d'absorption, des suies ont été ajoutées au milieu pour augmenter l'épaisseur optique des gaz chauds. Là encore, l'utilisation du modèle de flamme épaissie modifie peu les flux radiatifs jusqu'à des fractions volumiques de suies de  $f_v = 10^{-5}$  (ce qui représente un coefficient d'absorption maximal  $\kappa_{max} \sim 10 \text{ m}^{-1}$ ). Localement l'erreur sur le terme source radiatif peut devenir relativement importante mais la similitude d'échelle est encore cohérente et les flux conservés. Au-delà de cette concentration les erreurs deviennent très importantes tant sur le terme source que sur la composante  $x$  du flux. Ces fractions volumiques de suies ne sont pas représentatives des flammes les plus chargées en suies des applications étudiées mais elles fournissent une limite supérieure de validité pour le rayonnement du modèle épaissi en terme d'épaisseur optique.

En conclusion, il a été montré que l'épaississement de la flamme avec ou sans suies ne modifie pas de façon importante les échanges radiatifs et il est justifié d'utiliser le calcul radiatif conjointement avec le modèle de flamme épaissie sans correction supplémentaire. On peut se poser la question de l'impact de l'épaississement sur le rayonnement dans des flammes turbulentes. Dans le cas turbulent avec le modèle d'épaississement une partie du front de flamme n'est plus résolue ce qui peut avoir un impact sur le rayonnement.

# INFLUENCE DE L'ÉPAISSISSEMENT DANS L'INTERACTION RAYONNEMENT TURBULENCE

Le modèle de flamme épaissie a deux conséquences : il augmente l'épaisseur de la flamme et diminue son plissement. On a vu au chapitre 6 l'effet de l'épaississement sur l'épaisseur optique. On s'attache dans ce chapitre à évaluer l'impact du défaut de plissement sur le calcul radiatif.

La question posée ici est proche de la question de l'influence de filtrage et des fluctuations sous maille sur le rayonnement traité au chapitre 5 et relève de la problématique interaction rayonnement-turbulence. En LES classique (non réactive), la taille du filtre est souvent considérée comme étant la taille des mailles de calcul. En combustion, la flamme est épaissie telle qu'elle soit résolue par 5 ou 10 points sur le maillage LES. Bien que l'épaississement ne soit pas strictement équivalent au filtrage, il a pour conséquence de réduire le plissement et donc indirectement des fluctuations pour une taille supérieure à celles filtrées par le maillage LES.

L'impact du modèle de flamme épaissie sur le plissement dans l'interaction rayonnement turbulence est étudié *a priori* dans une configuration d'interaction flamme-vortex. La configuration flamme-vortex est un cas d'étude classique en combustion turbulente [120], car elle est une représentation simplifiée de l'interaction combustion-turbulence.

## 7.1 ÉTUDE *a priori* SUR UNE CONFIGURATION D'INTERACTION FLAMME-VORTEX

### 7.1.1 Configuration

La configuration pour l'étude de l'interaction flamme-vortex est bidimensionnelle sur un domaine physique de 20 cm de long et 10 cm de haut (Fig. 7.1). Initialement la flamme est une flamme laminaire d'air/CH<sub>4</sub> stoechiométriques (richesse  $\phi = 1$ ). Le maillage de la configuration contient 400 × 200 cellules. Le mélange est injecté à gauche à la vitesse de flamme  $s_l^0 = 0,387 \text{ m.s}^{-1}$  et les parois hautes et basses ont une condition de périodicité.

La combustion est résolue par AVBP avec le schéma Lax-Wendroff. La chimie est traitée par le schéma à 2 étapes présenté au paragraphe 6.1.1. La solution initiale est créée de la même manière que dans le cas laminaire.

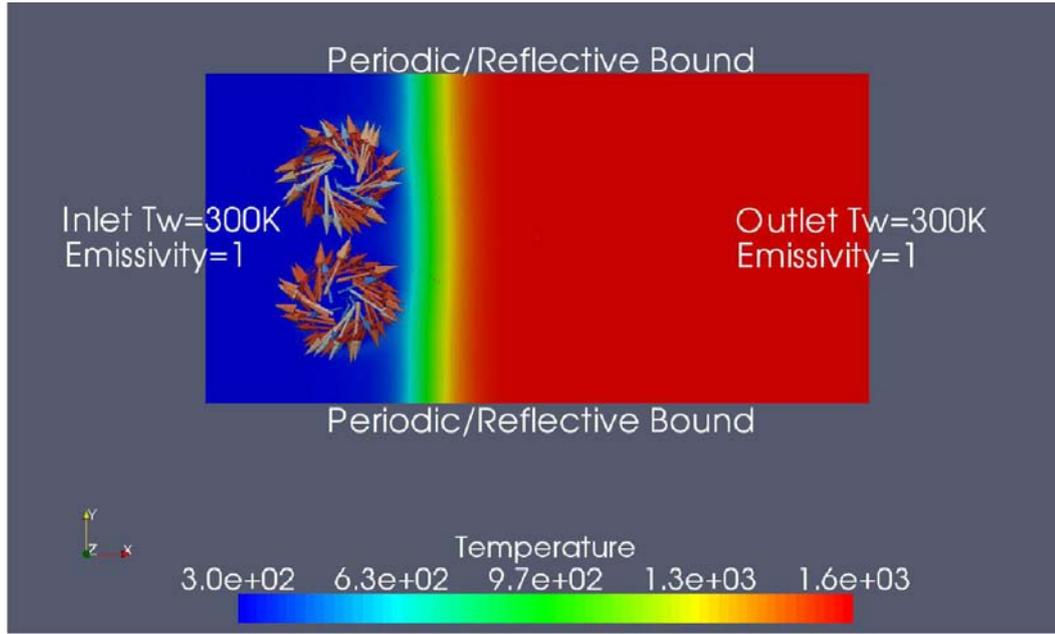


FIG. 7.1 – Configuration de l'interaction flamme-vortex.

Pour perturber et plisser le front de flamme, une paire de tourbillons contra-rotatifs est superposée à la solution initiale. Cette modification concerne uniquement le champ de vitesse. Ensuite les tourbillons vont avancer et traverser le front de flamme. Selon les propriétés des tourbillons (taille et vitesse), le taux d'étirement appliqué à la flamme varie et trois situations d'interaction flamme-vortex ont été identifiées. Dans un premier régime, il n'y a pas d'influence sur la flamme car les vortex sont trop petits et sont dissipés rapidement. Dans un deuxième régime, la flamme est plissée par les vortex et dans un troisième régime, les vortex sont suffisamment forts pour éteindre localement la flamme.

Les vortex sont isentropiques et définis par leur position  $x_c, y_c$  et une puissance  $\Gamma$ . La vitesse des tourbillons est définie comme :

$$\begin{aligned} u &= -\frac{\Gamma}{R_c^2}(y - y_c) \exp\left(-\frac{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}{2R_c^2}\right) \\ v &= \frac{\Gamma}{R_c^2}(x - x_c) \exp\left(-\frac{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}{2R_c^2}\right) \end{aligned} \quad (7.1)$$

où  $R_c$  est la taille du tourbillon. La vitesse maximale des tourbillons est  $V_{max} = \frac{\Gamma}{2\pi R_c}$ . L'interaction entre les tourbillons et la flamme dépend de la force des tourbillons  $\Gamma$  mais aussi de leur taille  $R_c$  et de la distance qui les sépare  $d_{12}$ . Le taux d'étirement (en  $s^{-1}$ ) appliqué à la flamme est donné par :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} \approx \frac{V_{max}}{d_{12}} = \frac{\Gamma}{2\pi R_c d_{12}} \quad (7.2)$$

Les paramètres des tourbillons superposés à la flamme sont donnés dans le tableau 7.1. Le régime d'interaction flamme-vortex correspond au deuxième régime où la flamme est plissée par les tourbillons.

|          | $x_c$ | $y_c$ | $R_c$  | $\Gamma$                             |
|----------|-------|-------|--------|--------------------------------------|
| Vortex 1 | -6 mm | 2 mm  | 0,5 mm | 0,1 m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>  |
| Vortex 2 | -6 mm | -2 mm | 0,5 mm | -0,1 m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> |

TAB. 7.1 – Paramètres des tourbillons de l'interaction flamme-vortex

D'un point de vue radiatif, le rayonnement a été résolu avec PRISSMA sur 24 directions (la convergence en nombre de directions est validée par un calcul à 96 directions) et avec un modèle spectral SNBcK. Comme dans le cas de la flamme laminaire les conditions aux limites à gauche et à droite ont été imposées avec une condition de corps noir à la température du gaz, correspondant à une couche de gaz infini à la même température. Les conditions aux limites, haute et basse, ont été prises en compte par une réflexion spéculaire, ce qui, dû à la structure du front de flamme ne correspond pas strictement à une extension infinie d'un front de flamme laminaire, mais cet effet est supposé négligeable.

### 7.1.2 Influence de l'épaississement sur le plissement

Afin de quantifier l'impact de l'épaississement sur le plissement trois cas ont été utilisés avec des valeurs de  $F = 1$  (cas de référence non épaissi),  $F = 5$  et  $F = 15$ . Les champs de température correspondant ont été représentés sur les Fig. 7.2 à 7.4.

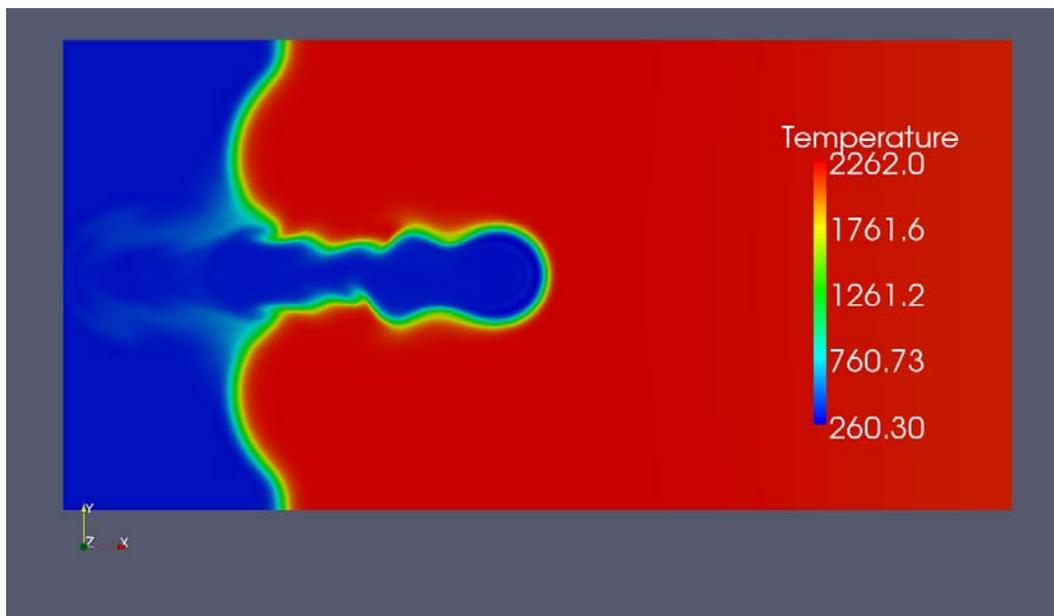


FIG. 7.2 – Champ de température pour la flamme non épaissie.

L'épaississement modifiant également le temps caractéristique de l'interaction flamme-vortex, des solutions instantanées présentant des champs similaires ont été choisies pour les comparaisons. Il apparaît pour ces trois valeurs d'épaississement que le plissement de la flamme diminue lorsque  $F$  augmente.

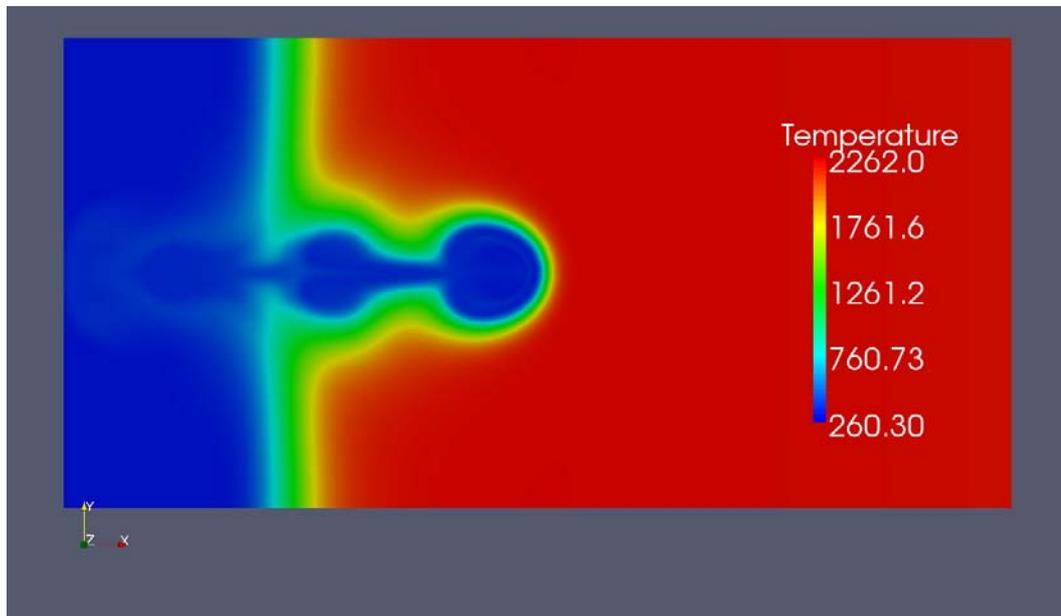


FIG. 7.3 – Champ de température pour la flamme épaisse  $F = 5$ .

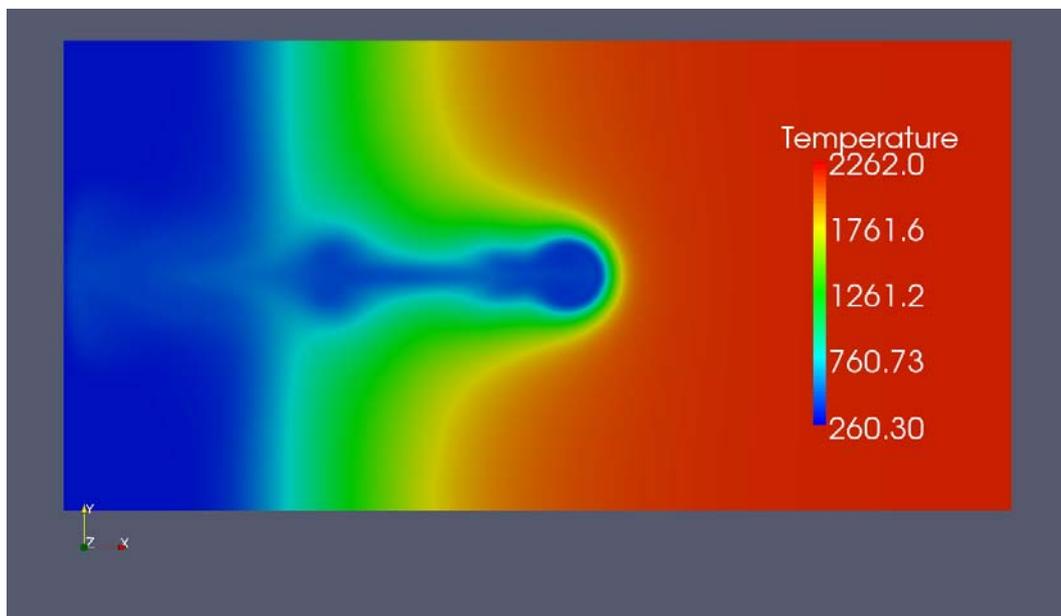


FIG. 7.4 – Champ de température pour la flamme épaisse  $F = 15$ .

### 7.1.3 Influence du plissement sur le rayonnement

Les champs de terme source radiatif correspondants ont été représentés sur les Fig. 7.5 à 7.7.

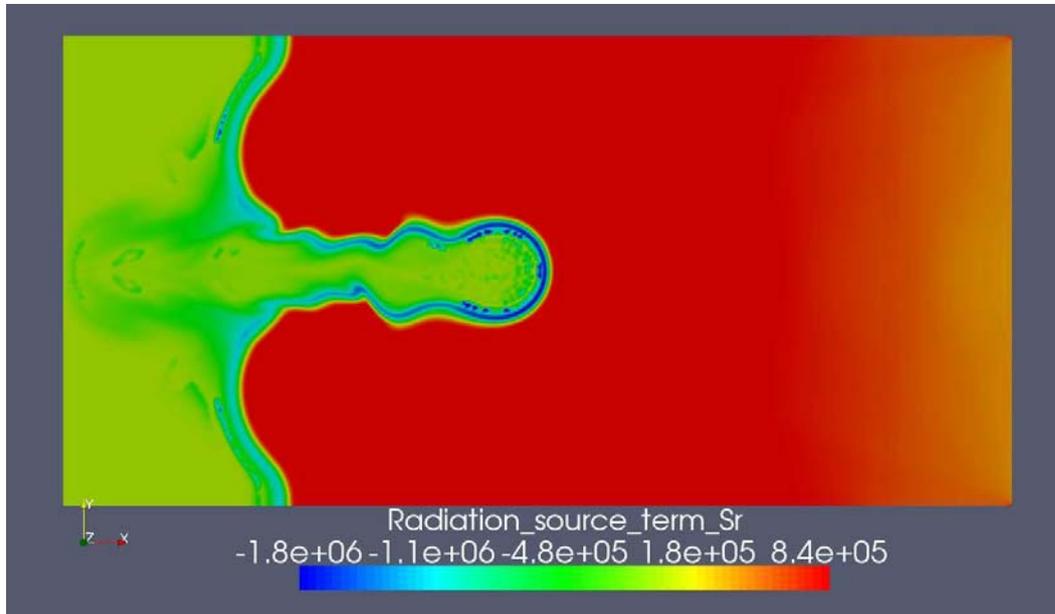


FIG. 7.5 – Champ du terme source radiatif  $S_r$  pour la flamme non épaissie.

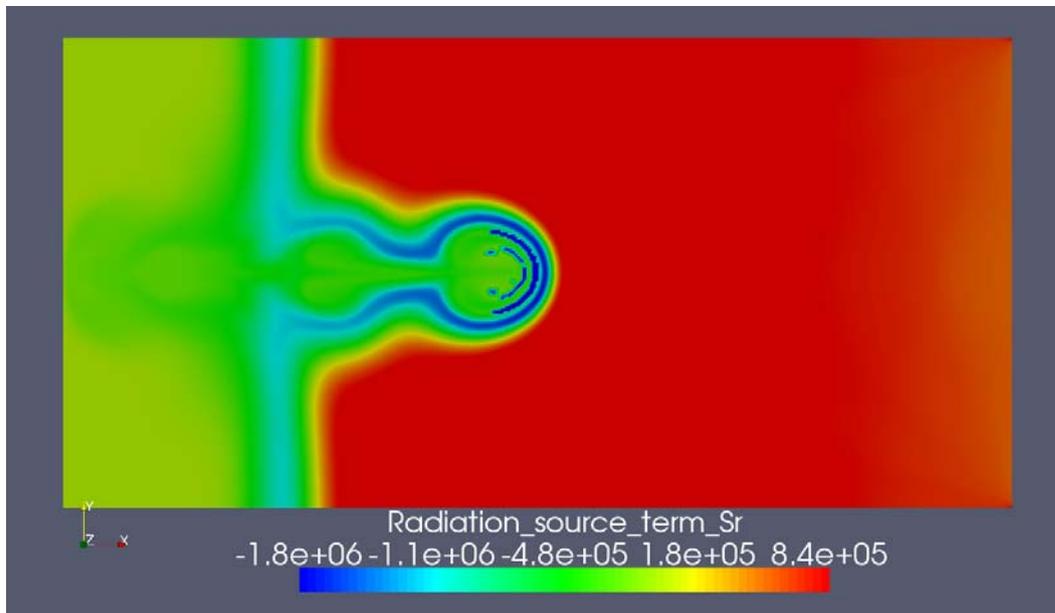


FIG. 7.6 – Champ du terme source radiatif  $S_r$  pour la flamme épaissie  $F = 5$ .

Qualitativement, le champ de terme source radiatif ont le même comportement pour les 3 épaississements étudiés. Cependant il est difficile de tirer des informations quantitatives sur ces champs, une analyse sur les moyennes spatiales est proposée. L'objectif est d'évaluer si les valeurs moyennes des champs radiatifs se conservent pour les configurations épaissies.

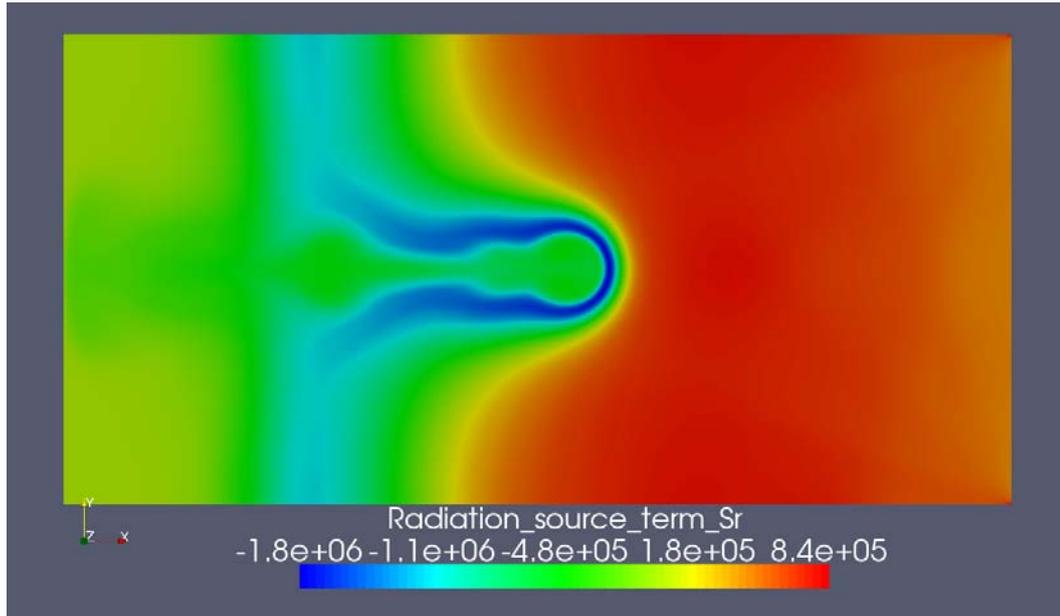


FIG. 7.7 – Champ du terme source radiatif  $S_r$  pour la flamme épaissie  $F = 15$ .

Il faut remarquer que sur ce calcul la « surface » de flamme représente un volume non négligeable par rapport au « volume » de gaz. Aussi en épaississant la flamme, l'extension de la surface de flamme sur le domaine devient non négligeable et la valeur moyenne de la température baisse pour les instants représentés sur les Fig. 7.2 à 7.4 :

- $\langle T \rangle = 1758,4K$  pour  $F = 1$
- $\langle T \rangle = 1668,6K$  pour  $F = 5$ ,
- $\langle T \rangle = 1480,2K$  pour  $F = 15$ .

où  $\langle \rangle$  désigne la moyenne sur le domaine.

Le terme source radiatif moyen peut être décomposé comme :

$$\langle S_r \rangle = \langle E \rangle - \langle A \rangle \quad (7.3)$$

où  $A$  est le terme d'absorption défini comme :  $A = \int_0^\infty d\nu \int_{4\pi} \kappa_\nu I_\nu d\omega$  et  $I_\nu$  est la luminance incidente monochromatique. L'émission est donnée par  $E = 4\sigma\kappa_p T^4$ .

Le tableau 7.2 synthétise les différentes valeurs moyennes pour les trois situations d'épaississement, les erreurs relatives par rapport au cas non épaissi de chaque grandeur moyenne sont notées  $\epsilon_{\langle X \rangle}$ .

Les résultats montrent que l'erreur sur le terme source moyen augmente de façon importante avec l'épaississement. En décomposant le terme source radiatif comme la différence de l'émission et de l'absorption on constate que l'erreur sur  $S_r$  provient essentiellement de l'erreur sur l'émission moyenne, l'erreur sur l'absorption moyenne étant moins importante.

Comme le montre l'évolution de la température moyenne, il y a un effet géométrique de l'épaississement car le rapport de surface de flamme sur le volume de gaz chaud est très important sur cette configuration. Pour corriger cet effet on peut supposer que l'émission évolue simplement comme  $T^4$  :  $\langle E \rangle \propto \langle T^4 \rangle$  et introduire  $V_{gc}$  tel

que :

$$V_{gc} = \frac{\langle T^4 \rangle}{T_{max}^4} \quad (7.4)$$

où  $\langle \rangle$  désigne la moyenne sur le domaine et  $T_{max}$  la température maximale. Ce terme représente le pourcentage du volume occupé par les gaz chauds. Pour les trois situations il vaut :

- $V_{gc} = 71,6\%$  pour  $F = 1$ ,
- $V_{gc} = 63,5\%$  pour  $F = 5$ ,
- $V_{gc} = 49,6\%$  pour  $F = 15$ ,

Si on corrige le terme d'émission moyen avec la fraction de volume de gaz chauds ( $V_{gc}$ ), l'erreur est inférieure à 2%. Cela montre que le plissement sous-maille négligé par l'épaississement a une incidence très faible sur l'émission et qu'il induit des erreurs beaucoup plus faible que sur le bilan  $S_r$  dans le cas laminaire où localement le terme source peut être modifié jusqu'à 20%. Une fois l'effet géométrique de surface de flamme par rapport au volume de gaz chaud corrigé, l'effet du défaut de plissement de la flamme épaissie sur le rayonnement est négligeable. Les fluctuations négligées par le plissement sous-maille ont une influence faible sur le rayonnement.

L'effet du rapport de surface/volume est très important dans cette configuration, cependant dans un calcul turbulent cet effet est corrigé par la fonction d'efficacité. En effet si le modèle d'efficacité fonctionne correctement, la même masse de gaz chaud est prédite dans le cas épaissi que dans le cas non épaissi. Par conséquent, l'émission des gaz chaud doit être conservée sous réserve que l'effet de la TRI dû aux fluctuations du plissement sous-maille soit faible.

L'erreur sur le terme moyen d'absorption  $\langle A \rangle$  est relativement faible ( $\sim 10\%$ ) mais il n'est pas possible de conclure sur l'influence des fluctuations sur ce terme là car il intègre également les erreurs dues à la modification de l'épaisseur optique du front de flamme discutée dans le chapitre précédent.

Enfin les composantes moyennes du flux radiatif ont été évaluées. Bien que la composante  $y$  soit *a priori* non nulle elle reste très faible ( $\sim 10^{-2} W.m^{-2}$ ) en raison de la symétrie de la configuration sur l'axe vertical. La composante  $x$  du flux radiatif moyen est conservée ce qui est cohérent avec l'analyse faite en 1D et donc le plissement non résolu n'a pas d'influence sur les composantes du flux radiatif qui est une grandeur intégrée.

La variance de température a été évaluée :

$$T_{rms} = \sqrt{\langle T'^2 \rangle} \quad (7.5)$$

où  $T' = T - \langle T \rangle$ . Il est ainsi possible d'estimer l'importance des fluctuations négligées par l'épaississement. Bien que l'épaississement ne soit pas équivalent à un filtrage il a pour conséquence indirecte de filtrer les fluctuations du front de flamme. La variance de température est plus faible de 24,7% pour  $F = 5$  et de 29,0% pour  $F = 15$ .

Pour les épaississements étudiés, l'intensité des fluctuations filtrées peut être comparée à l'intensité des fluctuations sous-mailles pour un filtre de 20 mailles DNS dans le chapitre 5. Pour de telles tailles de filtre l'erreur due aux fluctuations sous-maille est de l'ordre de 1% (cf. Fig. 5.7). L'erreur obtenue sur les termes radiatifs moyen est cohérente avec les résultats précédent dans le contexte du filtrage.

|   | Unité       | $F = 1$ | $F = 5$ | $F = 15$ |
|---|-------------|---------|---------|----------|
| $\langle T \rangle$                     | K           | 1758,4  | 1668,6  | 1480,2   |
| $T_{rms}$                               | K           | 984,6   | 741,5   | 699,2    |
| $\epsilon_{T_{rms}}$                    | %           | –       | 24,7    | 29,0     |
| $\langle S_r \rangle$                   | $kW.m^{-3}$ | 679,7   | 561,7   | 288,3    |
| $\epsilon_{\langle S_r \rangle}$        | %           | –       | 17,4    | 57,6     |
| $\langle A \rangle$                     | $kW.m^{-3}$ | 1140,4  | 1081,5  | 1011,0   |
| $\epsilon_{\langle A \rangle}$          | %           | –       | 5,2     | 11,3     |
| $\langle E \rangle$                     | $kW.m^{-3}$ | 1820,1  | 1643,1  | 1299,3   |
| $\epsilon_{\langle E \rangle}$          | %           | –       | 9,7     | 28,6     |
| $V_{gc}$                                | %           | 71,6    | 63,5    | 49,6     |
| $\langle E \rangle / V_{gc}$            | $kW.m^{-3}$ | 2577,5  | 2586,7  | 2617,0   |
| $\epsilon_{\langle E \rangle / V_{gc}}$ | %           | –       | 0,4     | 1,5      |
| $\langle q_{r,x} \rangle$               | $kW.m^{-2}$ | –676,7  | –677,1  | –677,2   |
| $\epsilon_{\langle q_{r,x} \rangle}$    | %           | –       | < 0,1   | < 0,1    |

TAB. 7.2 – Valeurs moyennées sur les champs des grandeurs radiatives pour étudier l'influence du plissement sur le rayonnement.

## 7.2 CONCLUSION

Dans ce chapitre l'influence sur le rayonnement du plissement non résolu d'une flamme épaissie été analysée par une étude *a priori* sur une configuration d'interaction flamme-vortex. Cette question est proche du problème de l'interaction rayonnement-turbulence car le plissement non résolu a pour conséquence indirecte de filtrer des fluctuations. La comparaison des valeurs moyennes sur le domaine a montré un impact assez faible. Le terme source radiatif moyen est conservée dans la mesure où l'effet géométrique d'extension de la flamme est corrigé. Les composantes moyennes du flux radiatif sont en très bon accord pour les différents épaississements ce qui est cohérent avec l'étude du cas laminaire.

L'étude de ce cas instationnaire est délicate car il est difficile de définir les quantités qui se conservent. Aussi ces résultats doivent être utilisés avec précaution. Cependant les résultats trouvés sont en accord avec les résultats des études précédentes de la TRI en LES [113, 115, 116] qui n'ont pas révélé d'impact significatif des fluctuations sous-maille sur le rayonnement. L'épaississement induit un filtrage à une taille plus grande que les mailles LES, cependant l'étude du chapitre 5 a montré que les fluctuations filtrées avaient un impact faible pour des mailles allant jusqu'à 100 fois la taille des mailles de DNS.

Pour un calcul LES utilisant le modèle de flamme épaissie, il peut être considéré que l'impact de la modification de l'épaisseur optique et du plissement sous-maille sur le rayonnement est faible et donc :

$$\overline{S_r(T, Y_k)} \approx S_r(\tilde{T}, \tilde{Y}_k) \quad (7.6)$$

## **Quatrième partie**

# **Du couplage instationnaire rayonnement-combustion turbulente en LES**



## Introduction

Les différentes études menées dans les parties II et III ont montré qu'il est possible de faire un calcul radiatif sur une solution LES sans que ni le filtrage ni le modèle de flamme épaissie ne modifient significativement les transferts radiatifs. Ces calculs radiatifs ont été effectués dans une approche de post-traitement à partir de solutions fluides existantes essentiellement pour évaluer l'impact de la turbulence sur le rayonnement.

Dans l'optique d'évaluer la rétro-action du rayonnement sur la dynamique de la combustion turbulente le calcul couplé rayonnement-combustion turbulente doit être mis en oeuvre. Dans un premier chapitre les éléments nécessaires à la mise en place du calcul couplé sont détaillés. La méthodologie de couplage est définie et les temps de calculs discutés pour atteindre un compromis acceptable entre le solveur radiatif et le solveur fluide. Dans un dernier chapitre le couplage est appliqué à une configuration LES de flamme turbulente prémélangée et les effets du rayonnement sur la combustion turbulente sont évalués.



# Sommaire

---

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| <b>8</b> | <b>Méthodologie de couplage en LES</b>                              | <b>165</b> |
| 8.1      | CONTEXTE . . . . .  | 165        |
| 8.2      | CONFIGURATION . . . . .   | 166        |
| 8.3      | STRATÉGIE ET FRÉQUENCE DE COUPLAGE . . . . .                        | 170        |
| 8.4      | PARAMÈTRES DU CALCUL RADIATIF . . . . .                             | 172        |
| 8.5      | RÉDUCTION DE MAILLAGE POUR LE RAYONNEMENT . . . . .                 | 178        |
| 8.6      | CONDITIONS AUX LIMITES RADIATIVES . . . . .                         | 181        |
| 8.7      | TEMPS DE CALCUL ET SYNTHÈSE . . . . .                               | 184        |
| 8.8      | CONCLUSION . . . . .  | 188        |
| <b>9</b> | <b>Couplage combustion-rayonnement</b>                              | <b>191</b> |
| 9.1      | INTERFACE DE COUPLAGE . . . . .                                     | 192        |
| 9.2      | IMPACT DU RAYONNEMENT SUR LA COMBUSTION TURBULENTE . . . . .        | 196        |
| 9.3      | INTERACTION DU RAYONNEMENT ET DE LA COMBUSTION TURBULENTE . . . . . | 226        |
| 9.4      | CONCLUSION . . . . .  | 231        |

---



# DÉVELOPPEMENT D'UNE MÉTHODOLOGIE DE COUPLAGE COMBUSTION RAYONNEMENT EN LES

Le couplage de la combustion turbulente et du rayonnement nécessite de développer une méthodologie spécifique pour optimiser le temps de calcul tout en conservant la précision. En effet, le calcul d'une solution radiative, avec la méthode des ordonnées discrètes, a un coût CPU entre 1000 et 10 000 fois plus important que la résolution d'un seul pas de temps pour la combustion.

Après avoir présenté la configuration LES utilisée dans cette partie, la fréquence de couplage est déterminée. Ensuite l'influence sur la précision du modèle spectral et de la quadrature angulaire sera étudiée. A partir des conclusions du chapitre 5, un critère de réduction de maillage sera proposé pour réduire le temps CPU et la mémoire utilisée par le solveur radiatif. La prise en compte de la réflexion aux parois sera également discutée. Enfin l'influence de l'ensemble des paramètres étudiés sur le temps de calcul sera résumée à la fin de ce chapitre.

## 8.1 CONTEXTE

Les calculs LES seuls engendrent, un temps CPU important. Cela s'explique par le fait que ces calculs sont instationnaires, mais aussi par la nécessité d'utiliser des maillages fins pour résoudre les échelles du mouvement turbulent. La littérature traitant du rayonnement dans des LES est assez limitée et très peu de travaux utilisent simultanément un maillage important (plus d'un million de mailles) et des modèles radiatifs avec une description spectrale détaillée des propriétés d'absorption du gaz. Les principaux sont donnés ici.

On peut retenir les travaux de Desjardin *et al.* [121] qui ont réalisé un couplage combustion rayonnement dans une configuration bidimensionnelle. Le solveur radiatif est basé sur la méthode DOM. Le modèle d'absorption est gris et ne décrit que l'absorption des suies. Le maillage contient  $160 \times 101 \sim 16000$  cellules. Jones *et al.* [122] ont également utilisé des DOM dans un calcul LES de turbine utilisant des quadratures  $S_n$ . Cependant le milieu est considéré comme gris et les propriétés spectrales des gaz sont complètement négligées. Le maillage contient  $20 \times 20 \times 40 = 16000$  cellules. Enfin, les résultats de la thèse de D. Joseph [2, 66] ont montré l'application du code DOMASIUM sur la configuration PRECCINSTA [66], qui est une configuration

de laboratoire représentative des flammes swirlées de turboréacteurs. Il a utilisé le modèle spectral SNBcK et un maillage contenant 138000 cellules.

Plus récemment, Dos Santos *et al.* [123, 124] ont travaillé sur la faisabilité du couplage rayonnement-combustion en utilisant la configuration du dièdre (également utilisée dans la suite de ce travail) pour des situations 2D ou 3D. Dans un premier temps une situation 2D est étudiée [124] avec un code de lancer de rayon, pour le cas 3D une version optimisée du code DOMASIUM [2] a été utilisée. Dans les deux cas, le maillage radiatif contient 3,3 millions de cellules et le modèle spectral est un modèle CK utilisant 44 bandes pour H<sub>2</sub>O et 17 pour CO<sub>2</sub>.

## 8.2 CONFIGURATION

La configuration retenue pour le calcul LES est celle étudiée par Knikker *et al.* à l'EM<sub>2</sub>C<sup>1</sup> [125, 126, 127]. Elle est représentée sur les Fig. 8.1, 8.2, 8.3. Cette configuration a été étudiée numériquement par Goncalves dos Santos *et al.* [123, 124].

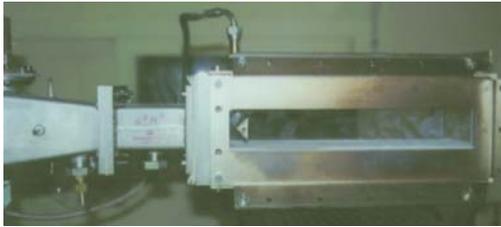


FIG. 8.1 – Photo du dispositif expérimental de l'EM<sub>2</sub>C (éteint) [125, 126, 127, 123].

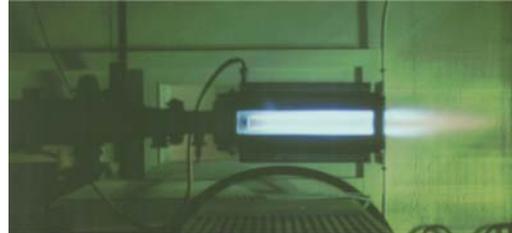


FIG. 8.2 – Photo du dispositif expérimental de l'EM<sub>2</sub>C (allumé) [125, 126, 127, 123].

Un prémélange d'air/propane est injecté dans la chambre de combustion rectangulaire. Les dimensions de la chambre en hauteur, profondeur et longueur sont respectivement 50, 80 et 300 mm. Les parois latérales sont en quartz artificiel permettant de visualiser la flamme. Les parois hautes et basses sont en céramique épaisse pour l'isolation thermique, elles incluent des fenêtres de quartz étroites utilisées pour introduire le plan LASER pour les mesures (cf. Fig. 8.3).

Un accroche flamme triangulaire en acier inoxydable est fixé sur les parois latérales, à une hauteur de 25 mm, correspondant à un rapport de blocage de 50%. La flamme turbulente se stabilise en forme de V, dans la zone de recirculation de gaz chauds en aval du dièdre. Plusieurs régimes existent en fonction de la vitesse d'entrée et de la richesse du mélange. Dans ce travail, la vitesse d'entrée est de 5 m.s<sup>-1</sup> avec une richesse de  $\phi = 1$  ce qui correspond à un régime turbulent avec un niveau de turbulence de 5%.

### 8.2.1 Calcul LES

Le domaine de calcul reprend la géométrie de la configuration expérimentale (Fig. 8.3). L'entrée est à 10 cm en amont de l'accroche flamme et la chambre mesure 60 cm. Le

<sup>1</sup>Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion : <http://www.em2c.ecp.fr/>

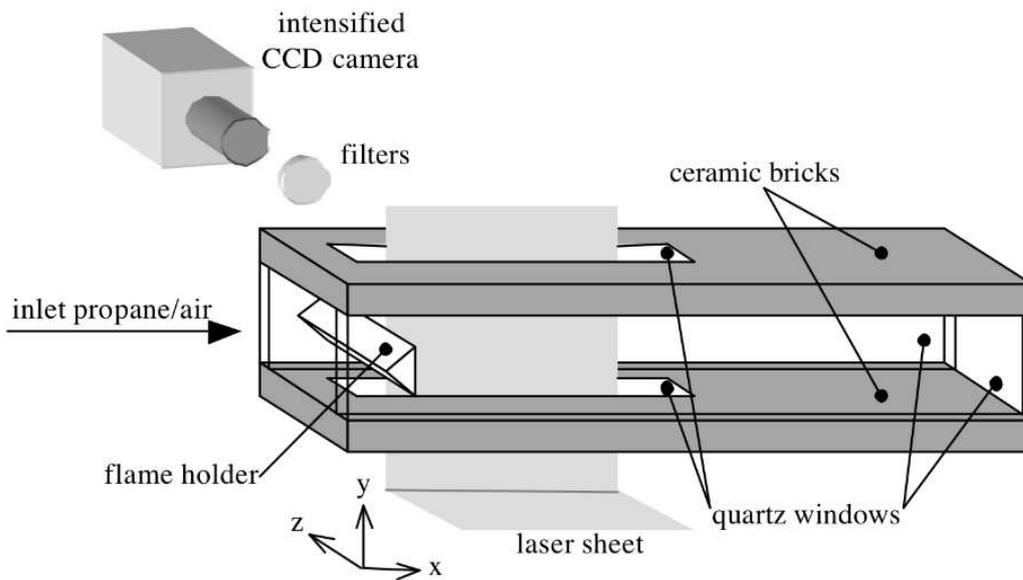


FIG. 8.3 – Configuration pour le calcul couplé combustion rayonnement en LES. Une flamme d'air/propane prémélangée est stabilisée derrière un accroche flamme triangulaire[125].

maillage contient environ 4,7 millions de cellules tétraédriques. La taille des cellules en aval du dièdre est  $\Delta = 1 \text{ mm}$  puis augmente progressivement vers la sortie de la chambre (Fig. 8.4, 8.5). L'atmosphère à la sortie a également été représentée avec un écoulement d'azote, de type « coflow » ajouté en sortie de la chambre pour réduire l'influence de la condition de sortie.

Les conditions aux limites NSCBC (cf section 1.4.1) ont été utilisées pour imposer une pression statique à la sortie et éviter la réflexion d'ondes acoustiques dans le domaine. Les conditions d'entrée sont données pour l'écoulement en amont du dièdre à une vitesse de  $5 \text{ m.s}^{-1}$  pour le mélange air/propane à une température de  $300 \text{ K}$  et une richesse de  $\phi = 1$ . Les conditions d'entrée pour le cocourant sont une vitesse de  $20 \text{ m.s}^{-1}$  et une température de  $1900 \text{ K}$ .

Les conditions limites utilisées aux parois sont définies par une perte de chaleur aux parois. La résistivité thermique des parois est estimée à  $R_{th} = 0,096 \text{ K.m}^2.\text{W}^{-1}$  [123] pour les faces en céramique haute et basse,  $R_{th} = 0,086 \text{ K.m}^2.\text{W}^{-1}$  [123] pour les faces de quartz avant et arrière et  $R_{th} = 120 \text{ K.m}^2.\text{W}^{-1}$  [123] pour le dièdre. Les autres parois (atmosphère en sortie de la chambre) sont considérées adiabatiques avec une condition de glissement.

Le schéma volumes finis avec une intégration temporelle Runge-Kutta du deuxième ordre est utilisé. La convergence du calcul a été assurée avec le schéma spatial Lax-Wendroff puis le schéma TTGC, d'ordre plus élevé, a été utilisé.

L'origine du repère est définie au centre du dièdre, plusieurs axes sont définis le tracé de profils : l'axe x central, l'axe transverse y pour  $x = 9 \text{ cm}$  et un axe x à la paroi pour  $y = 2,5 \text{ cm}$ , voir Fig. 8.6.

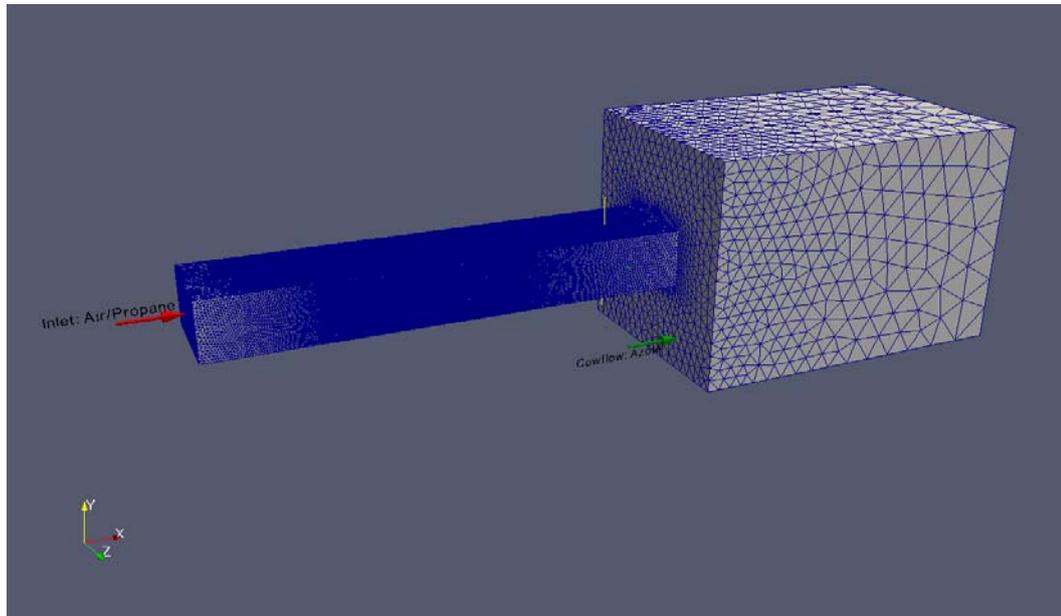


FIG. 8.4 – Maillage utilisé dans AVBP avec 4,7 millions de cellules tétraédriques.

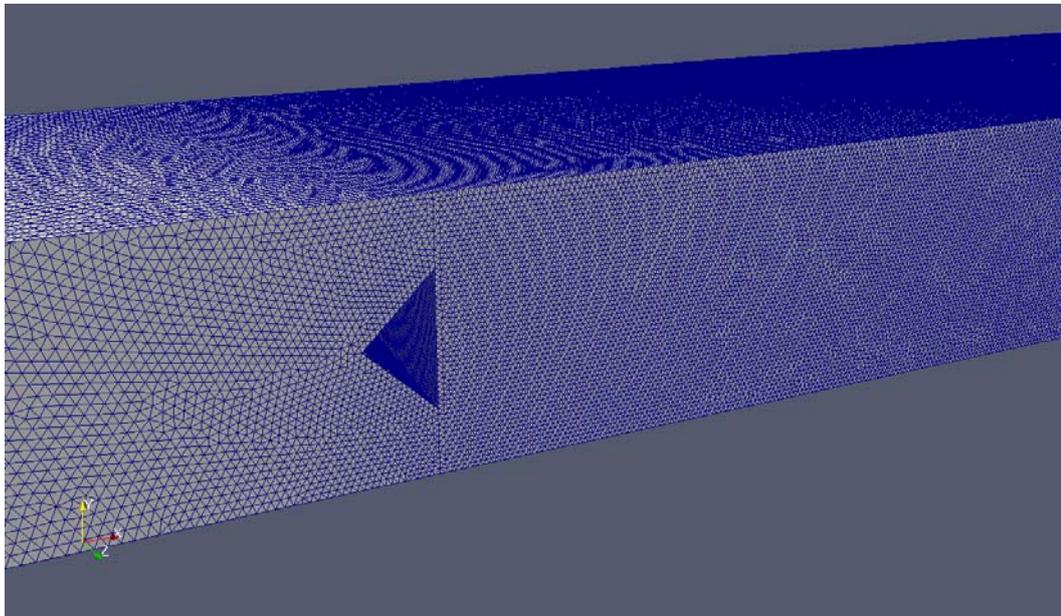


FIG. 8.5 – Détail du maillage près de l'accroche flamme.

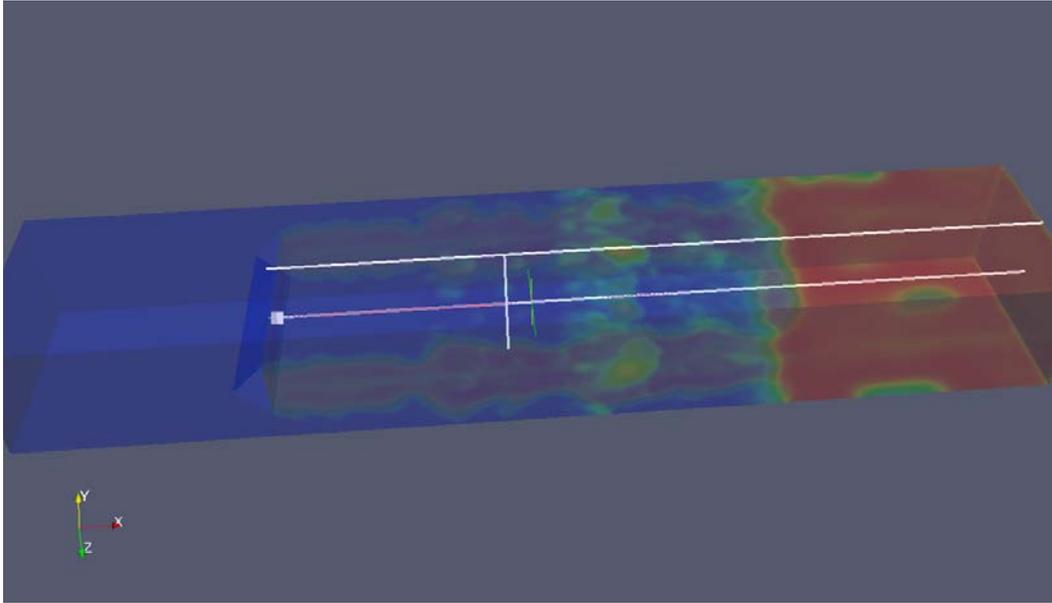
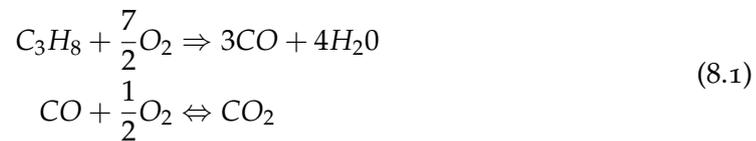


FIG. 8.6 – L'origine est au centre du dièdre, plusieurs axes sont définis pour tracer des profils : l'axe  $x$  central, l'axe transverse  $y$  pour  $x = 9$  cm et un axe  $x$  à la paroi pour  $y = 2,5$  cm

### 8.2.2 Modélisation de la chimie

Le modèle de flamme épaissie dynamique a été utilisé pour la modélisation de la combustion turbulente. La chimie a été résolue avec un schéma à deux étapes :



Les taux de réaction correspondants sont données par :

$$\dot{\omega}_1 = A_1[\text{C}_3\text{H}_8]^{\alpha_1}[\text{O}_2]^{\beta_1} \exp(-E_{a_1}/RT) \quad (8.2)$$

$$\dot{\omega}_2 = A_2[\text{CO}]^{\alpha_2}[\text{O}_2]^{\beta_2} \exp(-E_{a_2}/RT) \quad (8.3)$$

où  $[X]$  est la fraction molaire de l'espèce  $X$ ,  $\alpha_i$  et  $\beta_i$ , les coefficients correspondants.  $A_i$  est le facteur pré-exponentiel,  $E_{a_i}$  est l'énergie d'activation.  $R$  et  $T$  sont respectivement la constante des gaz parfaits et la température. Les taux de réactions  $\dot{\omega}_i$  sont calculés à partir des équations 8.2 et 8.3 en utilisant les champs filtrés de concentration et de température. Les paramètres chimiques utilisés sont résumés dans le tableau 8.1.

Les valeurs utilisées conduisent à une vitesse de flamme laminaire  $s_l^0 = 0.48 \text{ m.s}^{-1}$  pour une richesse  $\Phi = 1$ . Le modèle d'épaississement utilise une valeur d'épaississement maximal  $F_{max} = 11$ .

| Paramètres    | $\alpha_i$ | $\beta_i$ | $A_i(\text{cgs})$     | $E_{a_i}(\text{cal.mol}^{-1})$ |
|---------------|------------|-----------|-----------------------|--------------------------------|
| Réaction (I)  | +0.9028    | +0.6855   | $2,0 \times 10^{12}$  | 33000,0                        |
| Réaction (II) | +1.0       | +0.50     | $-4,5 \times 10^{10}$ | 12000,0                        |

TAB. 8.1 – Paramètres pour le modèle chimique de combustion du propane à deux étapes.

## 8.3 STRATÉGIE ET FRÉQUENCE DE COUPLAGE

### 8.3.1 Stratégie de couplage

Pour réaliser le calcul couplé, le terme source radiatif  $S_r$  doit être connu dans le solveur fluide AVBP. Le solveur radiatif, PRISSMA quant à lui nécessite les champs de température  $T$ , pression  $P$  et fractions molaires des espèces rayonnantes  $X_k$  ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  et éventuellement la fraction volumique de suies). Pour échanger les données entre les deux codes de calcul, deux stratégies sont envisageables.

La première stratégie est séquentielle<sup>2</sup>. Dans ce cas toutes les ressources sont allouées alternativement aux deux codes, voir Fig. 8.7(a). Dans ce cas les ressources informatiques sont toutes attribuées successivement à un solveur pendant que l'autre attend. L'autre stratégie de couplage est parallèle<sup>3</sup>, les ressources sont alors partagées entre les deux solveurs. Les deux codes sont exécutés en même temps en utilisant les données de l'itération précédente de couplage, voir Fig. 8.7(b). Dans ce travail la stratégie parallèle a été utilisée, stratégie étudiée par Duchaine *et al.* dans [128].

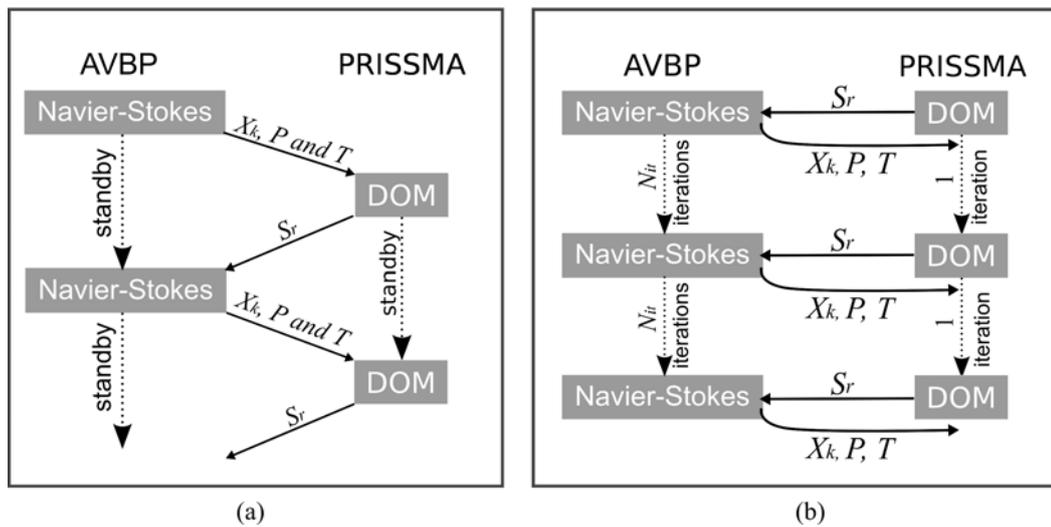


FIG. 8.7 – (a) Stratégie de couplage séquentielle (SCS) et (b) Stratégie de couplage parallèle (PCS).

La mise en place d'un calcul couplé requiert une bonne synchronisation à la fois en temps physique et en temps CPU.

<sup>2</sup>SCS pour Sequential Coupling Strategy

<sup>3</sup>PCS pour Parallel Coupling Strategy

### 8.3.2 Synchronisation en temps physique

L'ETR est résolue de façon stationnaire à l'échelle des temps caractéristiques du fluide, le champ radiatif n'évolue pas durant le pas de temps du fluide. Aussi il est théoriquement possible de coupler la solution radiative à chaque itération de la solution fluide. Cependant un tel calcul engendrerait des temps de calcul beaucoup trop importants en raison du temps de résolution plus élevé du solveur radiatif. Il convient donc de définir une fréquence de couplage pour ne coupler le rayonnement que toutes les  $N_{it}$  itérations de solution fluide.

Le solveur fluide LES, AVBP, basé sur une formulation compressible des équations de Navier-Stokes, utilise le critère CFL (voir 1.4.1) pour définir le pas de temps  $\Delta t_{LES}$ . Dans le cas d'écoulement à faible nombre de Mach, le pas de temps est fixé par la propagation des ondes acoustiques dans le domaine :

$$\Delta t_{LES} = \frac{0,7 \times \Delta x_{min}}{c_s} \quad (8.4)$$

où  $\Delta x_{min}$  est la taille de la plus petite maille et  $c_s$  la vitesse du son dans le milieu. Pour la configuration étudiée,  $\Delta t_{LES} \approx 2 \mu s$ .

Le rayonnement évolue avec un temps caractéristique  $\Delta t_{Rad}$ . Ce temps est fixé par le temps caractéristique auquel évoluent les poches de gaz chaud dans le domaine. Le critère proposé par Lecanu [129] et Wang [130] consiste à utiliser le temps convectif pour estimer  $\Delta t_{Rad}$  :

$$\Delta t_{Rad} = \frac{\Delta x_{min}}{\bar{u}} \quad (8.5)$$

où  $\bar{u}$  est la vitesse moyenne de l'écoulement.

Ainsi le champ de terme source radiatif communiqué au solveur fluide doit être mis à jour toutes les  $N_{it}$  itérations tel que :

$$N_{it} = \frac{\Delta t_{Rad}}{\Delta t_{LES}} = \frac{c_s}{0,7 \times \bar{u}} \quad (8.6)$$

Pour les écoulements subsoniques considérés  $N_{it} \sim 100$ . Cette fréquence de couplage a été étudiée dans les travaux de Dos Santos *et al.* [124, 123] sur la configuration étudiée pour des valeurs de 20, 100 et 500. Il semble que la valeur  $N_{it} = 100$  soit le meilleur compromis, cette valeur est conservée pour être utilisée dans la suite de l'étude.

### 8.3.3 Synchronisation en temps CPU

Le temps de calcul entre deux itérations de couplage doit garantir que  $N_{it}$  itérations pour la mécanique des fluides soient calculées en même temps qu'une solution radiative :

$$N_{it} t_{LES} = t_{Rad} \quad (8.7)$$

où  $t_{LES}$  et  $t_{Rad}$  sont respectivement les temps de calcul d'une itération pour le fluide et pour le rayonnement. Le temps de calcul de chaque code dépend du nombre de processeurs alloués à chaque code :

$$\begin{aligned} t_{LES} &= \alpha(P_{LES}) t_{LES}^1 / P_{LES} \\ t_{Rad} &= \alpha(P_{Rad}) t_{Rad}^1 / P_{Rad} \end{aligned} \quad (8.8)$$

où  $t_*^1$  est le temps de calcul mono-processeur,  $P_*$  le nombre de processeurs alloués et  $\alpha_*(P_*)$  le facteur de speed-up. Dans un code ayant une scalabilité parfaite le facteur de speed-up est considéré égal à 1, ce qui est le cas pour AVBP et PRISMA pour le nombre de processeurs utilisés. En combinant les Eq. 8.7, 8.8 et connaissant le nombre total de processeurs :  $P = P_{LES} + P_{Rad}$ , la distribution de la charge sur les processeurs (*i.e.* « Load Balancing ») est obtenue par :

$$P_{LES} = \frac{P}{(t_{Rad}^1/t_{LES}^1)/N_{it} + 1} \quad (8.9)$$

### 8.3.4 Validation de la fréquence de couplage

Dans le cadre du travail sur l'interaction rayonnement turbulence, on peut se demander si le temps convectif, qui utilise la vitesse moyenne de l'écoulement, est suffisant pour décrire l'évolution du champ de terme source radiatif. Ce temps pourrait être donné par le temps moyen de retournement des tourbillons ou en utilisant la vitesse maximale de l'écoulement. Pour vérifier si des effets de turbulence interviennent durant  $100\Delta t_{LES}$ , l'évolution de  $S_r$  a été étudiée sur 100 pas de temps du fluide.

Pour valider la fréquence de couplage choisi  $N_{it} = 100$ , une comparaison de différents champs radiatifs  $S_r$  a été faite le long de l'axe central ( $y = 0, z = 0$ ) de la configuration en aval du dièdre, voir Fig. 8.8. Partant d'une solution instantanée où la turbulence est pleinement établie, à l'instant  $t_1$ , le champ radiatif  $S_r(T(t_1), X_i(t_1))$  est calculé. Puis le champ radiatif a été calculé en utilisant les champs de température et de concentration de l'instant  $t_1 + 100it$ ,  $S_r(T(t_1 + 100it), X_i(t_1 + 100it))$ . Enfin le champ radiatif a été évalué à partir des champs moyens sur les 100 itérations,  $S_r(\langle T \rangle_{100it}, \langle X_i \rangle_{100it})$ . Le résultat montre que ces champs sont très proches, presque confondus. Le pas de temps  $\Delta t_{Rad} = 100\Delta t_{LES}$  retenu dans les travaux de Dos Santos *et al.* semble bien justifié. La turbulence ne semble pas avoir d'impact sur le terme source radiatif à une échelle de temps inférieure au temps convectif.

## 8.4 PARAMÈTRES DU CALCUL RADIATIF

Pour évaluer l'impact de chacun des paramètres du calcul radiatif, le terme source radiatif a été évalué sur une solution instantanée. La Fig. 8.9 donne un exemple de champ de température sur deux coupes suivant  $y = 0$  et  $z = 0$ . La Fig. 8.10 donne un exemple de champ radiatif  $S_r$  sur ces coupes.

L'étude des différents paramètres du solveur radiatif sur  $S_r$  sera faite sur l'axe central de la configuration  $y = 0, z = 0$  pour  $0.01 < x < 0,3 m$  en utilisant le maillage de la solution de la combustion. Dans un premier temps les parois sont supposées noires, à une température de 300 K sauf le cocourant qui a une température de 1900 K.

### 8.4.1 Modèle spectral

Le modèle spectral est le paramètre de calcul le plus important sur le temps de résolution du solveur radiatif. En effet le nombre de résolution de l'ETR pour chaque

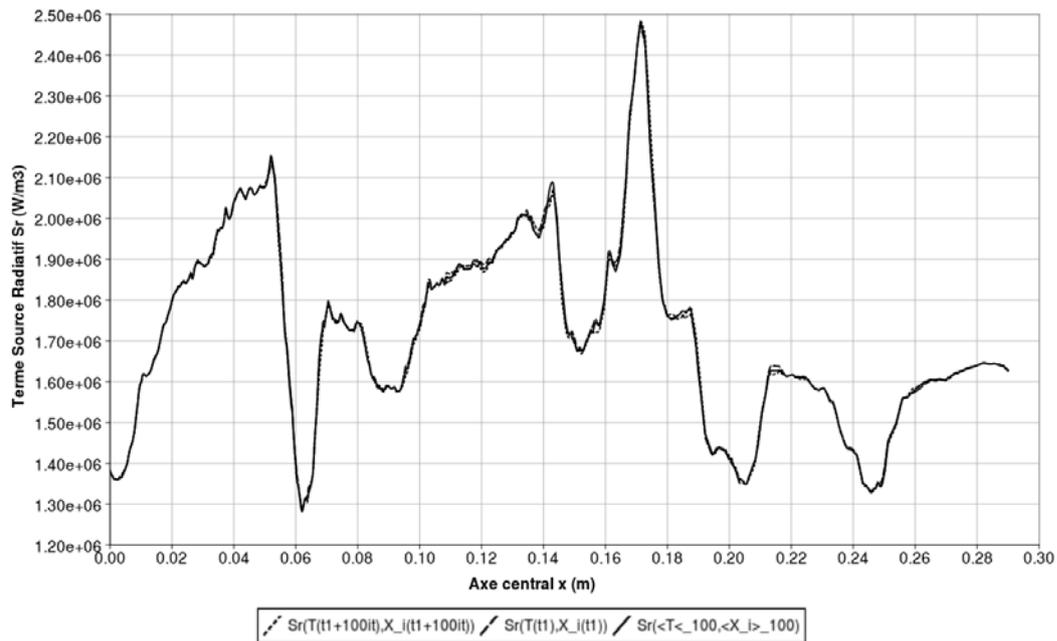


FIG. 8.8 – Validation du critère de couplage en comparant  $Sr(T(t_1), X_i(t_1))$ ,  $Sr(T(t_1 + 100it), X_i(t_1 + 100it))$  et  $Sr(\langle T \rangle_{100it}, \langle X_i \rangle_{100it})$ .

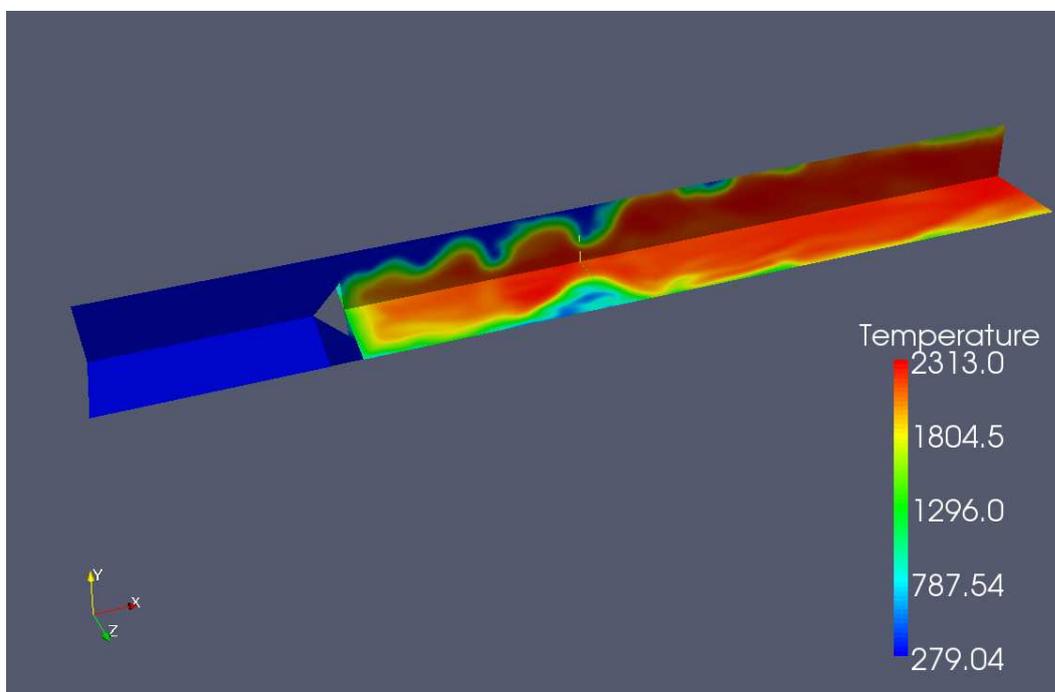


FIG. 8.9 – Coupes du champ de température sur une solution instantanée suivant  $y = 0$  et  $z = 0$ .

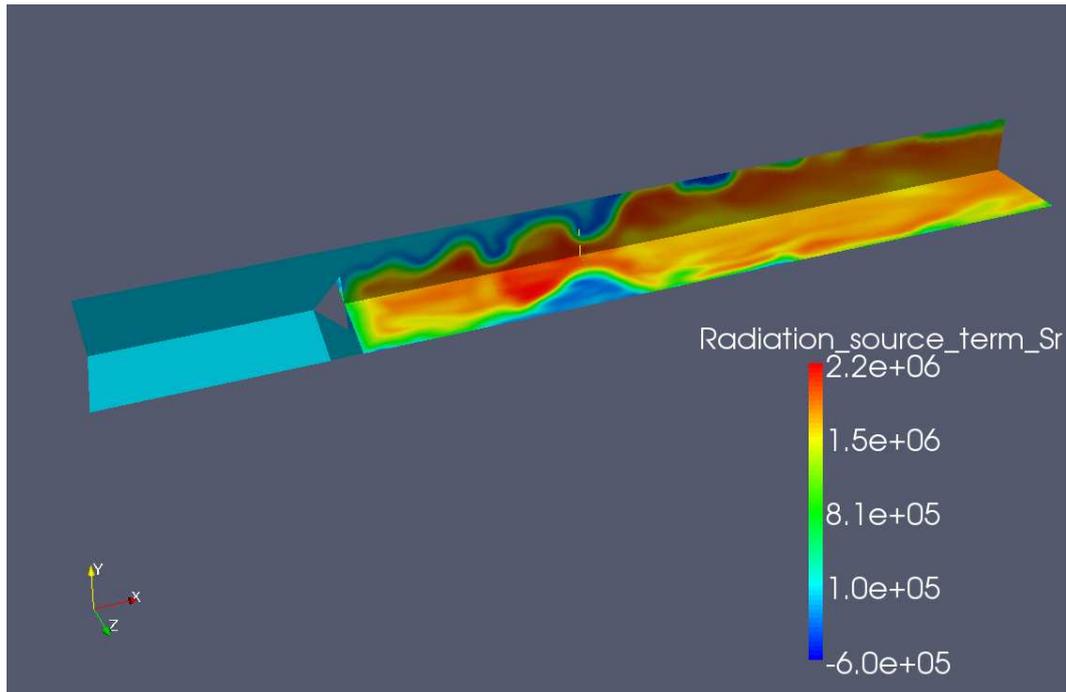


FIG. 8.10 – Coupes du champ de terme source radiatif  $S_r$  ( $W/m^3$ ) sur une solution instantanée suivant  $y = 0$  et  $z = 0$ .

direction dépend directement du nombre de bandes utilisé et du nombre de points de quadrature (cf. chapitre 3).

Dans un premier temps l'impact du modèle spectral est évalué (Fig. 8.11). Des modèles identiques à ceux utilisés dans le chapitre 3 ont été utilisés : SNBcK, WSGG et FS-SNBcK. La solution de référence est fournie par le modèle SNBcK qui est le modèle le plus détaillé.

Le modèle WSGG a été utilisé sur cette configuration principalement pour fournir une référence en temps minimal de calcul. En effet, les résultats sur la Fig. 8.11 montrent que le modèle WSGG sous estime sévèrement le terme source radiatif, avec une erreur de l'ordre de 60%. Cependant il est important de préciser que le modèle WSGG est tabulé pour une fraction constante de concentration de  $CO_2$  et de  $H_2O$  qui correspond à la combustion parfaite du méthane :  $\frac{X_{CO_2}}{X_{H_2O}} = \frac{1}{2}$ . Si la combustion du propane est supposée parfaite, la fraction des concentrations de  $CO_2$  et de  $H_2O$  est  $\frac{X_{CO_2}}{X_{H_2O}} = \frac{3}{4}$ . Le modèle WSGG n'utilise comme paramètre que la concentration de  $H_2O$ , la concentration de  $CO_2$  étant supposée constante et égale à la moitié de la concentration de  $H_2O$  dans les données utilisées. Dans le cas de la combustion du propane la concentration de  $CO_2$  est alors sous-estimée d'un facteur  $\frac{2}{3}$  ce qui explique une erreur si importante. Cette contrainte est une limite pour ce modèle dont les données utilisées doivent être changées en fonction de la flamme étudiée. Par ailleurs l'hypothèse de rapport de concentrations constant n'est pas exacte dans une flamme turbulente où les nombres de Schmidt ne sont pas constants. Enfin ce modèle n'est pas précis particulièrement proche des parois et ne prend pas en compte l'absorption du CO. C'est pourquoi le modèle FS-SNBcK a été utilisé car il permet de s'affranchir de ces approximations et la tabulation permet d'atteindre le temps de calcul du WSGG.

Le modèle FS-SNBcK qui a été étudié dans le chapitre 3 sur des configurations simples a été appliqué sur cette flamme turbulente. La Fig. 8.11 montre qu'en augmentant le nombre de points de quadrature, la solution FS-SNBcK converge vers la solution SNBcK. Cette conclusion est en accord avec l'étude sur les limites de ce modèle, en effet la configuration est de dimension réduite,  $L = 30 \text{ cm}$ , ce qui la rapproche des cas optiquement fins. La solution avec  $N_q = 15$  est en très bon accord avec la solution SNBcK avec une erreur maximale de l'ordre de 3% sur le profil étudié. Le problème est que ce modèle reste coûteux en temps CPU mais la tabulation des coefficients d'absorption permet de réduire significativement le temps de calcul de façon (voir chapitre 3).

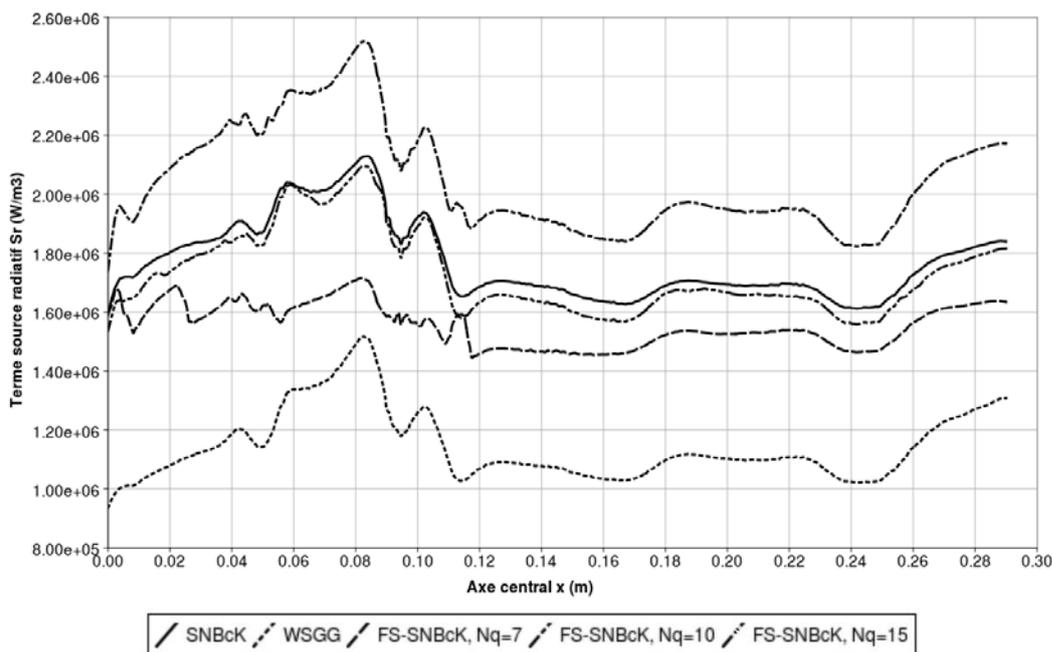


FIG. 8.11 – Impact du modèle spectral sur  $S_r$  avec les modèles : SNBcK, FS-SNBcK pour  $N_q = 7, 10, 15$  et WSGG.

La version tabulée du modèle FS-SNBcK a été utilisée sur la configuration du dièdre. Cette version du modèle FS-SNBcK permet d'atteindre des temps de calcul proches du modèles WSGG (voir chapitre 3 et Annexe A). Les paramètres de la table utilisés sont :  $\Delta T = 5 \text{ K}$ ,  $\Delta X_{H_2O} = \Delta X_{CO_2} = \Delta X_{CO} = 2\%$ . En utilisant les fractions molaires maximales de chaque espèce :  $X_{H_2O,max} = 0,18$ ,  $X_{CO_2,max} = 0,13$  et  $X_{CO,max} = 0,04$ , la taille de la table est réduite à 38Mo (format de fichier ascii). La comparaison aux modèles SNBcK et WSGG est faite sur la Fig. 8.12 pour  $N_q = 15$ . Le long de l'axe central l'erreur maximale est de l'ordre de 8% par rapport au modèle SNBcK, bien plus faible que l'erreur du modèle WSGG.

Afin de quantifier l'erreur induite par le modèle spectral, l'émission globale de la flamme a été calculée (tableau 8.2). L'erreur relative est donnée par rapport au modèle SNBcK. Si le modèle WSGG induit une erreur importante, 32%, l'erreur induite par le modèle FS-SNBcK, tabulé sur 15 points de quadrature est faible, 4%.

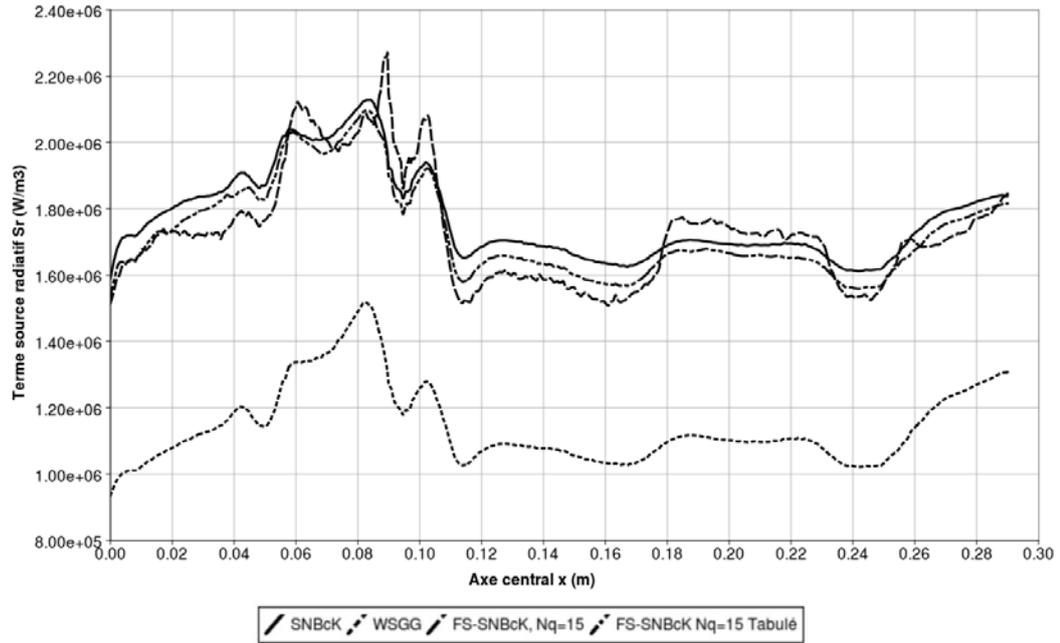


FIG. 8.12 – Impact de la tabulation du modèle FS-SNBcK avec  $N_q = 15$ .

| Modèle spectral               | Émission globale (W) | Erreur relative (%) |
|-------------------------------|----------------------|---------------------|
| SNBcK                         | 1396,92              | –                   |
| WSGG                          | 941,92               | 32,57               |
| FS-SNBcK, $N_q = 7$           | 1262,02              | 9,66                |
| FS-SNBcK, $N_q = 10$          | 1517,75              | 8,65                |
| FS-SNBcK, $N_q = 15$          | 1319,65              | 5,53                |
| FS-SNBcK, $N_q = 15$ , Tabulé | 1339,81              | 4,09                |

TAB. 8.2 – Emissions globales de la flamme pour différents modèles spectraux et erreurs relatives par rapport au modèle SNBcK.

### 8.4.2 Quadrature angulaire

Un autre paramètre important pour le solveur radiatif basé sur les DOM est la quadrature angulaire (voir chapitre 2). Une des limites connues dans la littérature des DOM est l'effet de rayon, il est capital de s'assurer que la quadrature angulaire est suffisante. Il a été montré que la quadrature  $LC_{11}$  qui utilise 96 directions fournit des solutions de référence comparables à des solutions de Monte Carlo. Une solution  $S_4$  a été comparée à une solution  $LC_{11}$  sur la Fig. 8.13.

Dans l'absolu la solution de référence consisterait à utiliser une quadrature  $LC_{11}$  conjointement avec le modèle SNBcK. Cependant l'augmentation du nombre de directions entre  $S_4$  et  $LC_{11}$  augmente le nombre de résolutions de l'ETR d'un facteur 4. Le temps de restitution sur une  $S_4$  avec le modèle SNBcK est déjà considérable sur cette configuration. Les temps de calcul  $LC_{11}$ /SNBcK ont simplement été estimés (tableau 8.6). Comme la quadrature spectrale et la quadrature angulaire sont indépendantes, le calcul  $LC_{11}$  a été réalisé avec le modèle FS-SNBcK avec  $N_q = 15$ . L'erreur due au choix de la quadrature angulaire le long de l'axe central est de l'ordre de 2,5%, ce qui est faible. L'émission globale calculé à partir de la quadrature  $LC_{11}$  et le modèle FS-SNBcK pour 15 points de quadrature est de 1326,31 W. L'erreur relative de la quadrature  $S_4$  sur l'émission globale est de 0,5%. L'utilisation d'une quadrature  $S_4$  sur cette configuration est donc pleinement justifiée. Enfin une récente étude sur cette configuration à montré un bon accord entre une solution Monte Carlo et une solution calculée par DOMASIUM pour une quadrature  $S_4$  [131].

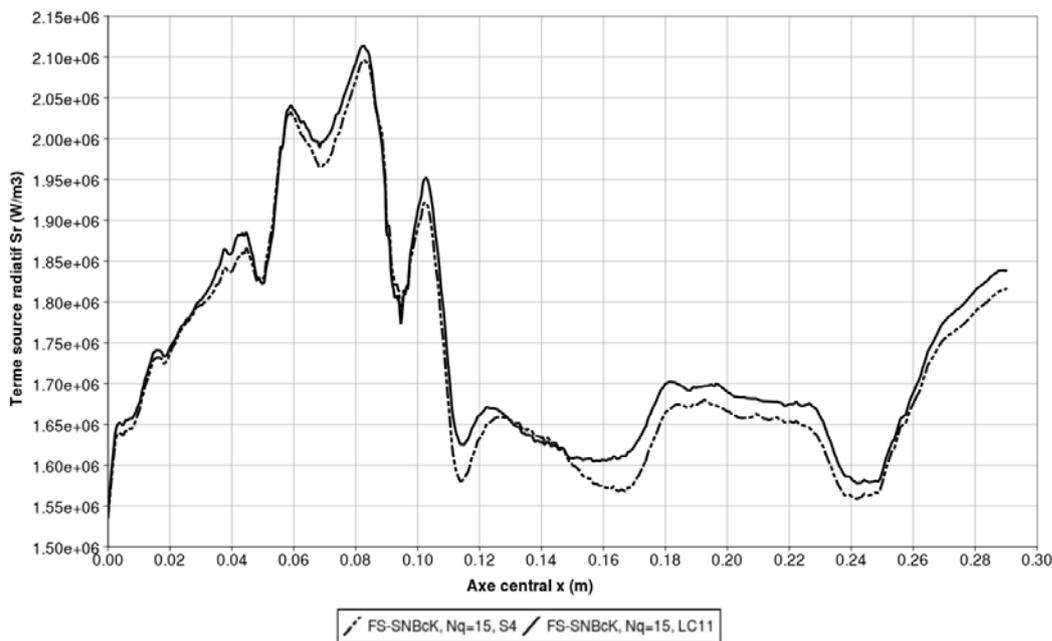


FIG. 8.13 – Impact de la quadrature angulaire sur la solution radiative, solution  $LC_{11}$  avec 96 directions, solution  $S_4$  avec 24 directions.

## 8.5 RÉDUCTION DE MAILLAGE POUR LE RAYONNEMENT

Dans le cadre de calcul couplés et de calculs massivement parallèles, l'occupation en mémoire du solveur radiatif est un point clé. Dans le solveur radiatif, les propriétés physiques de l'ensemble des mailles doivent être stockées. Par ailleurs dans la parallélisation adoptée dans PRISSMA selon un paradigme Maître/Esclave, les données sont dupliquées en mémoire sur chaque processeur. Sur le maillage de la combustion, l'occupation mémoire de chaque processeur est d'environ 4 Go (tableau 8.3), ce qui est le double de la mémoire disponible par processeur sur les machines utilisées (L'IBM JS21, 56 noeuds quadri-processeur Power5+@1.5 GHz, 8 Go de mémoire). Le solveur PRISSMA ayant déjà été optimisé en mémoire, une solution pour diminuer encore l'occupation mémoire est de réduire les données. Un critère de réduction de maillage pour le rayonnement a donc été étudié afin de réduire l'occupation mémoire tout en conservant la précision.

L'étude menée sur l'interaction rayonnement-turbulence faite au chapitre 5 a montré que les fluctuations de température avaient une influence de premier ordre sur le rayonnement. La solution moyenne de l'écoulement, ainsi que le champ moyen de fluctuations de température ont été représentés sur les coupes  $y = 0$  et  $z = 0$  sur les Fig. 8.14 et 8.15 respectivement.

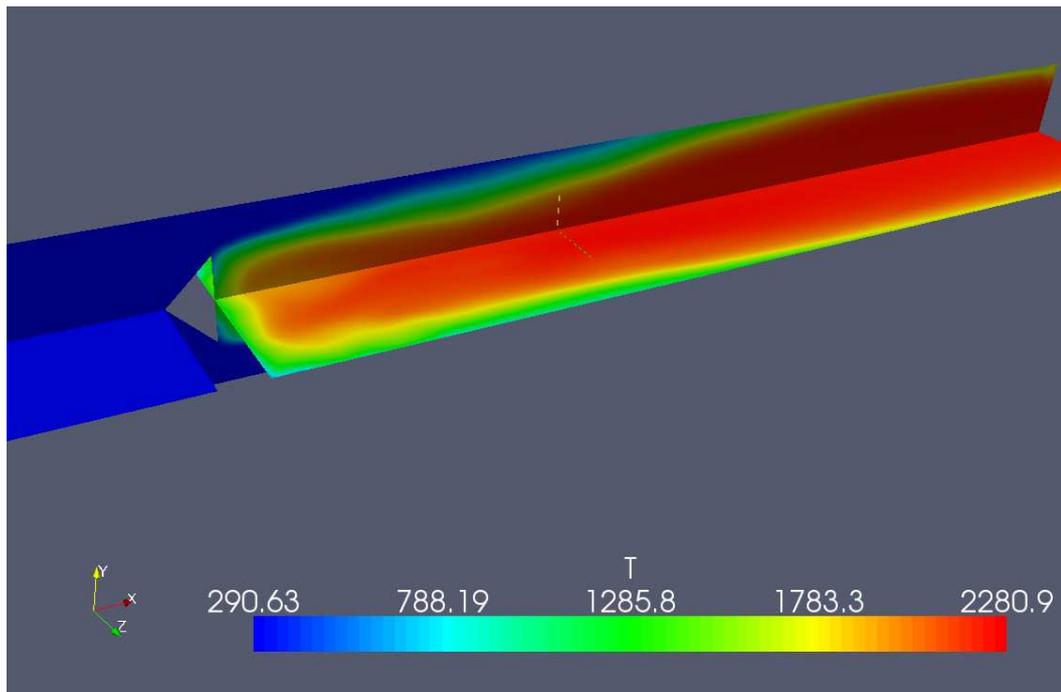


FIG. 8.14 – Champ moyen de température sur les coupes  $y = 0$  et  $z = 0$ .

La réduction de maillage proposée au chapitre 5, consiste à utiliser de plus grosses mailles dans les zones homogènes en température et à conserver des mailles de taille comparable au maillage de la combustion dans les zones de fluctuations de température.

Le maillage original (maillage o, Fig. 8.5) contient 4 744 561 cellules avec des mailles de 1 mm de côté en aval du dièdre. À partir de ce maillage et des champs moyens de

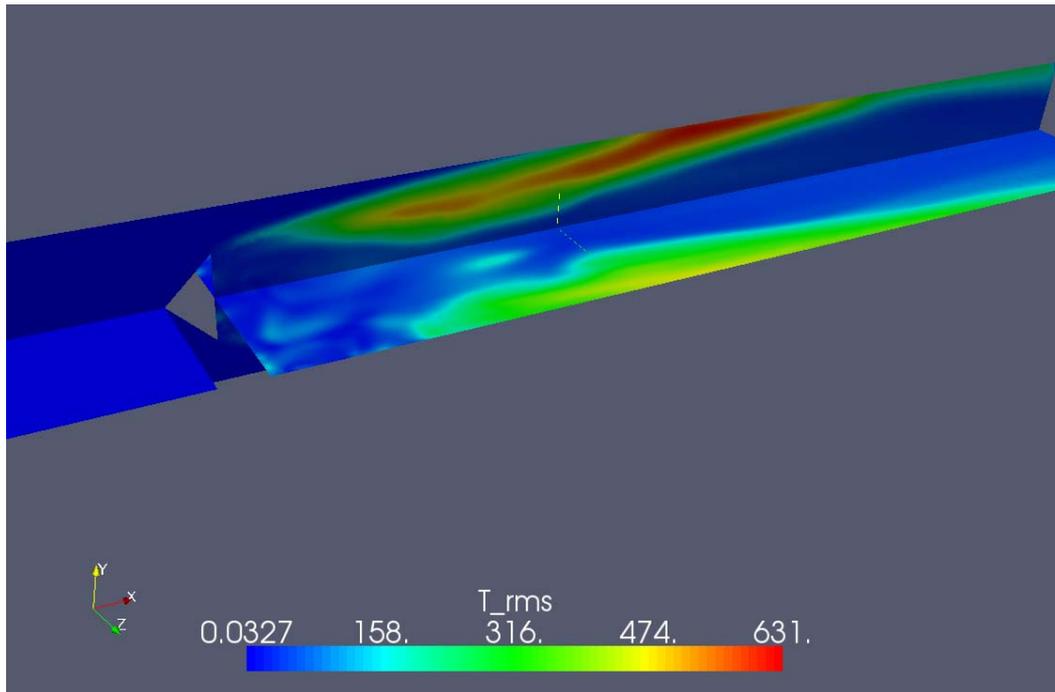


FIG. 8.15 – Champs moyen de fluctuations de température  $T_{RMS}$  sur les coupes  $y = 0$  et  $z = 0$ .

|            | Nombre de mailles | Master  | Slave   |
|------------|-------------------|---------|---------|
| Maillage 0 | 4 744 561         | 4500 Mo | 3378 Mo |
| Maillage 1 | 2 500 560         | 2246 Mo | 1605 Mo |
| Maillage 2 | 621 167           | 620 Mo  | 478 Mo  |

TAB. 8.3 – Utilisation mémoire du solveur radiatif PRISSMA pour les différents maillages utilisés.

$T$  et de  $T_{rms}$ , deux autres maillages sont proposés, Fig. 8.16 et 8.17. Ces maillages conservent des mailles petites dans les zones de forte  $T_{rms}$  (Fig. 8.15).

Dans les deux maillages, la zone froide en amont du dièdre, où il n’y a pas d’absorption, les mailles ont une taille beaucoup plus importante que sur le maillage original de l’ordre de 1 cm. Le maillage 1 contient 2 500 560 cellules et les mailles dans la zone de fluctuations de température, en aval du dièdre, ont la même taille que sur le maillage 0 (1 mm de côté). Le maillage 2 contient 621 167 cellules, les mailles dans la zone de fluctuations de température, en aval du dièdre, ont une taille deux fois plus importante que sur le maillage 0 (2 mm de côté). Le tableau 8.3 résume l’occupation mémoire associée. On observe que la réduction mémoire utilisée évolue linéairement avec le nombre de maille.

Lors de la réduction de maillage, il faut garder à l’esprit que la taille maximale des mailles pour le rayonnement est fixée par le schéma spatial. Le schéma utilisé en flux moyen (*i.e.* DMFS, voir paragraphe 2.4.2) fait l’approximation de mailles optiquement fines. Il existe donc une taille de maille limite maximale à ne pas dépasser sous peine d’introduire de la diffusion numérique. En utilisant le coefficient moyen de Planck, la taille maximale est donnée par un critère qui s’écrit :  $\kappa_P \Delta x_{Rad} \leq 0,1$ . Dans la configuration présente, ce critère est toujours respecté et les mailles optiquement fines.

L’influence des maillages 0, 1 et 2 a été représentée sur les Fig. 8.18 et 8.19 où l’on

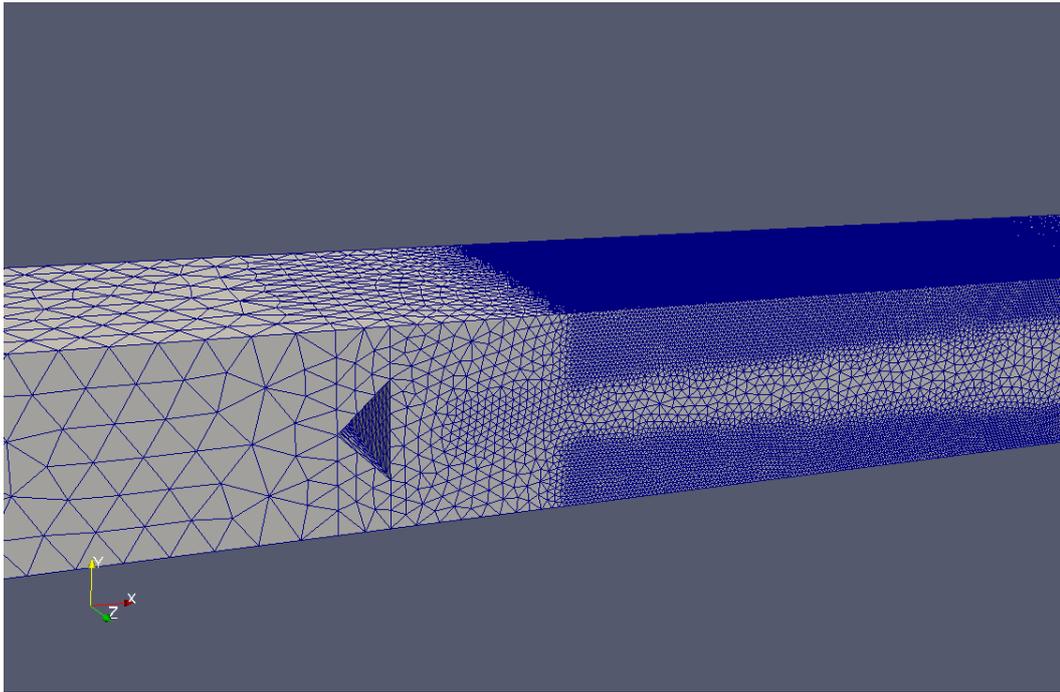


FIG. 8.16 – Maillage 1 : 2 500 560 cellules, les mailles dans la zone de fluctuation de température ont la même taille que sur le maillage original (1 mm de côté).

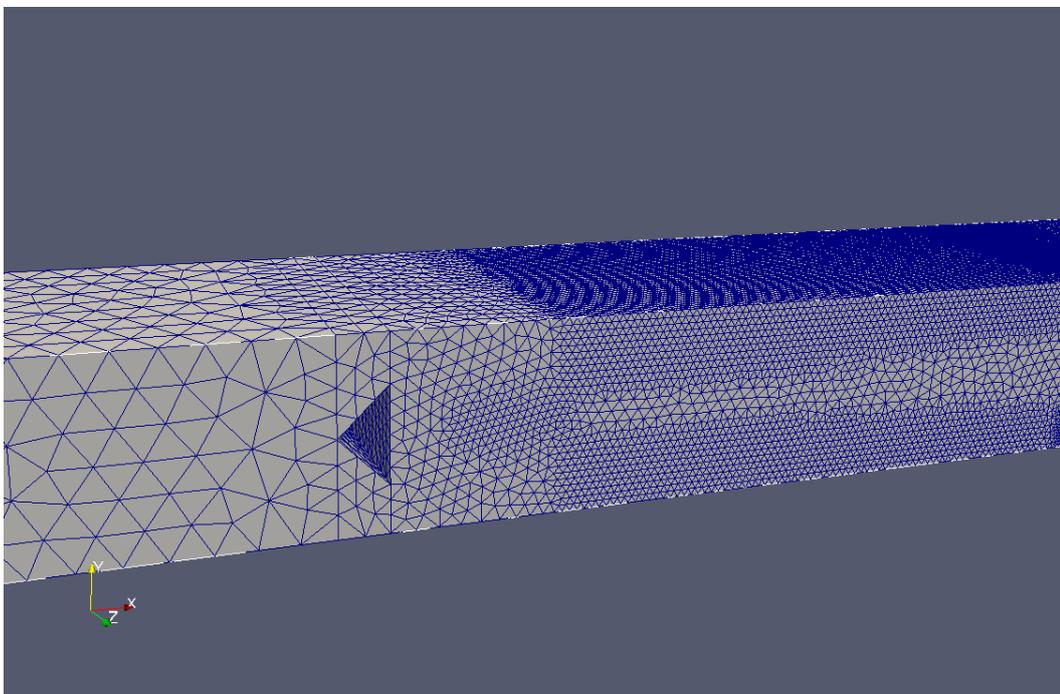


FIG. 8.17 – Maillage 2 : 621 167 cellules, les mailles dans la zone de fluctuation de température ont une taille deux fois plus grande que sur le maillage original (2 mm de côté).

trace le terme source radiatif le long de l'axe  $x$  central et sur un axe  $y$  transverse pour  $x = 9 \text{ cm}$ . Malgré quelques écarts faibles avec le maillage 2 sur l'axe central, les profils de  $S_r$  suivant l'axe transverse  $x = 9 \text{ cm}$  sont en très bon accord pour les 3 maillages. Les pertes radiatives totales sont respectivement de 1304,35 W et de 1301,75 W sur les maillages 1 et 2. Ce qui représente une erreur relative par rapport au maillage original de 1,16% et de 1,36%. L'effet de la réduction de maillage sur le rayonnement est donc très faible.

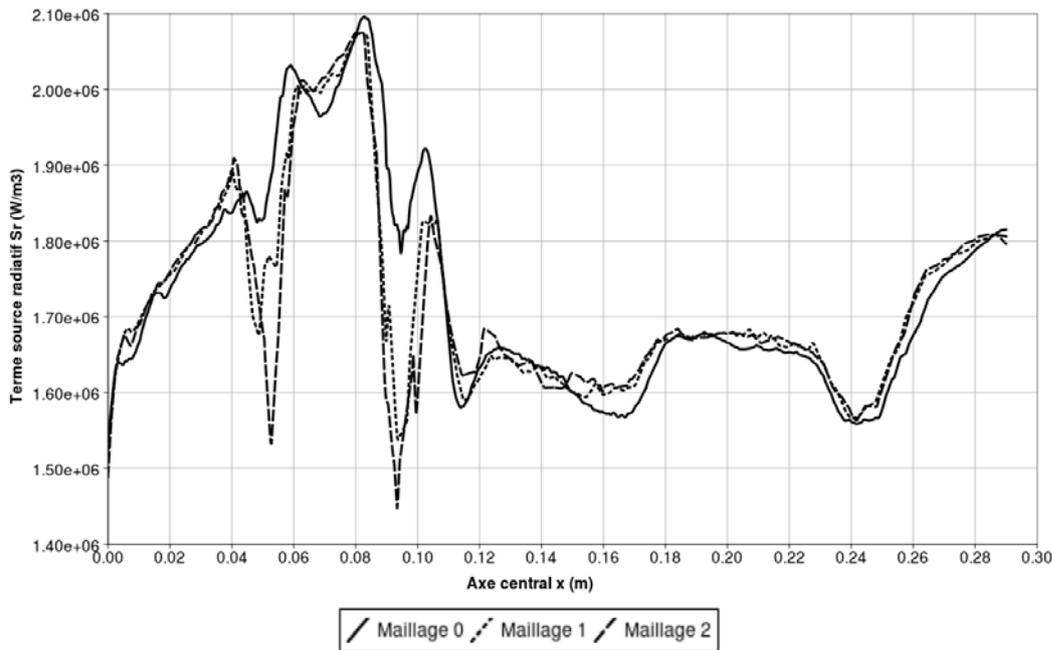


FIG. 8.18 – Influence des maillages 0, 1 et 2 sur le terme source radiatif le long de l'axe  $x$  central avec le modèle FS-SNBcK,  $N_q = 15$ ,  $S_4$  sans réflexion.

Il donc est possible d'associer une échelle de maille au rayonnement  $\Delta x_{Rad}$  supérieure à l'échelle de maille de la LES  $\Delta x_{LES}$ , elle même supérieure au maillage DNS  $\Delta x_{DNS}$  (Fig. 8.20), sans pour autant diminuer la précision du calcul. Ceci est en accord avec les résultats du chapitre 5. En filtrant la LES à une échelle  $\Delta x_{Rad} > \Delta x_{LES}$ , l'impact du filtrage reste faible. Le fait que l'impact de ce filtrage sur  $S_r$  demeure faible, apporte une validation *a posteriori* de l'absence de prise en compte de la TRI à l'échelle de la LES. Ainsi les fluctuations de sous-maille induisent une erreur sur les pertes radiatives totales inférieures à 1,36%, ce qui est faible devant l'erreur induite par le modèle spectral.

## 8.6 CONDITIONS AUX LIMITES RADIATIVES

Le dernier paramètre de calcul étudié pour le rayonnement correspond à l'influence des propriétés des parois. En rayonnement, si le milieu est mince les échanges se font principalement avec les parois et il convient donc de les décrire correctement, notamment en tenant compte des propriétés de paroi comme la réflexion. Dans le solveur radiatif utilisé PRISSMA, la prise en compte de la réflexion se fait par une

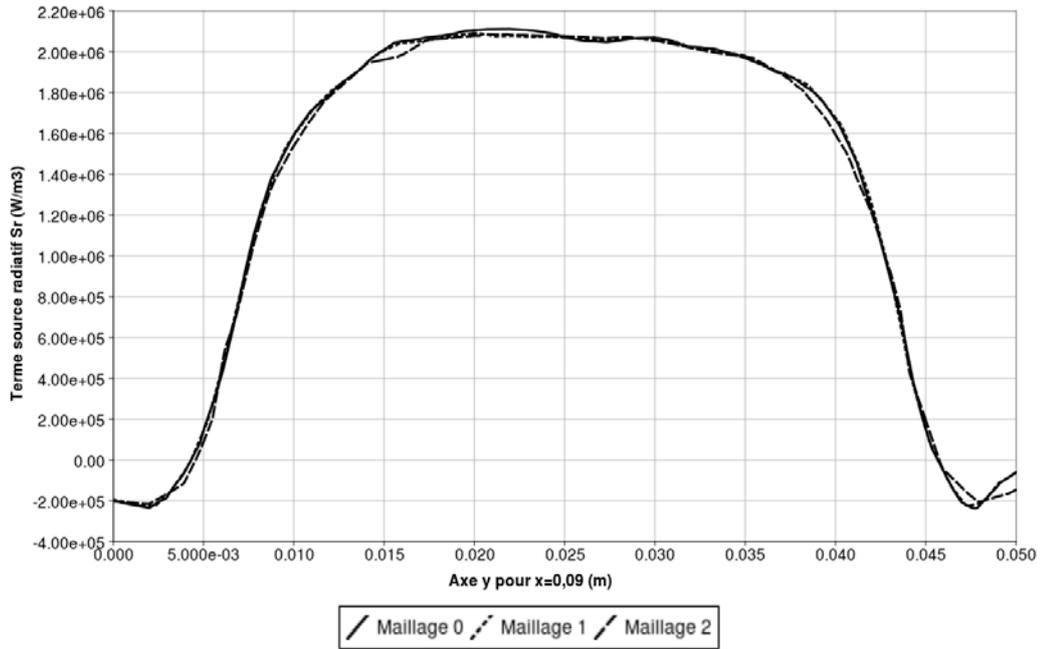


FIG. 8.19 – Influence des maillages 0, 1 et 2 sur le terme source radiatif le long de l'axe  $y - L_y/2$  pour  $x = 9 \text{ cm}$  avec le modèle FS-SNBcK,  $N_q = 15$ ,  $S_4$  sans réflexion.

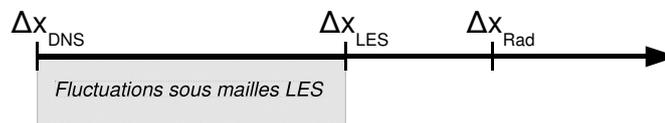


FIG. 8.20 – Différentes échelles spatiales associées aux maillages de la DNS  $\Delta x_{DNS}$ , de la LES  $\Delta x_{LES}$  et du rayonnement  $\Delta x_{Rad}$ . Les fluctuations de sous-maille de la LES correspondent aux échelles non résolues entre  $\Delta x_{DNS}$  et  $\Delta x_{LES}$ .

méthode itérative qui permet de mettre à jour la luminance aux cellules. La réflexion peut aussi changer sensiblement les temps de calculs.

D'un point de vue radiatif les parois sont caractérisées par leur émissivité et leur température. L'émissivité des parois de céramique est  $\epsilon = 0.91$  [123]. L'émissivité du dièdre est donnée pour un acier légèrement oxydé à 1000 K est  $\epsilon = 0.4$  [123]. Les conditions aux limites correspondant à l'entrée, la sortie, le cocourant et l'atmosphère en sortie de chambre sont supposées se comporter comme des corps noirs, c'est à dire qu'elles absorbent tout le rayonnement incident.

Les parois sont toutes supposées isothermes pour le rayonnement à  $T_w = 300$  K, excepté le cocourant dont la température est de 1900 K. Il s'agit là d'une approximation, idéalement la température des parois devrait être estimée à l'aide d'un solveur thermique résolvant les transferts thermiques dans les parois. De plus le choix d'une température de paroi froide va surestimer le terme source radiatif en maximisant l'écart de température entre le gaz et les parois. Dans le couplage réalisé par la suite, l'influence du rayonnement sera donc potentiellement plus importante à cause des parois froides. Par ailleurs le fait de ne pas considérer le rayonnement des suies sous-estime le terme source radiatif. C'est donc une première étape pour évaluer l'impact du rayonnement sur la combustion.

Un développement particulier est nécessaire pour les parois de quartz dont l'émissivité varie en fonction de la longueur d'onde, voir Fig. 8.21. L'utilisation d'un matériau est liée au dispositif expérimental pour observer mais n'est jamais utilisé dans une chambre de combustion industrielle. Le quartz, comme le verre, se comporte comme un milieu semi-transparent pour des longueurs d'onde courtes dans le proche visible et comme un milieu opaque dans l'infrarouge. L'émissivité du quartz sur le spectre infrarouge a été estimée à partir des données fournies : dans [123] (basées sur les données constructeur) pour l'intervalle  $[0,5; 4,5 \mu m]$ ; du calcul de l'émissivité basé sur les indices complexes du milieu d'après [132] pour  $[4,5; 15 \mu m]$  et supposée égale à 1 pour  $[15; 68 \mu m]$ . Afin de tenir compte de l'émissivité du quartz dans les modèles spectraux globaux, l'émissivité moyenne pondérée par la fonction de Planck pour une température de 300 K, à été calculée sur tout le spectre. Elle vaut  $\epsilon = 0,879$ . Le fait de considérer un corps gris équivalent à du quartz est une approximation mais elle est obligatoire dans le cas d'un modèle spectral global.

La réflexion a été étudiée en réalisant des calculs  $S_4$  sur le maillage 2 pour différents modèles spectraux en considérant les émissivité de parois grises (même pour le calcul en bande étroites). Son influence est représentée sur la Fig. 8.22 le long de l'axe central pour le modèle SNBcK. Les calculs de référence sur le maillage 0 avec le modèle SNBcK pour une  $S_4$  ou une  $LC_{11}$  n'ont pas été réalisés en raison de leur coût de calcul important qui a simplement été estimée dans le tableau 8.6. L'influence de la réflexion sur l'émission globale pour les différents modèles spectraux a été résumée dans le tableau 8.4 où l'écart relatif est calculé pour chaque modèle spectral par rapport au cas sans réflexion. Ce résultat montre que l'influence de la réflexion est pratiquement constante quel que soit le modèle spectral et de l'ordre de 5% de l'émission globale. Ces calculs démontrent aussi l'intérêt de l'utilisation de modèles globaux pour prendre en compte la réflexion aux parois en terme de temps de calcul, donnés dans le tableau 8.6. La réflexion a une incidence faible, comparée à l'erreur induite par le modèle spectral, en raison des émissivité de parois élevées. Toutefois, la réflexion a une incidence majeure sur la prédiction des flux aux parois comme le

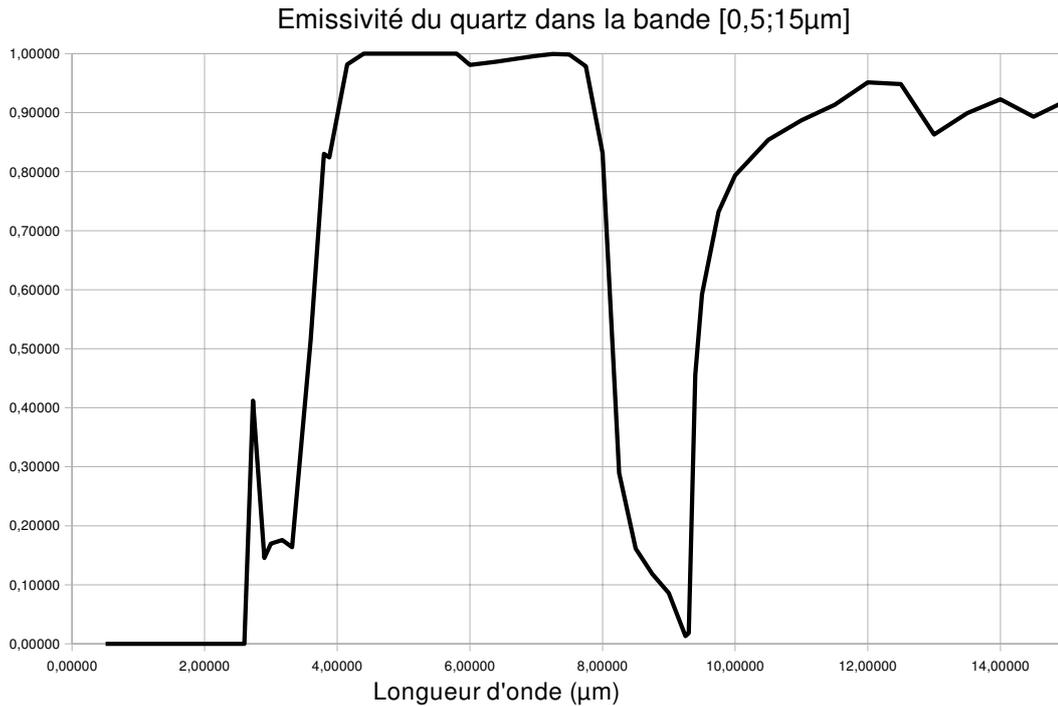


FIG. 8.21 – Évolution de l'émissivité des parois de quartz en fonction de la longueur d'onde. Estimée à partir des de [123](basées sur les données constructeur) dans l'intervalle [0,5;4,5  $\mu$ m], de [132] pour [4,5;15  $\mu$ m]. Au delà, [15;68 $\mu$ m], elle est supposée égale à 1. Remerciements à Y. Lemaoult (CROMeP, EMAC)

| Modèle spectral               | Émission globale (W) | Écart relatif au cas sans réflexion (%) |
|-------------------------------|----------------------|---|
| SNBcK                         | 1331,47              | 4,69                                    |
| WSGG                          | 900,92               | 4,94                                    |
| FS-SNBcK, $N_q = 15$          | 1254,49              | 4,93                                    |
| FS-SNBcK, $N_q = 15$ , Tabulé | 1273,82              | 4,35                                    |

TAB. 8.4 – Emissions globales de la flamme pour différents modèles spectraux en tenant compte de la réflexion et écarts relatifs par rapport aux cas sans réflexion (cf tableau 8.2).

montre la Fig. 8.23 pour la paroi de quartz en sur l'axe  $x$  en  $y = 2,5$  cm. Le flux est augmenté de plus d'un ordre de grandeur car si le gaz est optiquement mince de multiples réflexions peuvent se produire.

## 8.7 TEMPS DE CALCUL ET SYNTHÈSE

L'ensemble des calculs possibles avec tous les paramètres du solveur radiatif sont résumés dans le tableau 8.6. Les temps de calcul associés sont donnés pour un calcul parallèle sur 24 processeurs de type Intel(R) Xeon(R) CPU @ 2.66 GHz.

Dans chaque cas le temps de calcul est divisé en 2 contributions : calcul spectral et géométrique. Le temps de calcul total tient compte de ces 2 contributions mais également des communications, lecture et écriture de données. Le temps de calcul spectral

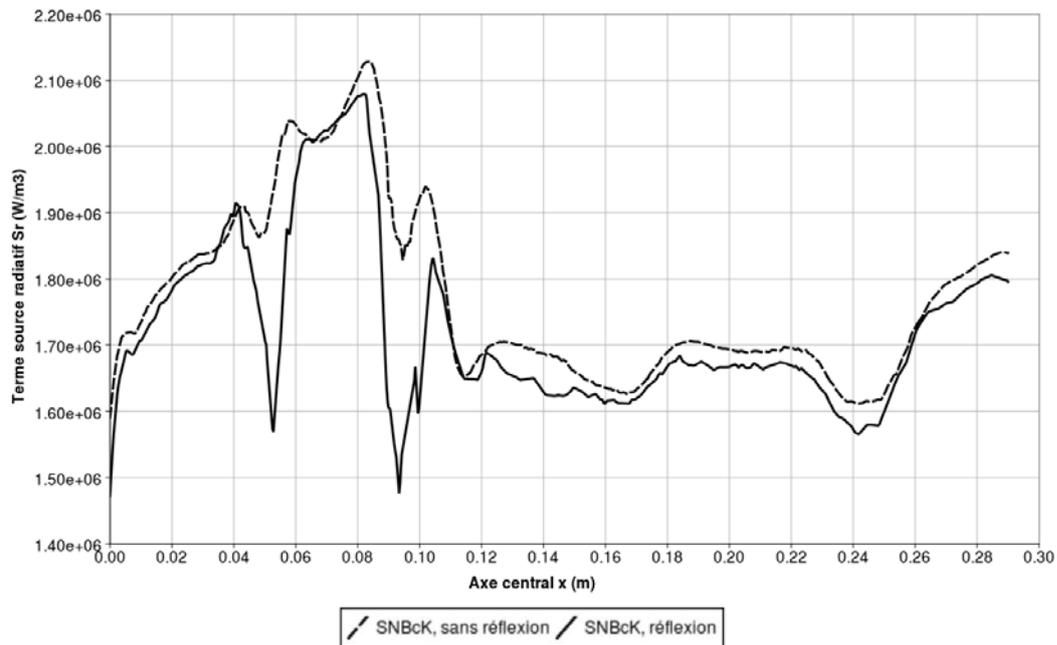


FIG. 8.22 – Influence de la réflexion aux parois sur  $S_r$  le long de l'axe central pour le modèle spectral SNBcK sur le maillage 2 en utilisant une quadrature  $S_4$ .

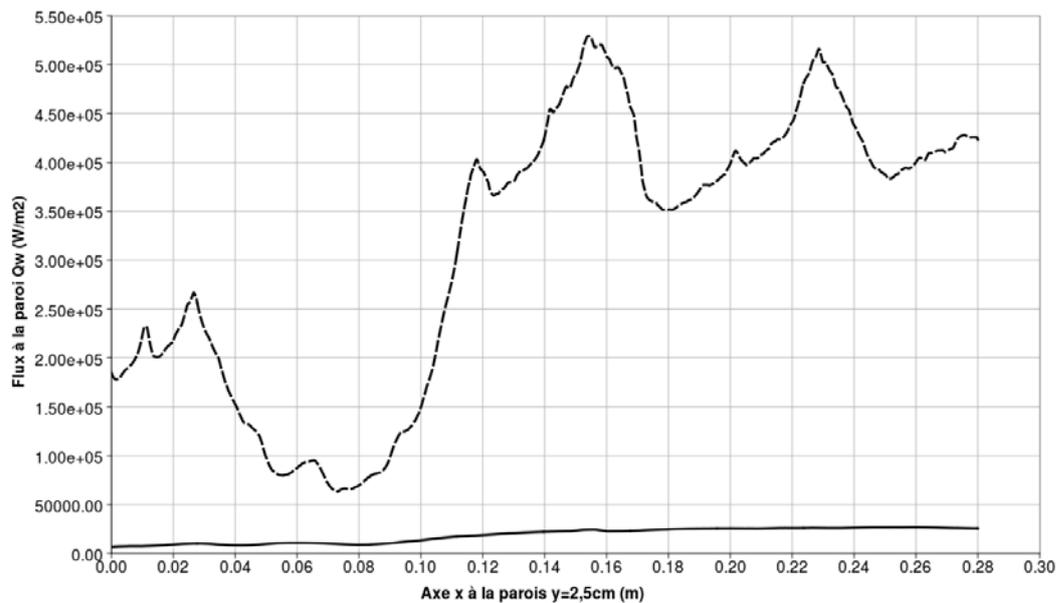


FIG. 8.23 – Influence de la réflexion sur le calcul des flux aux parois en  $y = 2,5$  cm et  $z = 0$  (paroi de quartz), sans réflexion (trait continu) et avec réflexion (trait pointillé).

## Erreur spectrale (ref. SNBcK)

|                               |       |
|-------------------------------|-------|
| WSGG                          | 32,57 |
| FS-SNBcK, $N_q = 7$           | 9,66  |
| FS-SNBcK, $N_q = 10$          | 8,65  |
| FS-SNBcK, $N_q = 15$          | 5,53  |
| FS-SNBcK, $N_q = 15$ , Tabulé | 4,09  |

## Erreur maillage (ref. Maillage 0)

|            |       |
|------------|-------|
| Maillage 1 | 1,16% |
| Maillage 2 | 1,36% |

Erreur quadrature (ref.  $LC_{11}$ )

|       |       |
|-------|-------|
| $S_4$ | 0,50% |
|-------|-------|

TAB. 8.5 – Estimation de la précision des solutions, l'erreur majorée des pertes radiatives totales est estimée en sommant les erreurs induites par chaque paramètre (erreurs indépendante) : modèle spectral, maillage, quadrature angulaire.

correspond au calcul des coefficients d'absorption dans le milieu. Le temps spectral est évidemment minimal pour le modèle WSGG mais le modèle FS-SNBcK tabulé a également de très bonnes performances. Le modèle FS-SNBcK est plus long que le modèle SNBcK (calcul spectral) en raison de l'inversion numérique de la fonction  $g(\kappa)$  sur tout le spectre (cf chapitre 3). Pour le temps de calcul géométrique, tous les modèles globaux apportent une réduction significative par rapport au modèle SNBcK en raison du nombre réduit de résolutions de l'ETR (réduction de l'ordre de  $371 \times 5/N_q$ ). Cette réduction du temps de résolution de la partie géométrique est crucial car elle permet d'utiliser un nombre de directions plus important ou de tenir compte de la réflexion.

La réduction du nombre de mailles est très efficace également car elle permet de diminuer le temps de calcul d'un facteur très proche du taux de réduction du maillage.

Enfin, la réflexion multiplie le temps géométrique d'un facteur 3 – 4 (ce qui signifie que la résolution de l'ETR a été itérée entre 3 et 4 fois avant de converger vers la solution).

La colonne « Estimation », du tableau 8.6, indique si les temps de calcul sont effectivement mesurés. La précision des solutions est estimée à partir de l'erreur de l'émission totale pour les différents paramètres, résumé dans le tableau 8.5. L'erreur totale pour un calcul est estimée à partir de la somme des erreurs induites par chaque paramètre, par exemple l'erreur totale du calcul WSGG sur le maillage 1 avec une quadrature  $S_4$  est :  $32,57 + 1,16 + 0,5 = 34,23\%$ . Les solutions qui présentent une erreur supérieure à 10% sont considérées avoir une précision non acceptable.

Enfin pour étudier la synchronisation en temps CPU en couplage PCS (voir paragraphe 8.3.1), le temps de calcul du solveur AVBP est donné pour 100 itérations de combustion sur 24 processeurs équivalents. Ce temps est de 106 s avec le schéma Lax-Wendroff et de 212 s avec le schéma TTGC. Dans le cas où les ressources attribuées à chaque code seraient équivalentes, le ratio du temps de calcul PRISSMA/AVBP est évalué, dernière colonne du tableau 8.6. L'objectif étant que le coût de la solution radiative soit du même ordre que  $N_{it} = 100$  itérations de combustion avec le schéma TTGC. Ces ratios de temps de calcul ont été triés par ordre décroissant sur la Fig. 8.24.

| Maillage   | Quadrature Angulaire | Modèle Spectral       | Reflexion | Estimation | Temps Spectral (s) | Temps Géométrique (s) | Temps calcul total (s) | Ratio PRISSMA/AVBP (TTGC) |
|------------|----------------------|-----------------------|-----------|------------|--------------------|-----------------------|------------------------|---------------------------|
| Maillage 0 | LC11                 | SNBck Nq=5            | Non       | Oui        | 502,84             | 104753,64             | 105256,49              | 494,41                    |
| Maillage 0 | S4                   | SNBck Nq=5            | Non       | Non        | 502,84             | 26188,41              | 26691,26               | 125,37                    |
| Maillage 0 | LC11                 | SNBck Nq=5            | Oui       | Oui        | 502,84             | 314260,93             | 314763,78              | 1478,52                   |
| Maillage 0 | S4                   | SNBck Nq=5            | Oui       | Oui        | 502,84             | 78565,23              | 79068,08               | 371,40                    |
| Maillage 0 | LC11                 | FS-SNBck Nq=15        | Non       | Non        | 4022,75            | 876,05                | 4931,88                | 23,17                     |
| Maillage 0 | S4                   | FS-SNBck Nq=15        | Non       | Non        | 4022,75            | 219,01                | 4269,89                | 20,06                     |
| Maillage 0 | S4                   | FS-SNBck Nq=15 Tabulé | Non       | Non        | 21,25              | 200,47                | 239,9                  | 1,13                      |
| Maillage 0 | S4                   | FS-SNBck Nq=10        | Non       | Non        | 2062,87            | 146,01                | 2208,88                | 10,38                     |
| Maillage 0 | S4                   | FS-SNBck Nq=7         | Non       | Non        | 1433,5             | 102,21                | 1535,7                 | 7,21                      |
| Maillage 0 | S4                   | WGGG                  | Non       | Non        | 6,19               | 39,61                 | 89,27                  | 0,42                      |
| Maillage 1 | S4                   | FS-SNBck Nq=15        | Non       | Non        | 1572,41            | 107,67                | 1919,53                | 9,02                      |
| Maillage 1 | S4                   | WGGG                  | Non       | Non        | 3,26               | 21,93                 | 41,63                  | 0,20                      |
| Maillage 2 | S4                   | SNBck Nq=5            | Non       | Non        | 442,61             | 4863,08               | 12049,66               | 56,6                      |
| Maillage 2 | S4                   | FS-SNBck Nq=15        | Non       | Non        | 395,84             | 25,75                 | 482,3                  | 2,27                      |
| Maillage 2 | S4                   | FS-SNBck Nq=15 Tabulé | Non       | Non        | 5,32               | 25,55                 | 36,76                  | 0,17                      |
| Maillage 2 | S4                   | WGGG                  | Non       | Non        | 0,81               | 5,19                  | 9,7                    | 0,05                      |
| Maillage 2 | S4                   | SNBck Nq=5            | Oui       | Non        | 469,47             | 20903,66              | 46990,05               | 220,72                    |
| Maillage 2 | S4                   | FS-SNBck Nq=15        | Oui       | Non        | 393,05             | 46,71                 | 692,41                 | 3,25                      |
| Maillage 2 | S4                   | FS-SNBck Nq=15 Tabulé | Oui       | Non        | 2,25               | 66,1                  | 132,88                 | 0,62                      |
| Maillage 2 | S4                   | WGGG                  | Oui       | Non        | 0,81               | 12,71                 | 17,84                  | 0,08                      |

|            | # cellules | Ratio |
|------------|------------|-------|
| Maillage 0 | 4 744 561  | 1     |
| Maillage 1 | 2 500 560  | 1,9   |
| Maillage 2 | 621 167    | 7,64  |

|              |                               |
|--------------|-------------------------------|
| AVBP         | Temps pour 100 itérations (s) |
| Lax-Wendroff | 106,45                        |
| TTGC         | 212,89                        |

|                         |    |
|-------------------------|----|
| Nombre de processeurs : | 24 |
|-------------------------|----|

Solutions de référence  
Précision acceptable  
Précision non acceptable  
 LC11 : 96 directions  
 S4 : 24 directions

Tab. 8.6 – Temps de calcul du solveur radiatif en fonction de l'ensemble des paramètres pour le rayonnement. Les calculs de référence sont surlignés en jaune, les calculs donnant une précision acceptable sont sur fond gris et les calculs dont la précision est insuffisante sont surlignés en rouge. Les temps de calculs sont tous donnés pour un calcul qui utiliserait 24 processeurs de type Intel(R) Xeon(R) CPU @ 2.66 GHz.

Les calculs LES, principalement en raison de leur caractère instationnaire nécessitent au minimum 700 000 itérations pour obtenir une solution convergée en moyenne puis 100 000 itérations pour le calcul d'une moyenne. En somme pour le calcul de 800 000 itérations sans couplage il faut environ 480 h de calcul sur 24 processeurs. On considère qu'un calcul radiatif plus long que 100 itérations de combustion n'est pas acceptable et que les cas produisant un ratio  $> 1$  sont à proscrire.

Si pour les solutions les plus précises, le ratio atteint une valeur maximale supérieure de 1400, il tombe à 125 en utilisant une  $S_4$  sans réflexion (SNBcK, Maillage 0). Le modèle FS-SNBcK tabulé, ainsi que le critère de réduction de maillage permettent d'atteindre un ratio de 0,17 ce qui est très performant. Le cas FS-SNBcK Tabulé,  $S_4$  avec réflexion sur le maillage 2 est la configuration optimale en terme de précision et de temps de calcul avec un ratio de 0,6. Pour la suite de ce travail on va opter pour ce choix de paramètres. L'erreur de ces paramètres sur les pertes radiatives totales est estimée à partir du tableau 8.5 et vaut 5,95%, ce qui est largement acceptable par rapport à la précision d'un calcul LES.

## 8.8 CONCLUSION

Une configuration de flamme prémélangée turbulente a été étudiée en vue d'un calcul couplé instationnaire combustion-rayonnement. Pour cela une stratégie de couplage parallèle a été mise en place avec un critère de fréquence de couplage toutes les  $N_{it}$  itérations de combustion.

Pour réduire le temps de calcul mais aussi l'utilisation mémoire du solveur radiatif une réduction de maillage a été appliquée, en suivant un critère basé sur les fluctuations de température. Par ailleurs les tests de la validité de ce critère confirment *a posteriori* que les fluctuations de sous-maille à l'échelle de la LES ont une influence faible sur le rayonnement. Cette erreur est bien plus faible que l'erreur introduite par le modèle spectral, aussi la précision actuelle ne nécessite pas de prendre en compte les fluctuations de sous-maille pour le rayonnement dans un calcul LES.

Enfin la prise en compte de la réflexion a été évaluée. Un résultat important est qu'il est possible de la prendre en compte sans augmenter significativement les temps de calcul si des modèles spectraux globaux sont utilisés. Si dans la configuration étudiée l'impact de la réflexion reste modéré pour le terme source radiatif, il est à l'inverse très important pour les flux aux parois.

La comparaison systématique des différents paramètres et choix de modèles radiatifs en terme de précision et de coût de calcul démontre qu'un calcul radiatif en  $S_4$ , FS-SNBcK tabulé sur le maillage 2 avec réflexion est la combinaison optimale. C'est ce choix qui est utilisé pour le calcul couplé présenté au chapitre suivant. Le temps de calcul radiatif est réduit d'un facteur 350 pour une erreur sur les pertes radiatives totales inférieure à 6%. Il est alors possible d'obtenir une solution avec un temps de calcul 0,6 fois moindre que 100 itérations de combustion.

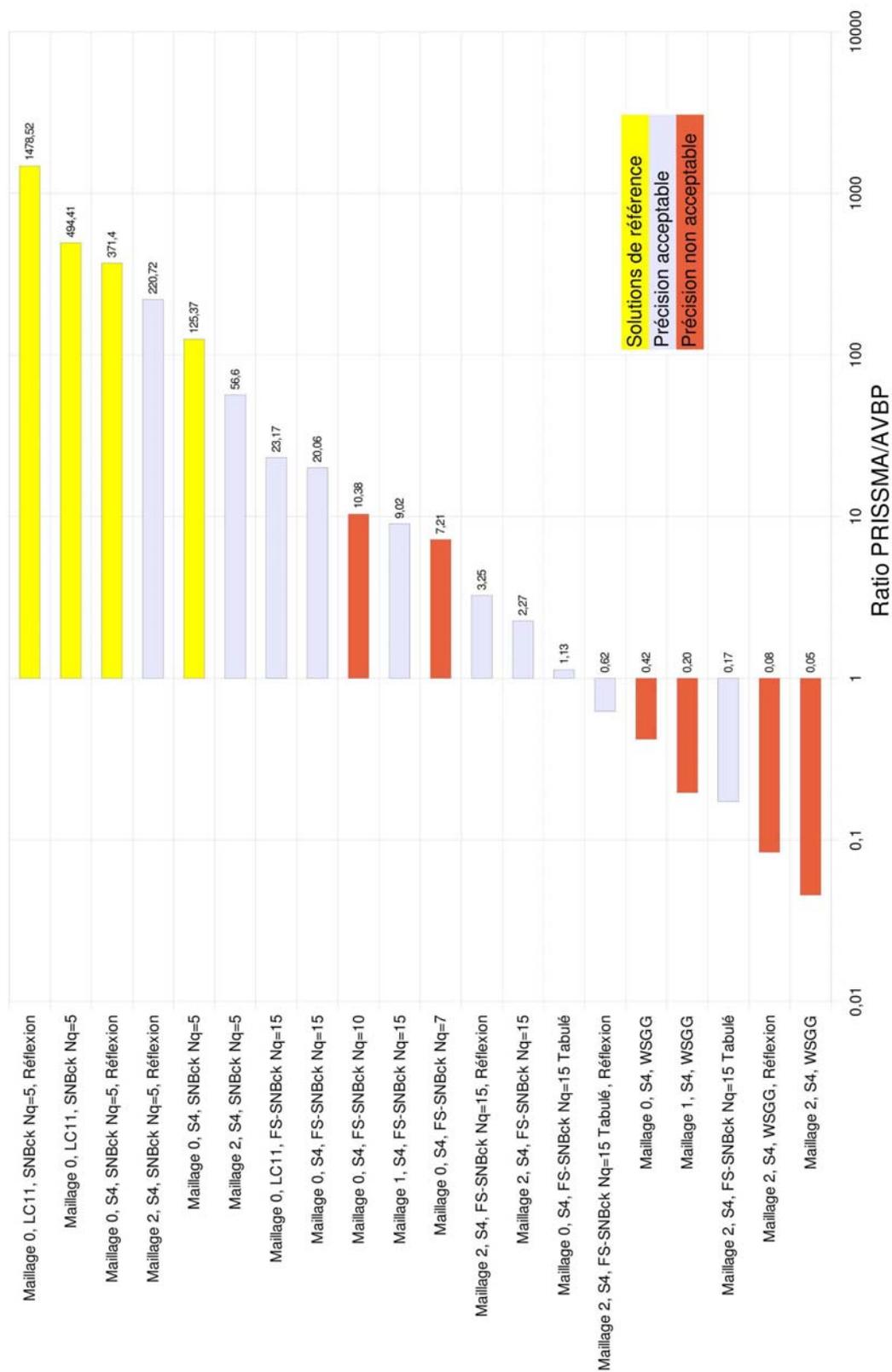


FIG. 8.24 – Ratio du temps de calcul PRISSMA/AVBP pour l'ensemble des paramètres étudiés. Les temps de calcul plus longs que la combustion ne sont pas acceptables, ratio > 1.



# COUPLAGE INSTATIONNAIRE COMBUSTION TURBULENTE - RAYONNEMENT DANS UNE CONFIGURATION LES TRIDIMENSIONNELLE

Au cours des chapitres précédents, l'interaction rayonnement-combustion turbulente en LES a été étudiée dans une approche non couplé par post-traitement des solutions de combustion.

Afin de déterminer l'influence du rayonnement sur la dynamique de la combustion turbulente un couplage est réalisé sur la configuration du dièdre présentée au chapitre 8. Très peu de travaux ont traité du couplage combustion rayonnement en LES avec une description détaillée du rayonnement, le seul à notre connaissance est la thèse de Dos Santos [123]. Dans ce travail, il s'agissait d'une étude de faisabilité en utilisant les solveurs DOMASIUM et AVBP dans une chaîne de couplage simplifiée. Un certain nombre d'hypothèse avaient été faites pour rendre ce calcul raisonnable en temps CPU : pour le calcul fluide, schéma de discrétisation spatial du second ordre (Lax-Wendroff), chimie à une étape, nombres de Schmidt constants (ratio de concentration  $H_2O$ ,  $CO_2$  constant) ; du point de vue radiatif, le traitement de la réflexion pour des parois non grises n'a pas été effectué et le modèle CK était utilisé avec un critère de réduction de bande, pour ne retenir que les bandes ayant la contribution énergétique la plus importante et enfin seule la quadrature  $S_4$  était employée.

Dans ce chapitre, le même couplage est réalisé dans un contexte totalement justifié en terme de choix de modèles. Ceci démontre la validité de l'approche développée dans les chapitres précédents et autorise une analyse fine du système couplé.

Pour le couplage réalisé, la plage de fonctionnement du calcul couplé a été étendue. Pour la combustion, un schéma spatial du deuxième ordre a été utilisé conjointement avec une chimie à deux étape sans faire l'hypothèse de nombres de Schmidt constants. Pour le rayonnement la réflexion a été prise en compte et le modèle spectral global utilisé s'est montré très précis par rapport au modèle SNBcK de référence.

Dans une première partie, le coupleur est brièvement présenté ainsi que la communication des données entre les solveurs pour des maillages disjoints. Les résultats du

calcul couplé sont ensuite confrontés aux résultats du calcul non couplé et aux données expérimentales disponibles. Considérant la solution moyenne de l'écoulement, l'impact de la TRI associée aux fluctuations résolues de la LES, est discuté.

## 9.1 INTERFACE DE COUPLAGE

Jusqu'à présent les aspects informatiques de la mise en place du couplage n'ont pas été abordés. Dans l'optique de développer une chaîne de couplage pérenne, on utilise un logiciel dédié au couplage : PALM, présenté ci-après.

### 9.1.1 Application PALM

Le coupleur PALM<sup>1</sup> est une couche logicielle supplémentaire aux différents solveurs employés. Cette couche logicielle rend possible des échanges de données entre des programmes n'ayant pas été initialement développés dans ce but. Le coupleur a pour mission de permettre l'échange de données entre les différents composants en appliquant éventuellement des calculs intermédiaires sur les données. Initialement développé dans le contexte de la climatologie [133], PALM est utilisé pour coupler les solveurs fluide AVBP et radiatif PRISSMA.

Le coupleur PALM permet ainsi de réaliser des couplages dynamiques et de gérer les ressources : un composant peut mobiliser puis libérer des ressources. Deux niveaux de parallélisme sont possibles : plusieurs composants peuvent être exécutés simultanément, chaque composant pouvant être lui-même parallèle. Dans l'interface graphique PréPALM, l'application PALM se présente comme différentes branches représentant les différents composants du couplage. La Fig. 9.1 montre le canevas de l'application PALM utilisé pour le couplage combustion-rayonnement. Il est composé de trois branches : deux font appel aux solveurs PRISSMA et DOMASIUM, la dernière, branche « Bridge » permet de traiter les données échangées.

Le couplage est réalisé sur 32 processeurs, répartis de la façon suivante :

- 22 pour AVBP,
- 8 pour PRISSMA,
- 1 pour le Bridge (échange de données),
- 1 pour le PALM (gestion des ressources).

Le ratio du temps de calcul de PRISSMA et de AVBP pour les paramètres retenus (Maillage 2,  $S_4$ , FS-SNBcK tabulé, réflexion) présenté au chapitre 8 était de 0,6. Toutefois le temps de calcul radiatif total intègre la lecture et l'écriture des données pour le rayonnement or dans le couplage ces lectures/écritures n'interviennent pas et le ratio est de l'ordre de 0,36 soit  $\sim 22/8$ .

### 9.1.2 Branche « Bridge »

En plus des deux branches PRISSMA et AVBP, la branche « Bridge » a pour but de communiquer les données entre AVBP et PRISSMA. Même si les maillages étaient identiques pour les deux solveurs, la décomposition en sous-domaines dans AVBP, sur les différents processeurs, nécessite de définir une connection entre les mailles du

<sup>1</sup>[http://www.cerfacs.fr/globc/PALM\\_WEB/index.html](http://www.cerfacs.fr/globc/PALM_WEB/index.html)

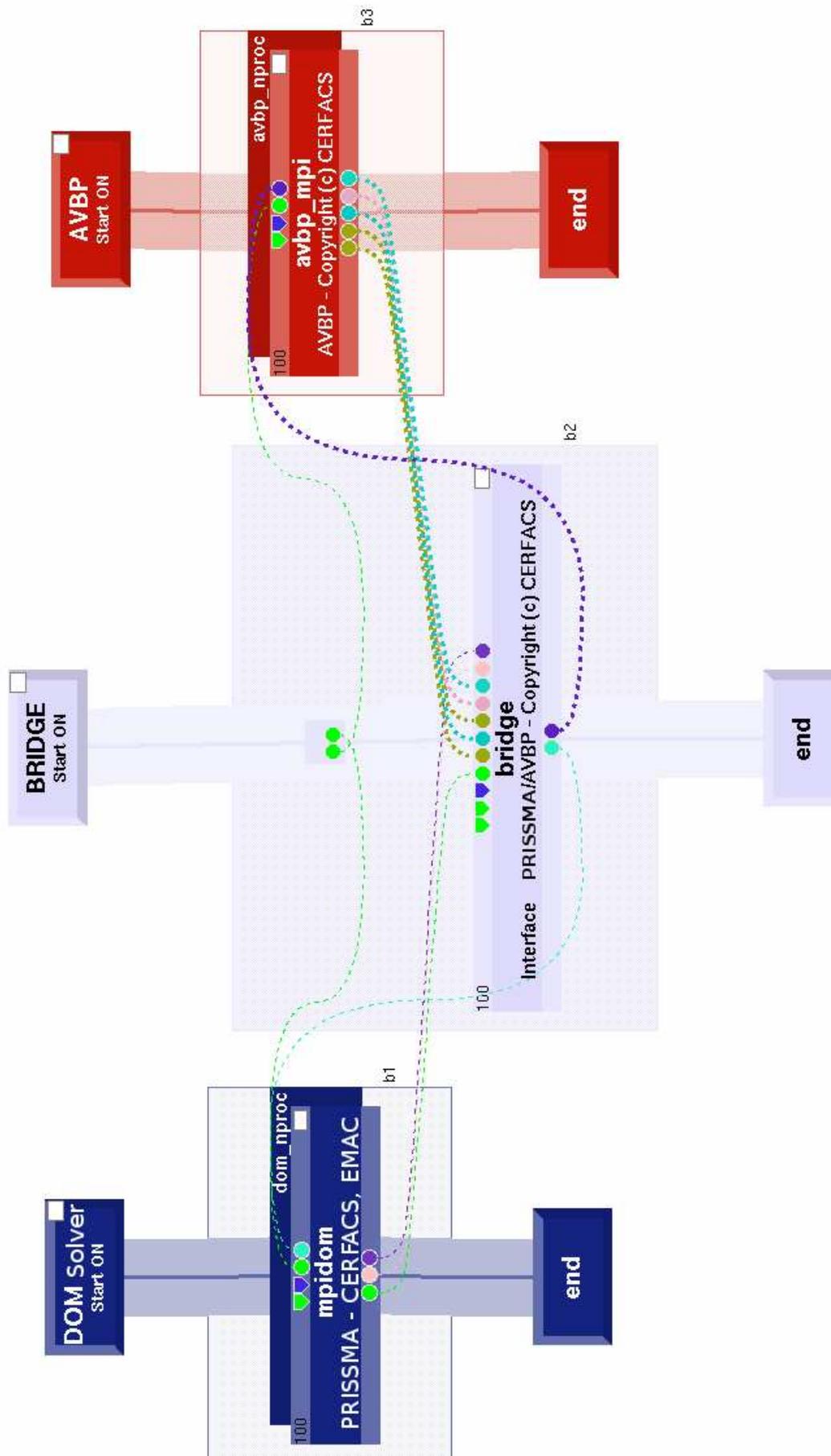


FIG. 9.1 – Canevas de l'application PALM pour coupler le solveur fluide AVBP au solveur radiatif PRISSMA en échangeant les données via la branche « Bridge ».

solveur fluide et celles solveur radiatif. Dans le cas de maillages disjoints entre les deux solveurs la même approche est utilisée.

La communication des données n'utilise pas d'interpolation entre les 2 maillages : les données physiques sont communiquées au point le plus proche. Pour cela 2 tables de connectivité sont générées au début du calcul puis stockées dans un fichier. A moins de changer de maillage ces connectivités n'ont pas de raison de changer. La réduction de maillage pour le rayonnement conduit à un nombre de cellules du maillage radiatif moins important que pour le maillage fluide. Ainsi la table de connectivité PRISSMA  $\rightarrow$  AVBP, associe chaque cellule du maillage radiatif à plusieurs cellules du maillage fluide qui reçoivent la même valeur de terme source  $S_r$ . Pour la connectivité inverse, AVBP  $\rightarrow$  PRISSMA, seule la cellule AVBP la plus proche d'une cellule PRISSMA est considérée puisque les variations associées aux cellules ignorées ont une contribution minoritaire.

L'algorithme utilisé pour la recherche de voisins est basé sur une recherche par balayage de toutes les mailles à une distance inférieure à  $d_{min}$  en utilisant une double boucle. Cet algorithme a un temps de calcul qui augmente comme le produit des mailles de chaque maillage. Pour la configuration étudiée, le temps de calcul est assez long, de l'ordre d'une semaine de calcul pour les 2 tables sur un noeud quadri-processeur Power5+@1.5 GHz. Cependant ce calcul n'est réalisé qu'une seule fois par configuration hors du calcul couplé. Il peut être optimisé en utilisant un algorithme de recherche adapté, de type partitionnement binaire<sup>2</sup>.

La communication des données entre AVBP et PRISSMA n'a pas d'incidence sur la solution radiative. Dans un calcul de post-traitement, une solution AVBP a été interpolée sur le maillage radiatif. La même solution a été communiquée, dans le couplage, par le « Bridge » à PRISSMA en utilisant les plus proches voisins. Les deux solutions sont identiques et l'approximation faite en négligeant l'interpolation n'a pas d'incidence sur la solution radiative.

Par contre la communication des données inverse entre PRISSMA et AVBP, d'un maillage plus grossier vers un maillage plus fin, induit une erreur systématique. En effet lors de cette communication le terme source  $S_r$  est sur-échantillonné sur un maillage plus fin, ce qui induit un bruit aléatoire à haute fréquence (*i.e.* taille de maille dans PRISSMA plus grande, Fig. 9.3 et 9.2). Pour éviter cet effet, un filtrage supplémentaire est appliqué à  $S_r$  lors de la communication des données :

- le terme source  $S_r$ , transmis dans AVBP au centre des cellules, est distribué (« scatter » en anglais) sur les noeuds de la maille,
- les valeurs aux noeuds sont alors moyennées avec les données des cellules voisines,
- puis les valeurs aux noeuds sont utilisées pour recalculer une valeur au centre des cellules (« gather » en anglais).

Les résultats sur une solution instantanée, Fig. 9.3 et 9.2, montrent un très bon accord entre la solution AVBP filtrée et la solution directement issue de PRISSMA. Le filtrage réalisé, à l'échelle de la maille LES, permet d'éliminer les bruits induits sur  $S_r$  lors de la communication des données sur un maillage plus fin.

<sup>2</sup>B.S.P pour Binary Space Partitionning

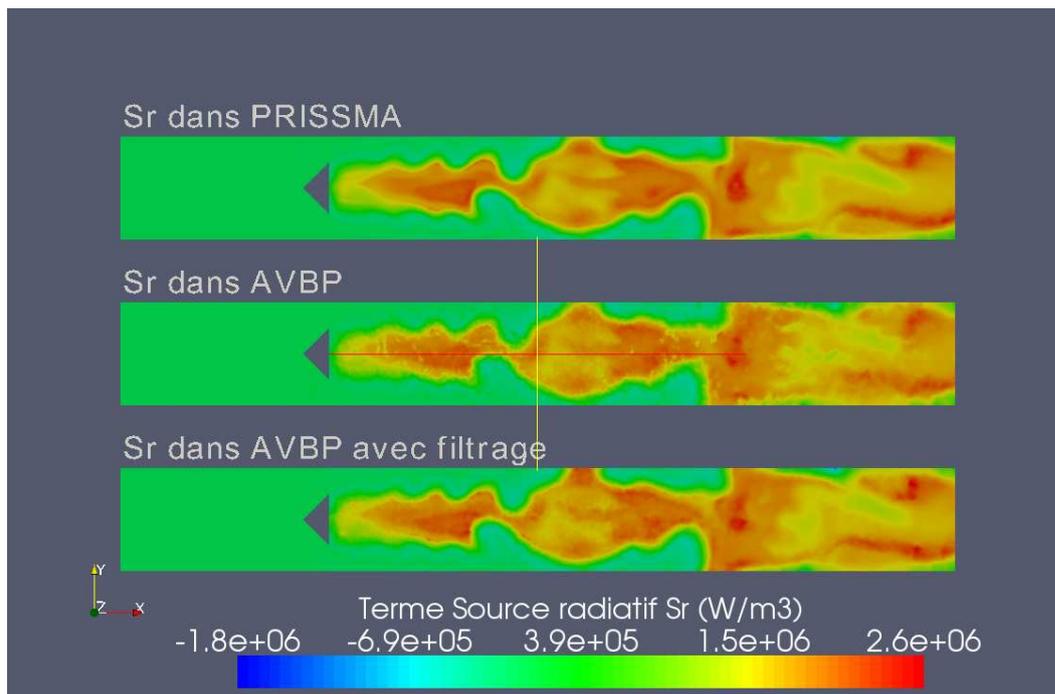


FIG. 9.2 – Influence sur le terme source radiatif  $S_r$  de la communication des données entre les deux solveurs pour des maillages disjoints sur la coupe  $z = 0$ . En haut  $S_r$  extrait de PRISSMA, au milieu  $S_r$  extrait de AVBP, en bas  $S_r$  dans AVBP après filtrage à l'échelle du maillage LES.

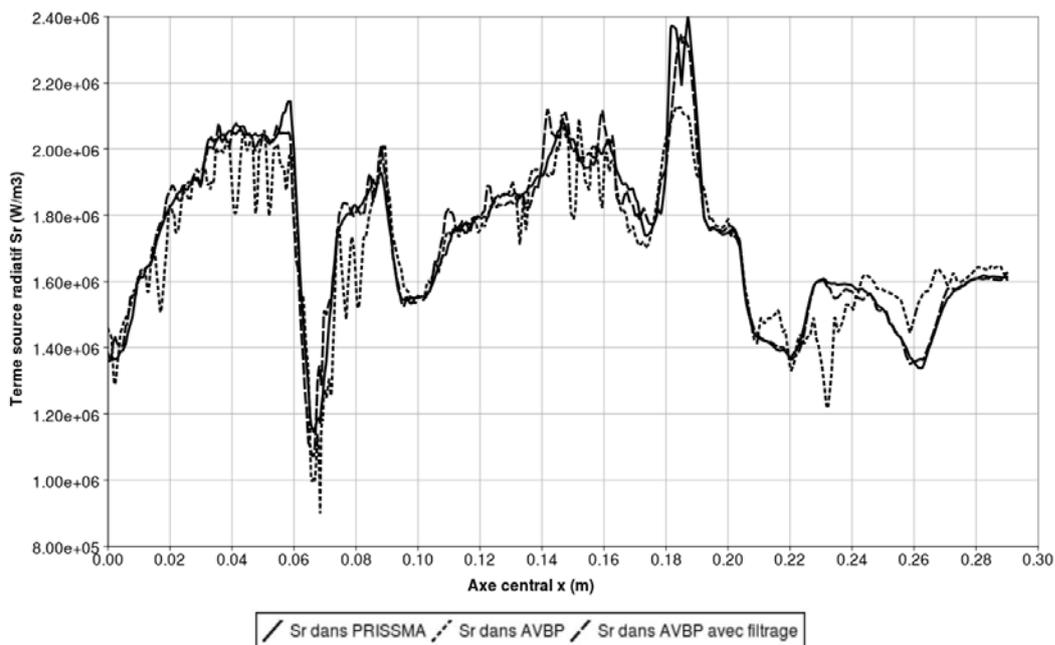


FIG. 9.3 – Influence sur le terme source radiatif  $S_r$  de la communication des données entre les deux solveurs pour des maillages disjoints le long de l'axe central ( $0,01 < x < 0,3$ ,  $y = 0$  et  $z = 0$ ).

| Nombre d'itérations | Schéma du solveur fluide | Modèle spectral |
|---------------------|--------------------------|-----------------|
| 000 000 → 150 000   | Lax-Wendroff             | WSGG            |
| 150 000 → 240 000   | Lax-Wendroff             | FS-SNBcK Tabulé |
| 240 000 → 700 000   | TTGC                     | FS-SNBcK Tabulé |

TAB. 9.1 – Convergence de la solution initiale pour le couplage

### 9.1.3 Déroutement du calcul

La solution initiale pour un calcul LES est construite suivant la méthode expliquée à la section 1.4.1.

Le calcul couplé démarre d'une solution à froid à laquelle on applique la méthodologie d'allumage décrite au paragraphe 1.4.1 en tenant compte des échanges radiatifs. Une autre solution était de démarrer d'une flamme convergée sans rayonnement puis d'appliquer le couplage. Cette solution bien que plus longue permet de s'assurer que le calcul converge bien vers une solution où l'influence du rayonnement est prise en compte. En effet si l'énergie due au rayonnement n'est pas suffisamment important pour perturber l'état du calcul convergé sans rayonnement, dans ce cas l'influence du rayonnement pourrait être sous-estimée.

Le déroulement du calcul a été résumé dans le tableau 9.1. Dans un premier temps, le calcul est convergé en moyenne avec un schéma de premier ordre et un modèle spectral grossier WSGG. Ensuite le modèle spectral est remplacé par le modèle FS-SNBcK tabulé. Puis le schéma numérique est remplacé par le schéma d'ordre plus élevé TTGC. Pour tout le calcul, la chimie a deux étapes présentée au paragraphe 8.2.2 est employée. Le rayonnement est résolu sur 24 directions en tenant compte de la réflexion aux parois conformément aux résultats du chapitre 8.

A partir de la solution convergée après les 700 000 (89,28 ms) itérations les grandeurs statistiques peuvent être collectées. Les moyennes sont calculées sur 100 000 itérations soit environ 14,15 ms. En tenant compte de la vitesse moyenne de l'écoulement de  $5 \text{ m.s}^{-1}$ , de la longueur de la chambre de 40 cm et du pas de temps minimum  $\Delta t \sim 2 \mu\text{s}$ , une période du système correspond à environ 40 000 itérations.

## 9.2 IMPACT DU RAYONNEMENT SUR LA COMBUSTION TURBULENTE

### 9.2.1 Comparaison aux données expérimentales

Un calcul de combustion se valide par comparaison aux grandeurs moyennes expérimentales. Pour la configuration étudiée, seule la variable de progrès  $c$  a été mesurée expérimentalement. La moyenne temporelle de la variable de progrès et sa variance sont définies comme :

$$\begin{aligned} \langle c \rangle &= \frac{\langle T \rangle - T_0}{T_1 - T_0} \\ c_{rms} &= \frac{T_{rms}}{T_1 - T_0} \end{aligned} \quad (9.1)$$

où  $T_0$  et  $T_1$  sont respectivement la température des gaz frais et des gaz brûlés. La variable  $c$ , correspond à une température réduite ( $c = 0$  dans les gaz frais et  $c = 1$  dans

les gaz brûlés). La comparaison du calcul de combustion, avec ou sans rayonnement, aux données expérimentales permet de valider les niveaux de température du calcul de combustion.

Les données expérimentales de la configuration du dièdre ont été mesurées par Knikker *et al.* [125, 126]. Elles ont été réalisées par une technique de fluorescence induite par LASER<sup>3</sup> sur le radical OH pour le plan central du brûleur (Fig 8.3). La variable de progrès adimensionnelle  $c$  est extraite d'images binarisées en supposant un front de flamme infiniment mince.

La moyenne de Favre de la variable de progrès  $\tilde{c}$ , est calculée et filtrée à l'aide d'un filtre Gaussien pour être comparée aux résultats expérimentaux (les travaux de Veynante *et al.* détaillent la comparaison de mesures expérimentales et de calculs LES [12]). La taille de filtre appliquée correspond à l'épaisseur du front de flamme résolu en LES :  $\Delta = F\delta_f^0$  ( $F$  est l'épaississement du modèle de flamme épaissie et  $\delta_f^0$ , l'épaisseur de flamme laminaire). Les moyennes d'ensemble sont calculées à partir de 200 images donnant la moyenne temporelle de la variable de progrès  $\langle \tilde{c} \rangle$  et sa variance  $\langle \tilde{c}_{rms} \rangle = \sqrt{\langle \tilde{c}^2 \rangle - \langle \tilde{c} \rangle^2}$ . Les mesures sont faites pour les axes transverses  $y$  pour  $x = 7 \text{ cm}$ ,  $x = 9 \text{ cm}$  et  $x = 11 \text{ cm}$ , voir Fig 9.4.

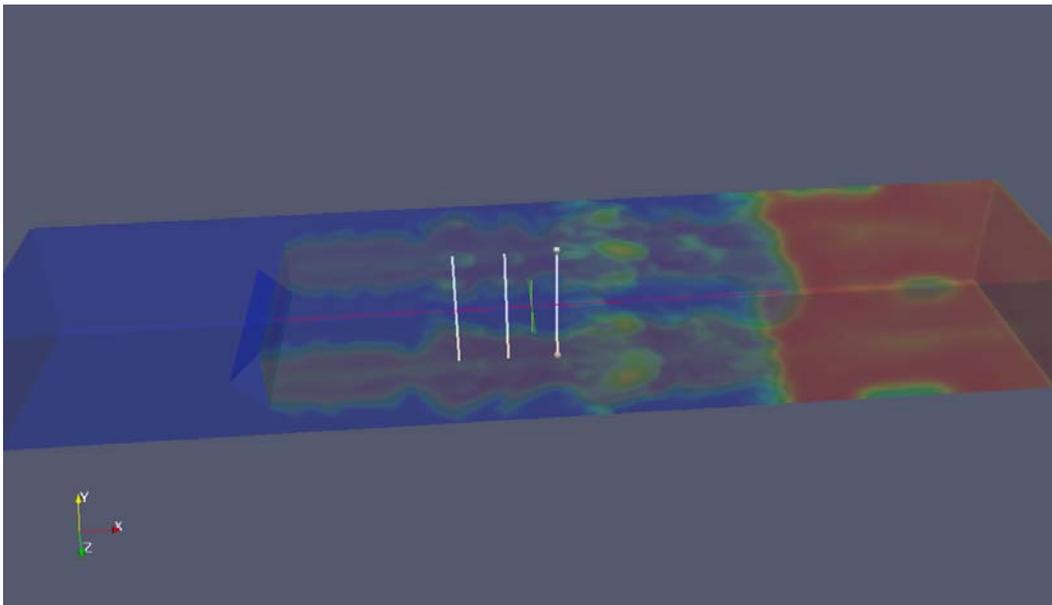


FIG. 9.4 – Mesures faites sur des axes transverses  $y$  pour  $x = 7 \text{ cm}$ ,  $x = 9 \text{ cm}$  et  $x = 11 \text{ cm}$ .

Les Fig. 9.5 à 9.7 donnent les profils de la variable de progrès  $c$  pour les axes  $x = 7 \text{ cm}$ ,  $x = 9 \text{ cm}$  et  $x = 11 \text{ cm}$  pour les mesures expérimentales et les simulations avec et sans rayonnement. De même les Fig. 9.8 à 9.10 donnent les profils sur les axes de la variance de la variable de progrès  $c_{rms}$ .

Les résultats montrent que les simulations de combustion, avec et sans rayonnement, sont en bon accord avec les mesures expérimentales. Les valeurs de  $\langle c \rangle$ , prédites par le calcul, montrent des écarts plus importants près des bords mais non significatifs pour l'objectif de ce travail. L'impact du rayonnement, sur les valeurs moyennes de  $c$ , est assez faible sauf au centre de la configuration où la valeur de  $\langle c \rangle$  est réduite. Au

<sup>3</sup>PLIF pour Planar LASER Induced Fluorescence

centre de la configuration le gaz chaud rayonne sur les parois et le dièdre, comme les parois sont froides, les pertes radiatives sont importantes. Les profils de  $c_{rms}$  tenant compte du rayonnement sont sensiblement plus proches des valeurs expérimentales, sur les axes  $x = 9 \text{ cm}$  et  $x = 11 \text{ cm}$ . La confrontation aux valeurs expérimentales donne des résultats satisfaisants pour les simulations réalisées. Cela permet de poursuivre l'analyse en comparant les différences des simulations avec et sans rayonnement.

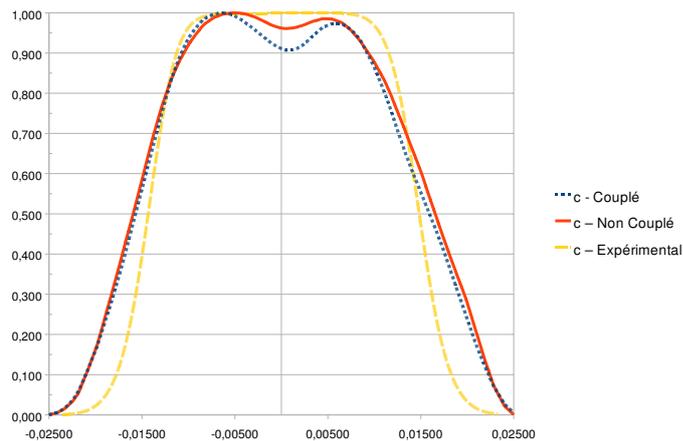


FIG. 9.5 – Profils de la variable de progrès le long de l'axe  $y$  pour  $x = 7$  cm ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé.

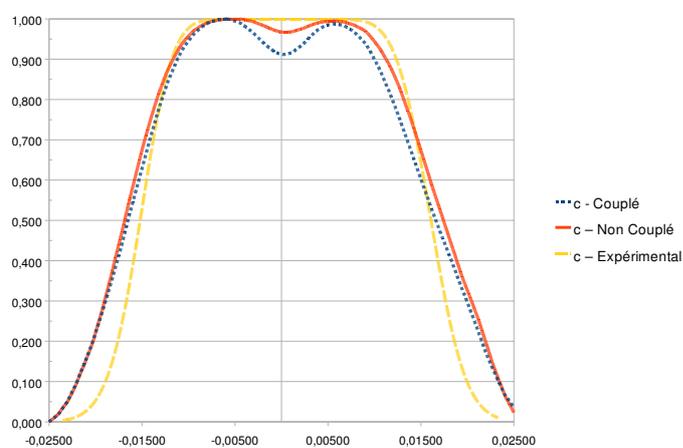


FIG. 9.6 – Profils de la variable de progrès le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9$  cm ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé.

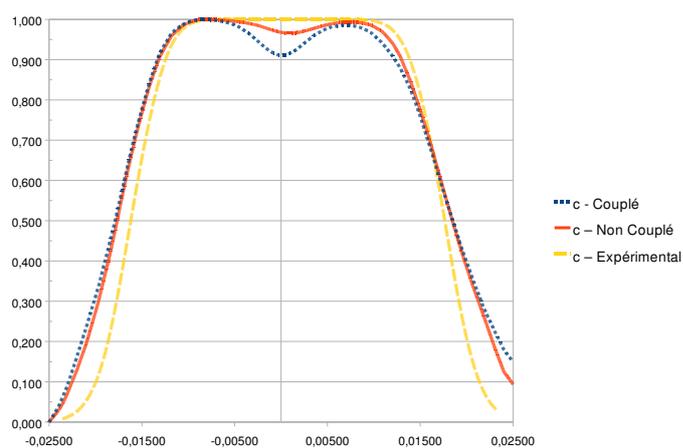


FIG. 9.7 – Profils de la variable de progrès le long de l'axe  $y$  pour  $x = 11$  cm ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé.

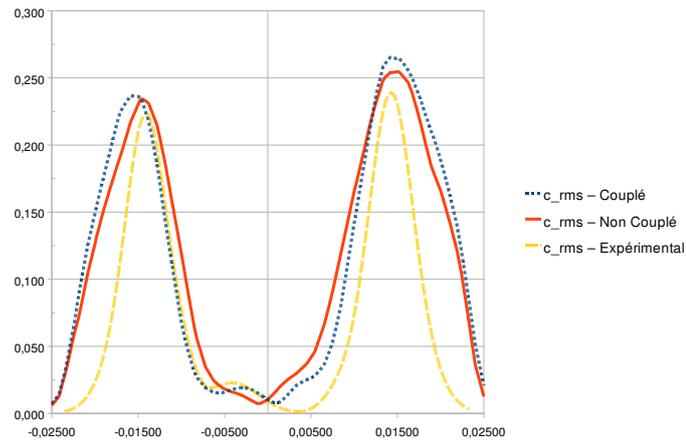


FIG. 9.8 – Profils de variance de la variable de progrès le long de l'axe  $y$  pour  $x = 7$  cm ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé.

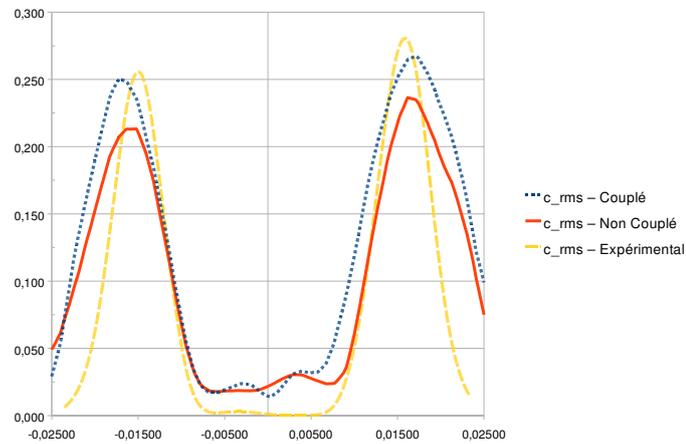


FIG. 9.9 – Profils de variance de la variable de progrès le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9$  cm ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé.

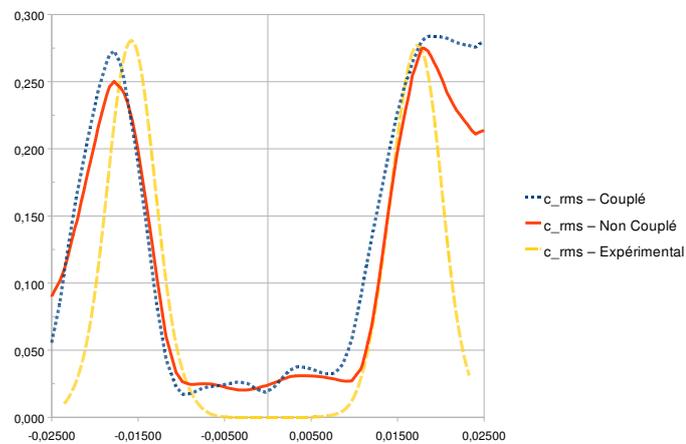


FIG. 9.10 – Profils de variance de la variable de progrès le long de l'axe  $y$  pour  $x = 11$  cm ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé.

### 9.2.2 Comparaisons des grandeurs moyennes entre les simulations avec et sans rayonnement

Les simulations, avec et sans rayonnement, sont comparées sur les valeurs moyennes et les variances de différentes grandeurs. Les champs de la grandeur considérée sont comparés qualitativement dans le plan  $z = 0$ . Des profils sont ensuite extraits le long de l'axe  $x$  central ( $y = 0$  et  $z = 0$ ) et d'un axe  $y$  transverse pour  $x = 9 \text{ cm}$  et  $z = 0$  pour une comparaison plus quantitative.

Le couplage combustion-rayonnement sera étudié par son impact énergétique, dynamique et chimique.

#### Impact sur l'énergétique

Dans la configuration étudiée, la puissance totale dégagée par la flamme est de  $70\,597 \text{ W}$ , les pertes radiatives totales représentent  $1\,443,5 \text{ W}$  soit  $2\%$  de l'énergie de la flamme. La Fig. 9.11 donne les profils du taux de dégagement de chaleur moyen ( $HR$ ) et du terme source radiatif moyen ( $S_r$ ) sur l'axe  $x = 9 \text{ cm}$ . Globalement, le terme source radiatif est inférieur de deux ordres de grandeur inférieur au dégagement de chaleur. Le rayonnement devient supérieur au dégagement de chaleur dans la zone centrale et aux bords où le dégagement de chaleur est faible : le taux de dégagement de chaleur chute dans les gaz brûlés alors que le terme source radiatif est maximal car la température est élevée.

La Fig. 9.12 donne le champ moyen de  $S_r$  dans le plan  $z = 0$  dans la simulation couplée. Les pertes radiatives sont maximales au centre de la configuration où le gaz chaud perd de l'énergie par rayonnement vers les parois froides.

Les champs de dégagement de chaleur sur la Fig. 9.13 sont peu affectés par le rayonnement. Sur la Fig. 9.14, Le taux de dégagement de chaleur est localement diminué de l'ordre de  $10\%$ . Toutefois le dégagement de chaleur total est assez peu affecté par le rayonnement : sans rayonnement il est de  $69\,239 \text{ W}$  et de  $70\,597 \text{ W}$  avec rayonnement, soit un écart d'environ  $2\%$ .

Les Fig. 9.16 à 9.21 montrent l'influence du rayonnement sur la température. Elle est plus forte au centre de la configuration, où les pertes radiatives sont les plus importantes, là où le terme source radiatif dépasse le dégagement de chaleur. La valeur moyenne de la température le long de l'axe central de la configuration baisse d'environ  $110 \text{ K}$ . Cependant, rappelons que les pertes radiatives dans ce calcul couplé sont surestimées en raison de la température de paroi froide utilisée pour les conditions aux limites radiatives. La Fig 9.18 montre que la baisse de la température est la plus importante vers  $x \sim 2 \text{ cm}$  : dans cette zone les pertes radiatives sont les plus importantes car le gaz chaud rayonne vers le dièdre (également froid) en plus des parois.

L'influence des températures de paroi sur les pertes radiatives des gaz chauds est également dépendante de l'épaisseur optique du gaz les séparant. La quantification de l'épaisseur optique ( $\kappa_p l$ ) dépend de la fréquence et il n'est pas évident de déterminer si le gaz chaud et les parois se « voient » ou si le rayonnement est absorbé entre les deux. Sur la Fig. 9.15, le coefficient moyen de Planck a été calculé à partir des valeurs moyennes ( $\kappa_p(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$ ) sur la coupe  $z = 0$ . Il semble toutefois que l'épaisseur optique globale de la configuration reste mince :  $\kappa_{p,max} \times L_{max} \sim 1,5 \times 0,3 = 0,45$ .

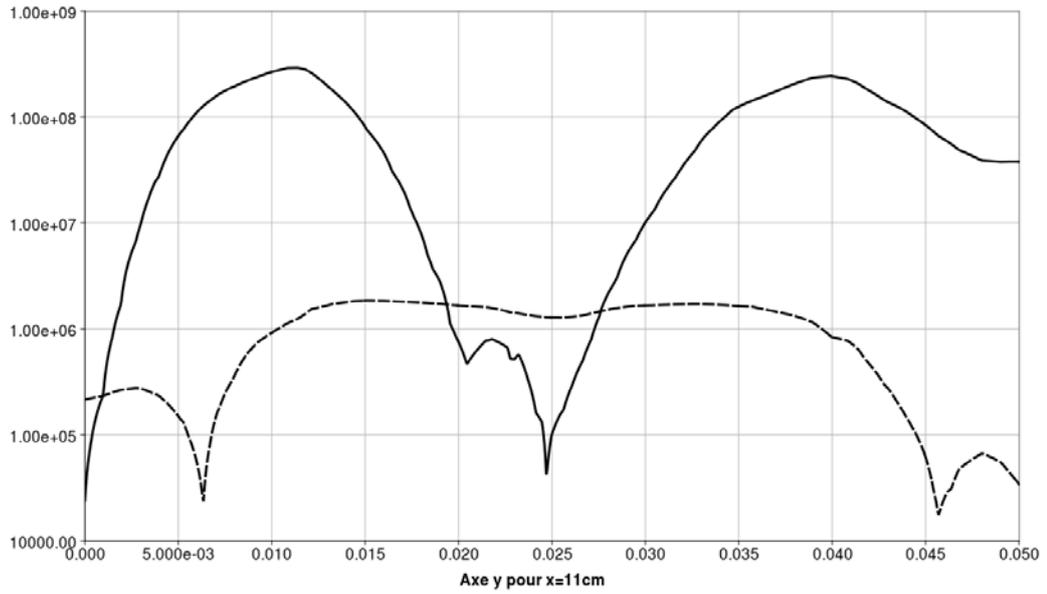


FIG. 9.11 – Terme sources en  $W/m^3$  : dégagement de chaleur (trait continu) et du terme source radiatif (trait pointillé) sur l'axe  $x = 0,11$  m. La valeur absolue du terme source radiatif a été représentée pour utiliser une échelle logarithmique en ordonnée. Le terme source est négatif au milieu du profil (refroidissement des gaz chauds).

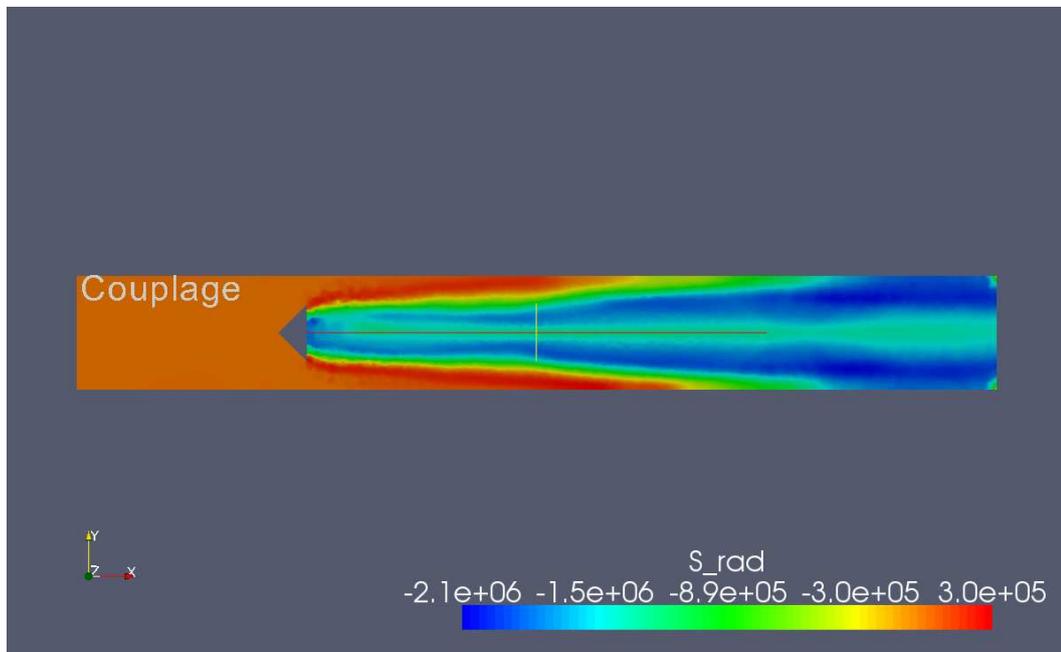


FIG. 9.12 – Champ du terme source radiatif  $S_r$  pour le calcul couplé.

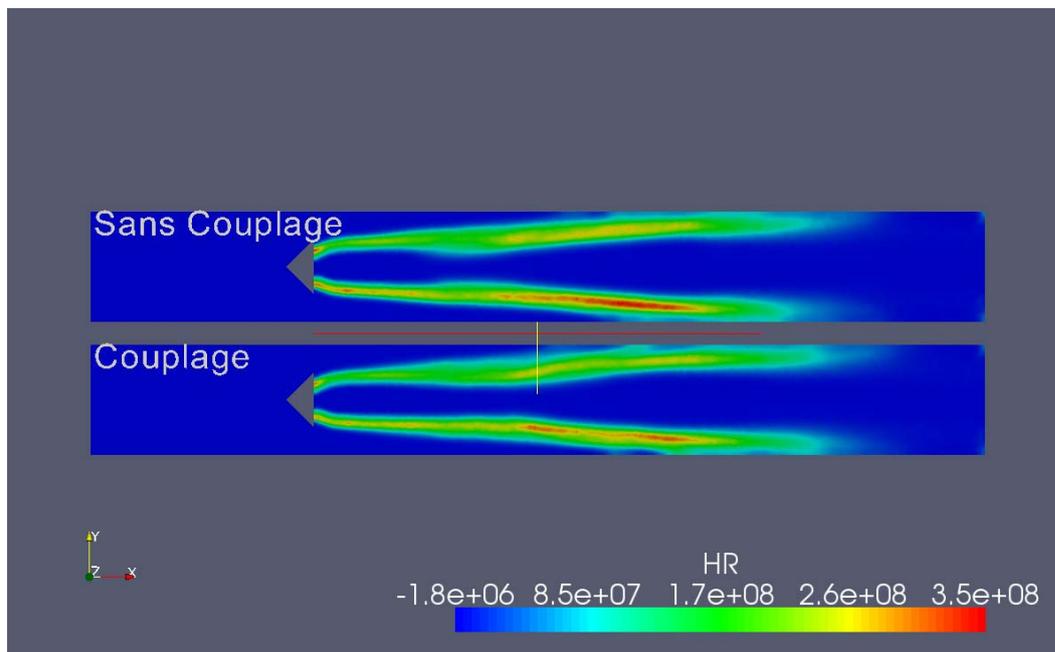


FIG. 9.13 – Champ du taux de dégagement de chaleur sur le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

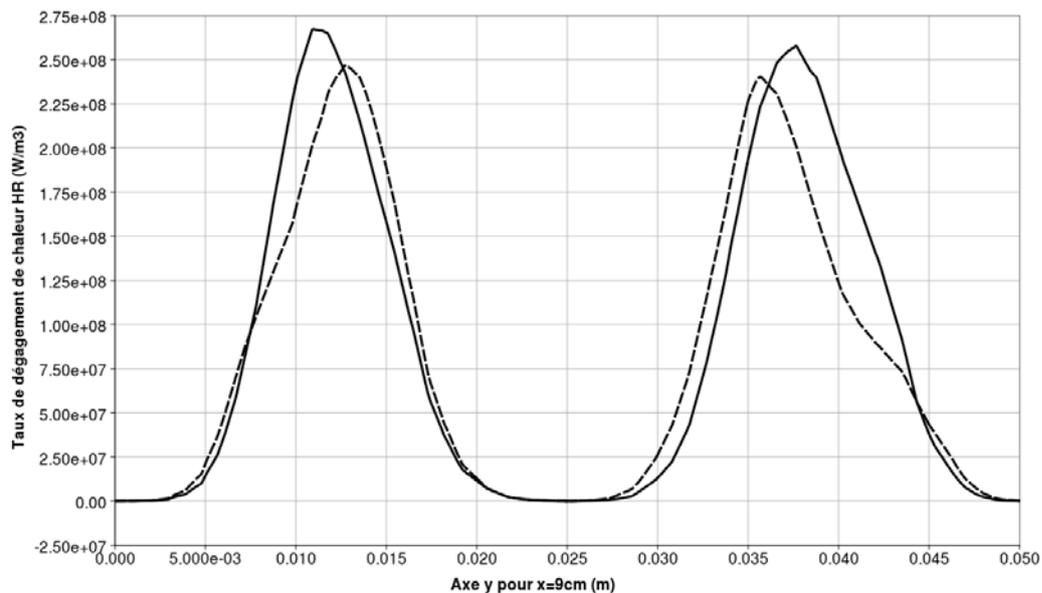


FIG. 9.14 – Profils de taux de dégagement de chaleur le long de l'axe  $y = 2 \text{ cm}$ ,  $z = 0$  pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

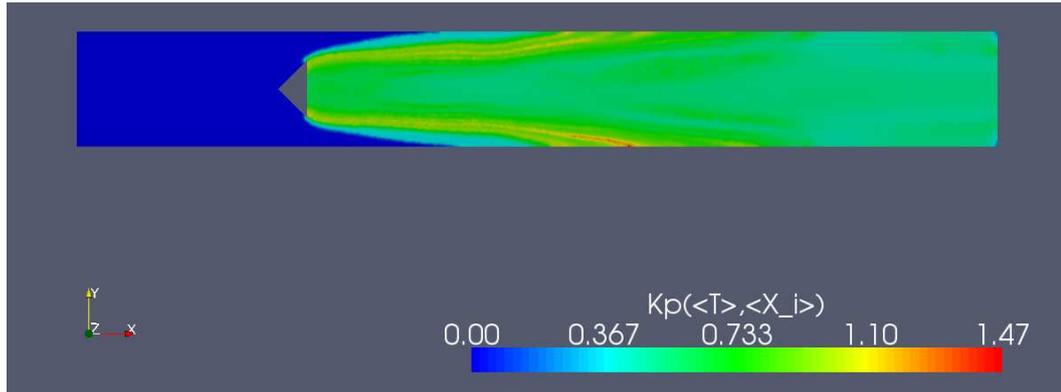


FIG. 9.15 – Coefficient moyen de Planck calculé à partir des valeurs moyennes de température et de concentration du calcul couplé dans le plan  $z = 0$ .

On voit sur les Fig. 9.19 et 9.21 que la variance de température est augmentée de 25 K (60%) sur l'axe central et de 60 K (15%) sur l'axe  $x = 9 \text{ cm}$ . Dans le calcul couplé cette augmentation est due aux écarts de température plus importants du fait de la température moyenne plus faible au centre.

Le couplage rayonnement-combustion se fait par l'équation de l'énergie en modifiant les températures ce qui va avoir une influence importante sur la chimie de la combustion particulièrement pour les espèces minoritaires.

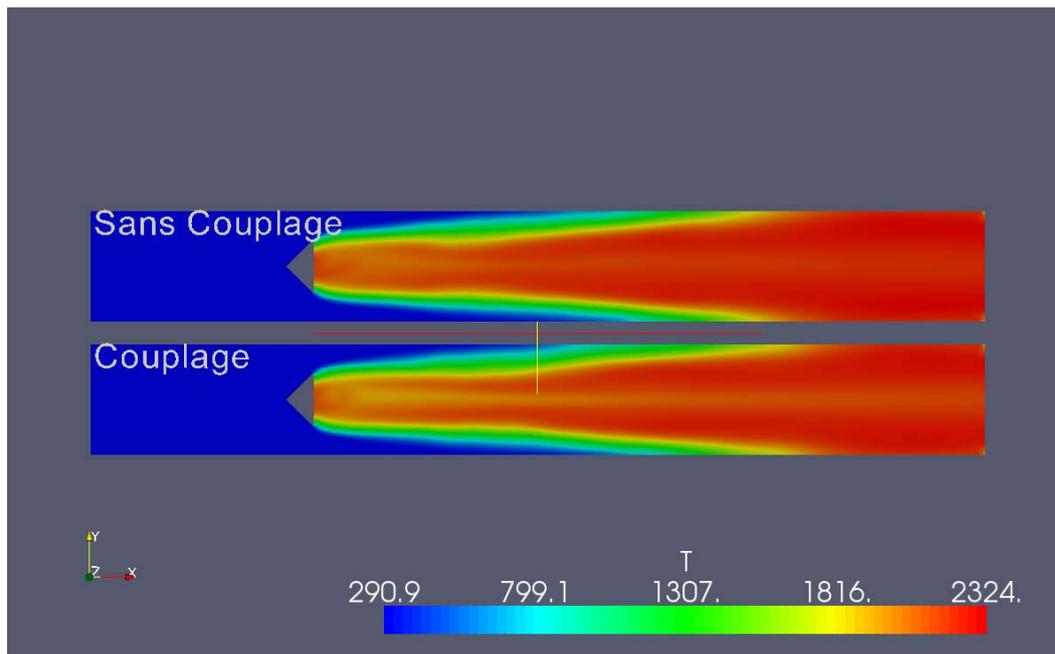


FIG. 9.16 – Champ de température moyenne dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

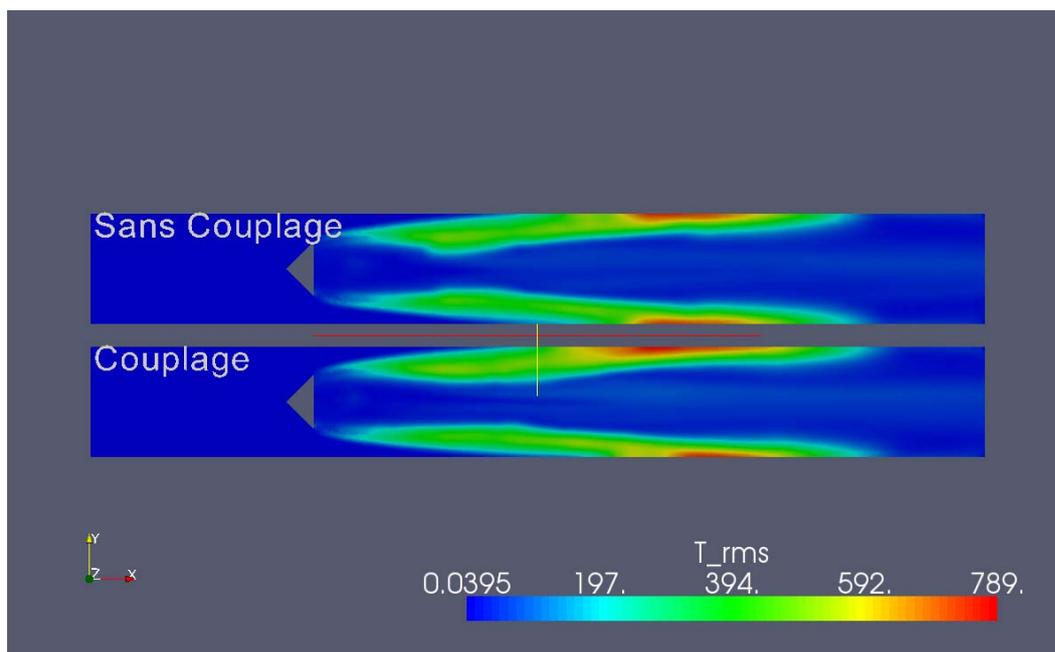


FIG. 9.17 – Champ de variance de température dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

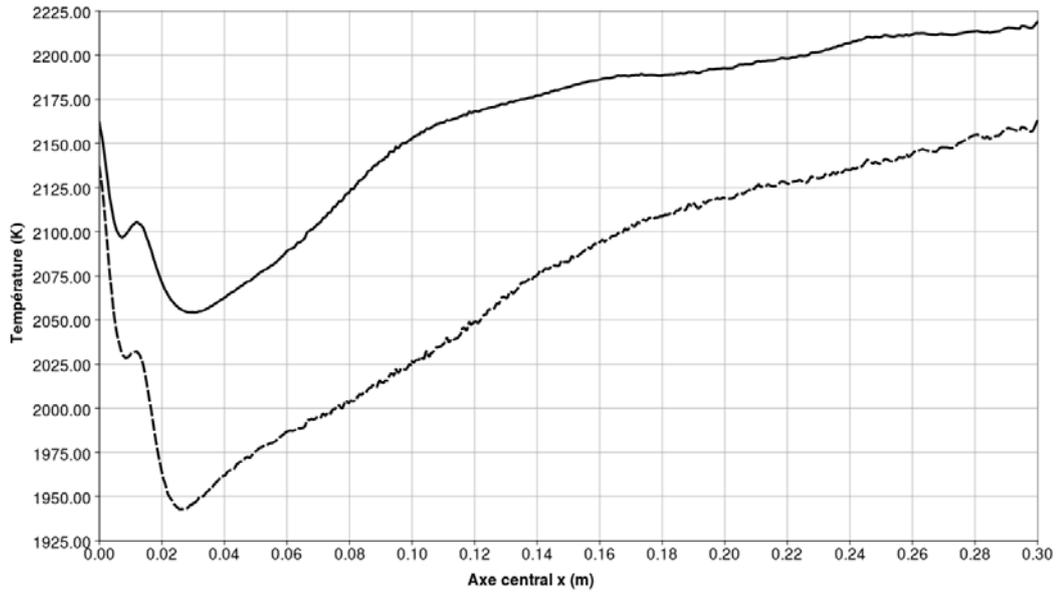


FIG. 9.18 – Profils de la température moyenne le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

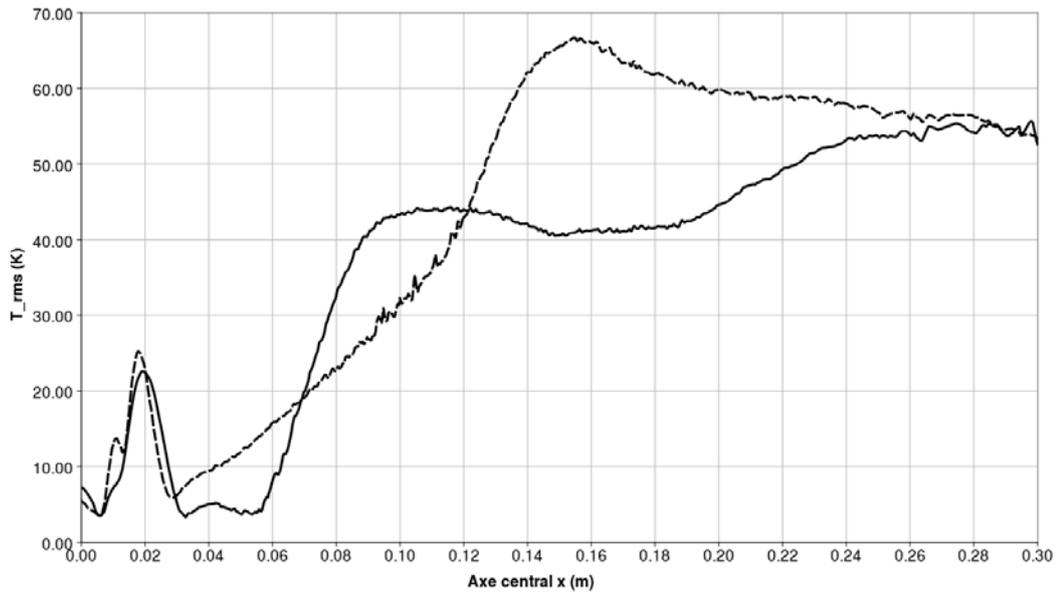


FIG. 9.19 – Profils de variance de température le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

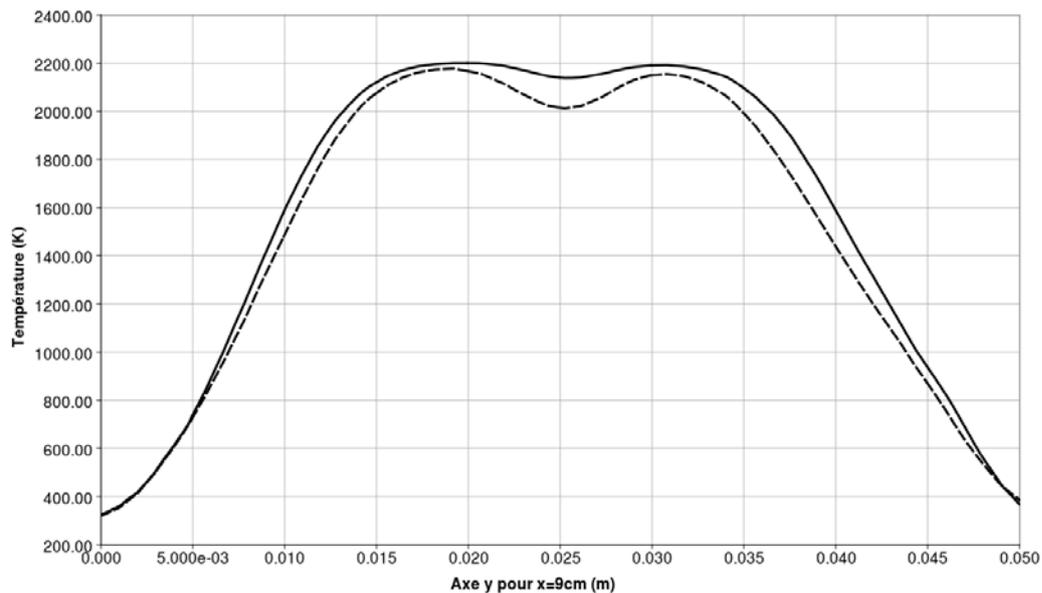


FIG. 9.20 – Profils de la température moyenne le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9 \text{ cm}$ ,  $z = 0 \text{ cm}$  pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

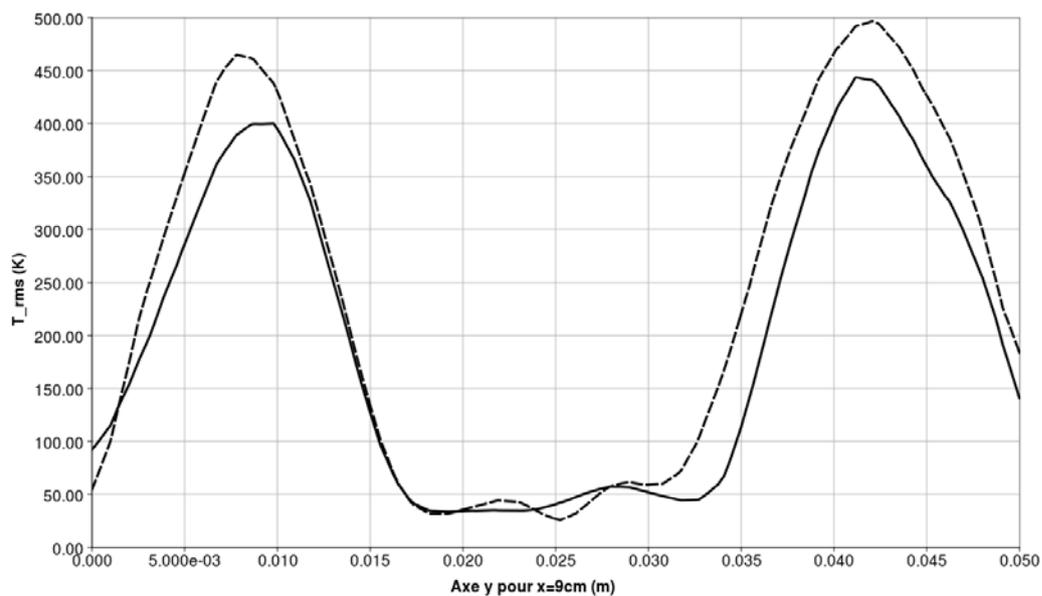


FIG. 9.21 – Profils de variance de température le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9 \text{ cm}$ ,  $z = 0 \text{ cm}$  pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

### Impact sur la dynamique

Le couplage entre le rayonnement et la dynamique se fait de façon indirecte car le rayonnement n'intervient pas dans l'équation de la quantité de mouvement. Le premier mécanisme de couplage se fait par l'équation d'état des gaz parfaits : il peut y avoir un effet de dilatation des gaz chauds dont la température baisse. Le second mécanisme fait intervenir la viscosité des gaz qui diminue avec la température.

Dans la configuration étudiée, la stabilisation de la flamme est assurée par la zone de recirculation située en aval de l'accroche flamme. Les Fig. 9.22 à 9.27 montrent l'influence du rayonnement sur le champ de vitesse. Les champs de la vitesse moyenne et de sa variance sont très proches et quantitativement l'impact du rayonnement sur la vitesse est très faible. Aussi le rayonnement n'induit pas de modification significative dans la stabilisation de la flamme et la zone de recirculation conserve la même taille. L'influence du rayonnement sur les variances de vitesse est plus sensible et est plus prononcée en sortie de la chambre sur l'axe central, où elle baisse de 15%. La baisse de la variance de vitesse sur l'axe  $x = 9 \text{ cm}$  est plus faible et ne dépasse pas 5%.

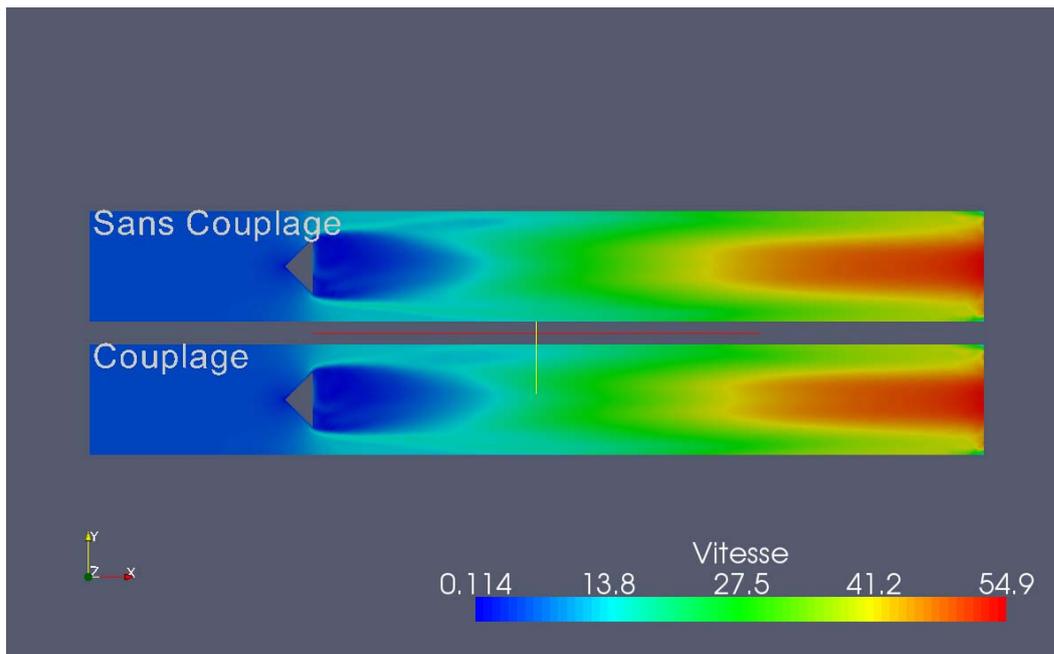


FIG. 9.22 – Champ de la norme du vecteur vitesse moyenne dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

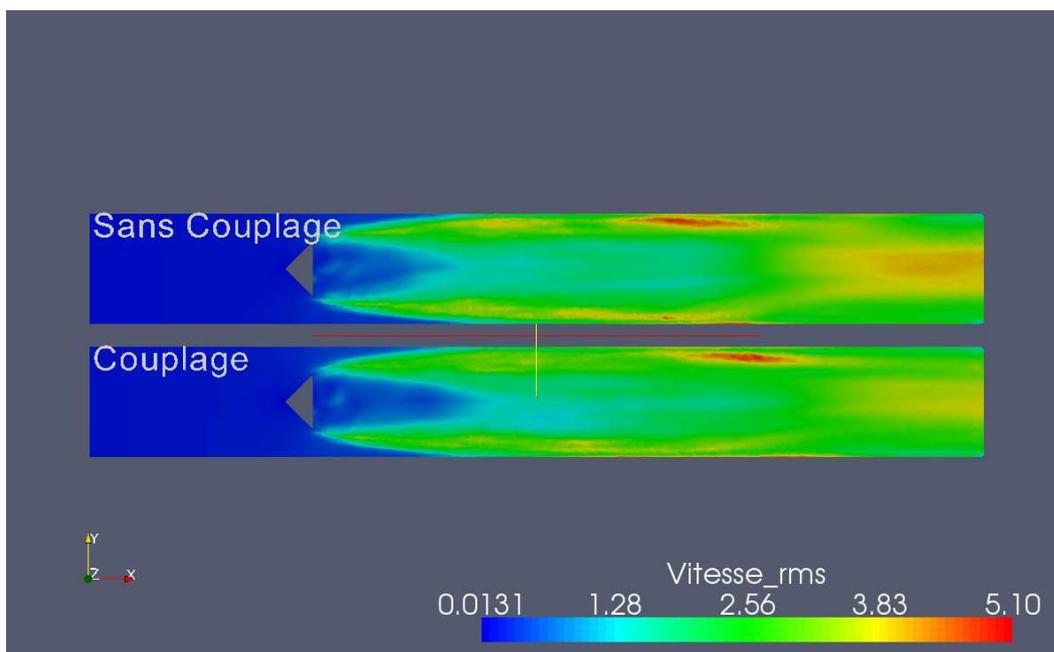


FIG. 9.23 – Champ de variance de la norme du vecteur vitesse dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

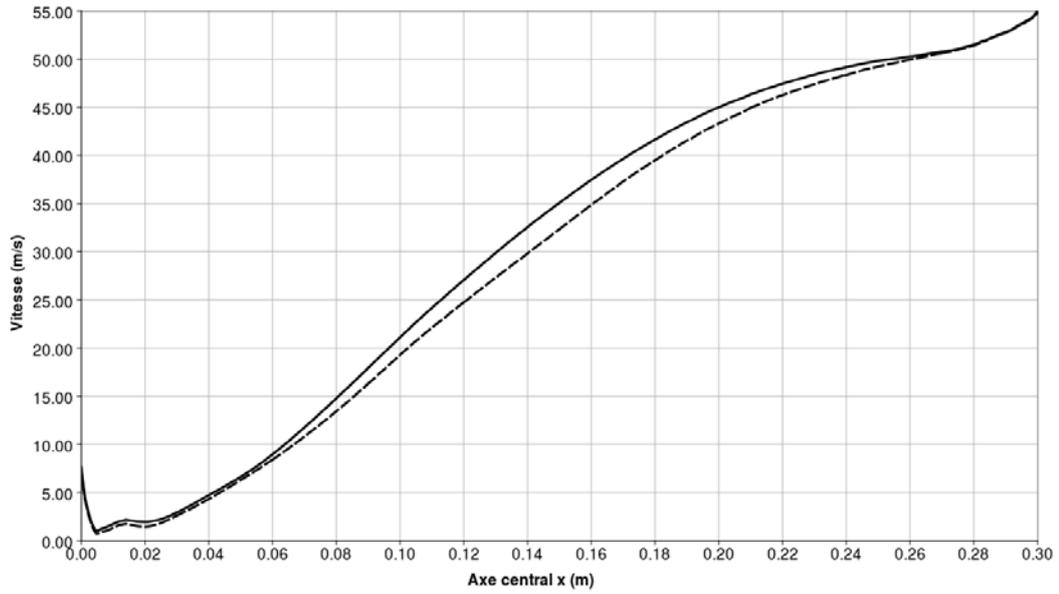


FIG. 9.24 – Profils de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

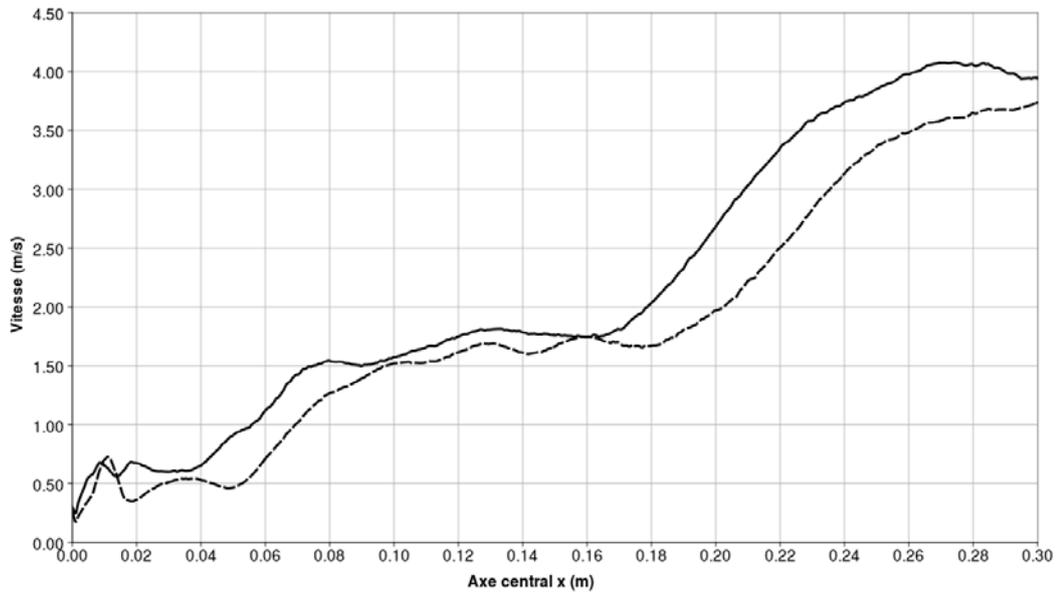


FIG. 9.25 – Profils de variance de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

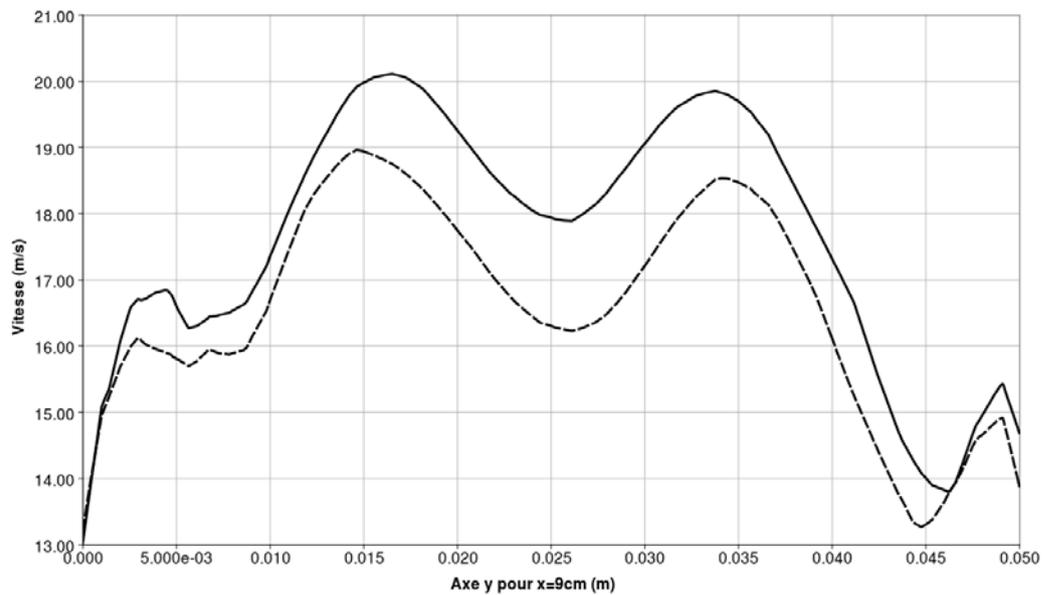


FIG. 9.26 – Profils de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9 \text{ cm}$ ,  $z = 0 \text{ cm}$  pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

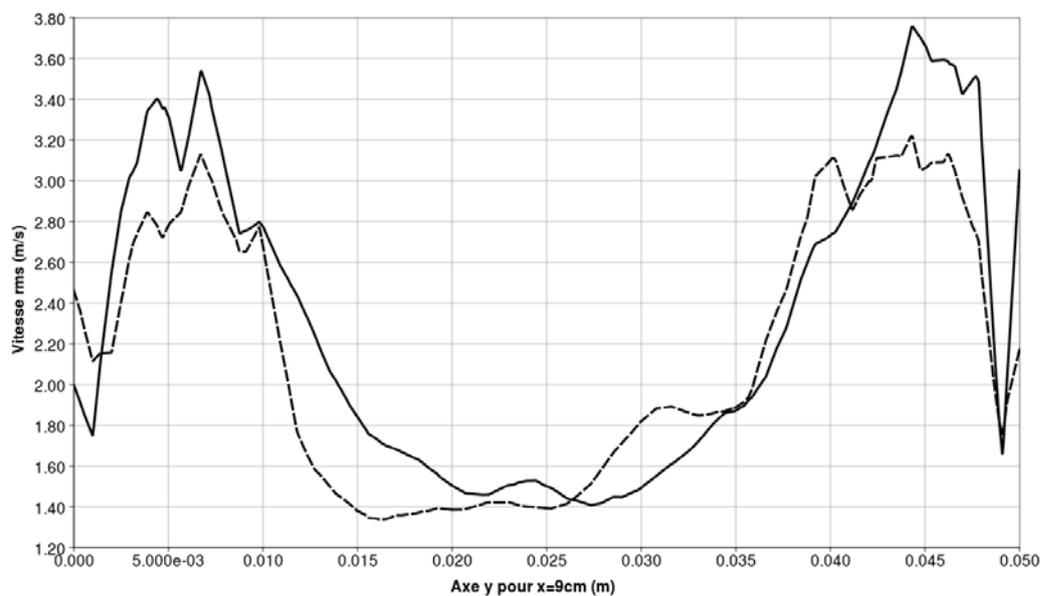


FIG. 9.27 – Profils de variance de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9 \text{ cm}$ ,  $z = 0 \text{ cm}$  pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

### Impact sur la dynamique instationnaire

L'influence du rayonnement sur la dynamique instationnaire ouvre à nouveau la question de l'interaction rayonnement-turbulence. Peu de travaux ont été réalisés sur l'influence du rayonnement sur la turbulence, on peut citer les travaux de Simonin *et al.* [134] dans des applications atmosphériques où il a montré que le rayonnement avait un rôle dissipatif important et du même ordre que la dissipation par conduction. Cependant ce travail est réalisé dans la cadre de tailles caractéristiques beaucoup plus importantes que les applications de combustion.

L'analyse du paragraphe précédent a montré que le rayonnement avait une influence plus importante sur les variances que sur les moyennes des grandeurs. Ceci suggère que le rayonnement peut modifier la dynamique instationnaire de la flamme. La Fig. 9.28 montre que sur des champs instationnaires de température la flamme pour laquelle le rayonnement est considéré présente plus de fluctuations dans le cas avec rayonnement.

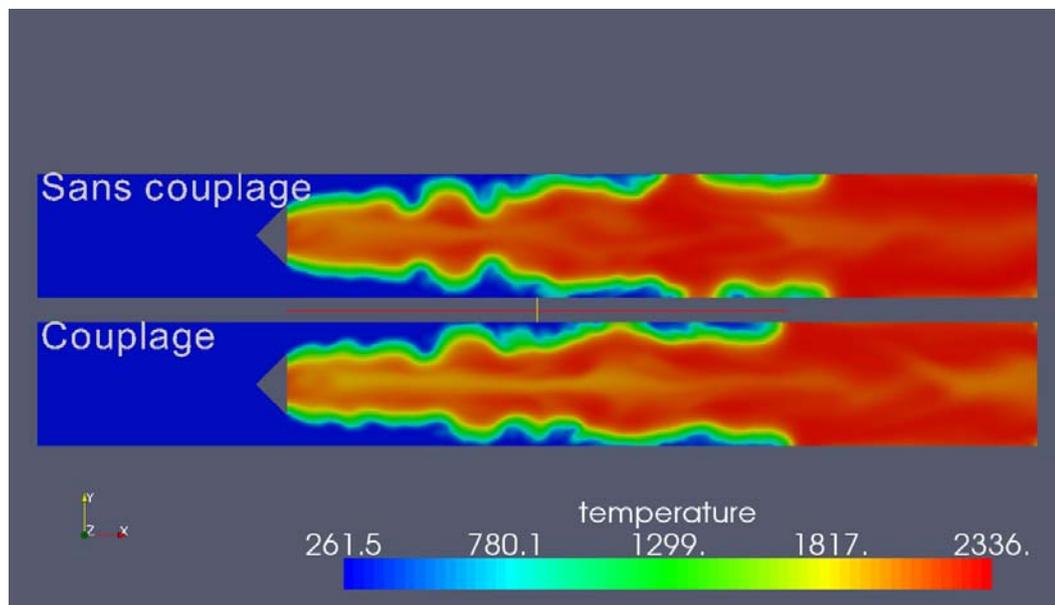


FIG. 9.28 – Champ de température instantanée dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

La densité spectrale de puissance de la vitesse  $u$  a été représentée sur les Fig. 9.30 à 9.33 pour 4 points de la flamme, donnés sur la Fig. 9.29 dont les coordonnées sont :

- 1 :  $x = 1 \text{ cm}$ ,  $y = 1,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$ ;
- 2 :  $x = 1,5 \text{ cm}$ ,  $y = 1,5 \text{ cm}$ ;
- 3 :  $x = 15 \text{ cm}$ ,  $y = -2,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$ ;
- 4 :  $x = 10 \text{ cm}$ ,  $y = -1,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$ .

La prise en compte du rayonnement peut modifier les pics de fréquence et faire apparaître des pics supplémentaires comme pour les points 2 et 3. Pour les points 1 et 2, l'amplitude de la densité spectrale est diminuée. Ces résultats montrent que le rayonnement peut avoir un impact sur les instabilités de combustion. Cependant la configuration est assez stable et donc les effets du rayonnement sur les instabilités plutôt limités.

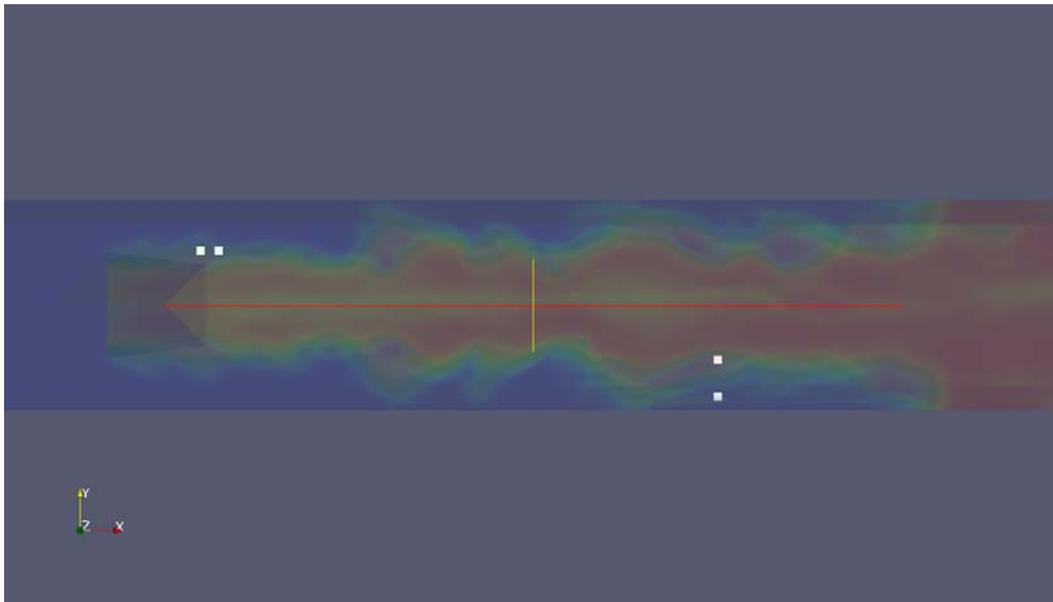


FIG. 9.29 – Positions des points sonde dans la configuration pour mesures les densités spectrale de puissance en vitesse  $u$ .

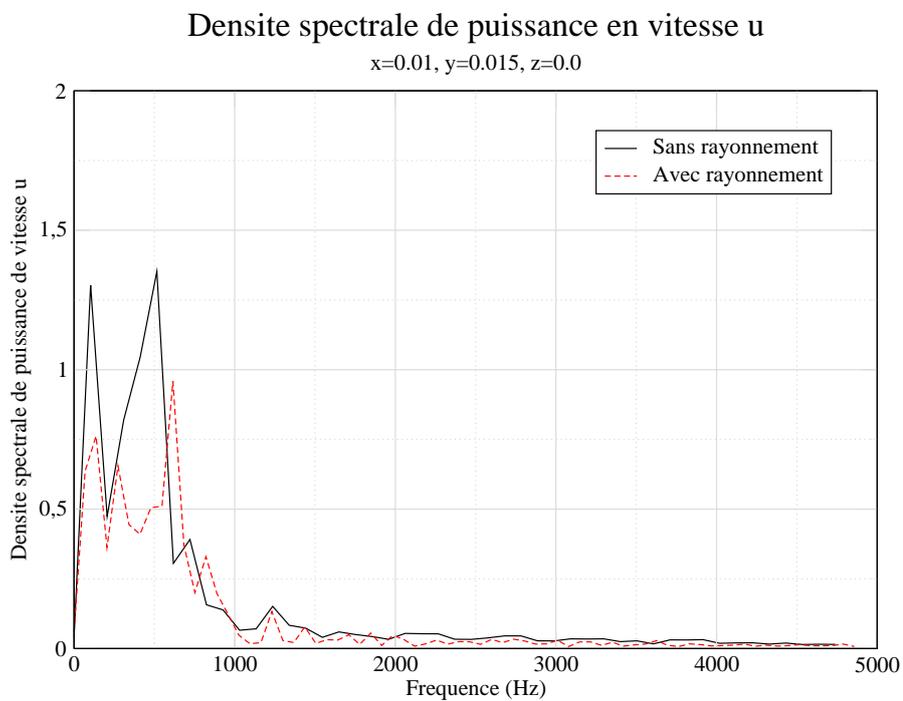


FIG. 9.30 – Densité spectrale de puissance de la vitesse  $u$  en  $x = 1 \text{ cm}$ ,  $y = 1,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

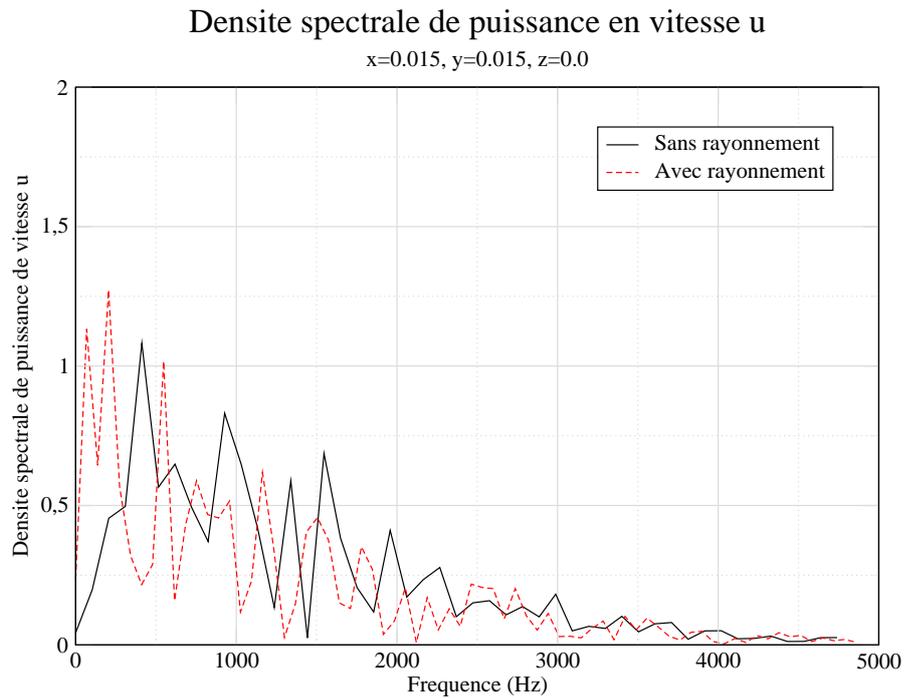


FIG. 9.31 – Densité spectrale de puissance de la vitesse u en  $x = 1,5 \text{ cm}$ ,  $y = 1,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

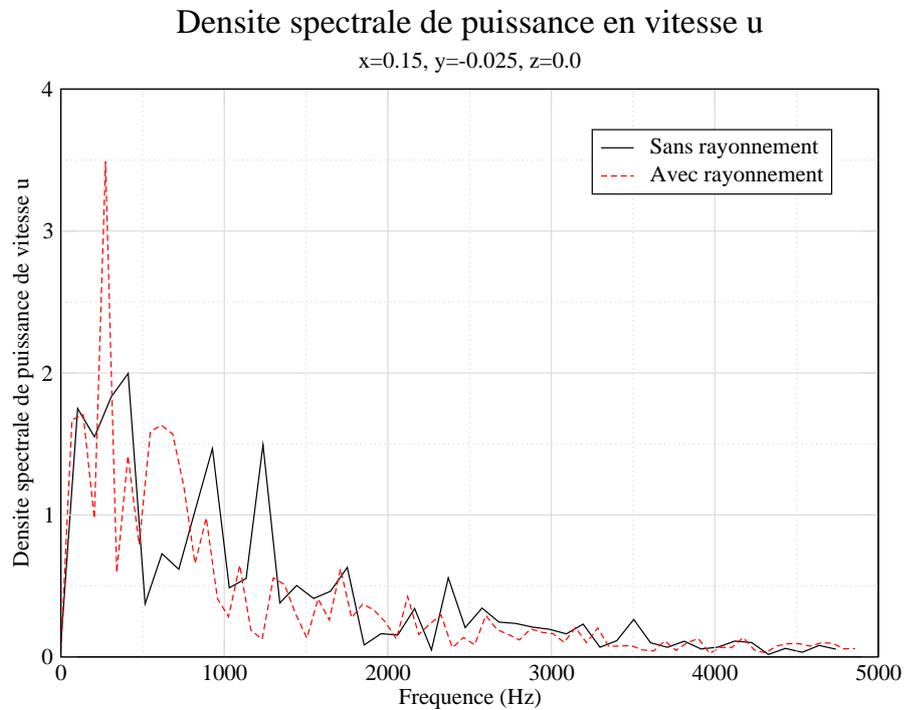


FIG. 9.32 – Densité spectrale de puissance de la vitesse u en  $x = 15 \text{ cm}$ ,  $y = -2,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

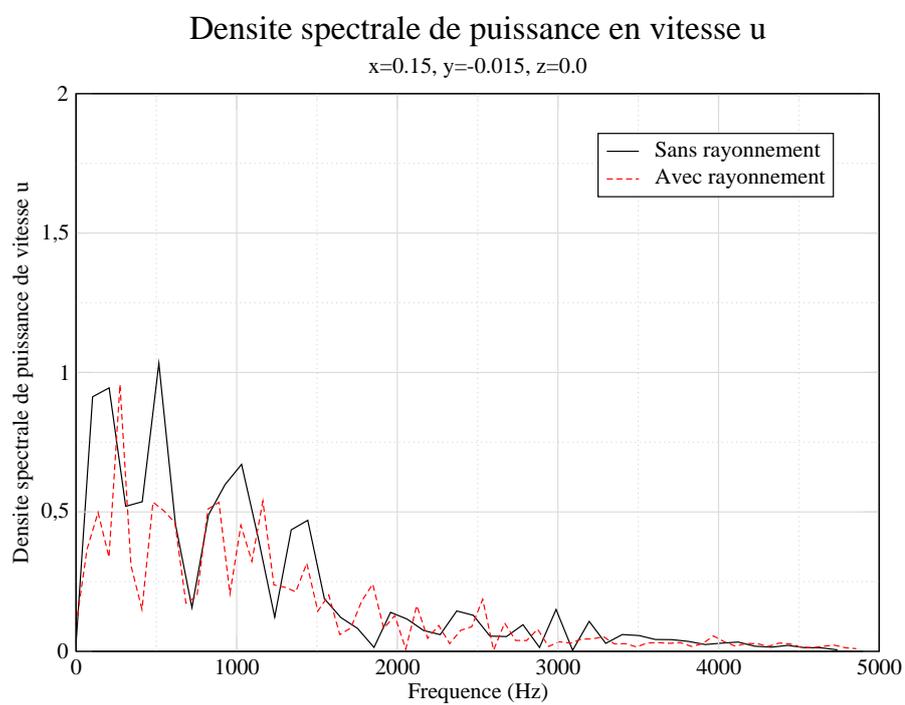


FIG. 9.33 – Densité spectrale de puissance de la vitesse  $u$  en  $x = 10 \text{ cm}$ ,  $y = -1,5 \text{ cm}$ ,  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

|                            | Sans rayonnement     | Avec rayonnement     | Écart relatif |
|----------------------------|----------------------|----------------------|---------------|
| $\langle Y_{H_2O} \rangle$ | $5,35 \cdot 10^{-2}$ | $5,29 \cdot 10^{-2}$ | -1,28%        |
| $\langle Y_{CO_2} \rangle$ | $9,25 \cdot 10^{-2}$ | $9,22 \cdot 10^{-2}$ | -0,28%        |
| $\langle Y_{CO} \rangle$   | $4,93 \cdot 10^{-3}$ | $4,17 \cdot 10^{-3}$ | -18,21%       |

TAB. 9.2 – Fractions massiques moyennes dans la chambre avec et sans rayonnement.

### Impact sur la chimie

Les Fig. 9.34 à 9.39 montrent l'influence du rayonnement sur la fraction massique de  $H_2O$ . Sur l'axe central la fraction massique de  $H_2O$  est diminuée de l'ordre de 5% par le rayonnement. L'influence sur la variance, comme pour la température, est plus importante. La variance sur la fraction massique de  $H_2O$  est diminuée de l'ordre de 60% par le rayonnement sur l'axe central. Sur l'axe  $x = 9 \text{ cm}$  la variance est diminuée d'environ 10%.

L'effet du rayonnement sur la fraction massique de  $CO_2$  est montré sur les Fig. 9.40 à 9.45. Il est de l'ordre de 2% au centre de la configuration. Sur la variance de fraction massique il est important et atteint 100% sur l'axe central.

Enfin il est intéressant de voir l'impact du rayonnement sur une espèce minoritaire comme le  $CO$  (Fig. 9.46 à 9.51). Les champs de fraction massique de  $CO$  sont significativement modifiés par rapport aux fractions massiques de  $H_2O$  et  $CO_2$  qui restaient qualitativement très proches. Quantitativement, l'effet du rayonnement diminue la fraction massique de  $CO$  de presque 40% sur l'axe central et de 25% sur l'axe  $x = 9 \text{ cm}$ . L'impact sur la variance est très important sur l'axe central, le rayonnement induit un écart jusqu'à 175% par rapport au cas non couplé, sur l'axe  $x = 9 \text{ cm}$  l'écart est de 40%.

Les fractions massiques moyenne intégrées sur la chambre (voir tableau 9.2) sont assez peu modifiées pour  $CO_2$  et  $H_2O$  : -0,28% pour  $CO_2$  et -1,28% pour  $H_2O$ , ce qui n'est pas significatif. Par contre, la fraction massique moyenne de  $CO$  est diminuée de 18,21% par le rayonnement.

Afin d'analyser les modifications des fractions massiques de produit, les taux de réactions nets moyens ont été représentés sur la Fig. 9.52 pour l'axe  $x = 9 \text{ cm}$ . Le taux de réaction net de la réaction 1 est peu affecté et celui de la réaction 2 diminue d'environ 10%.

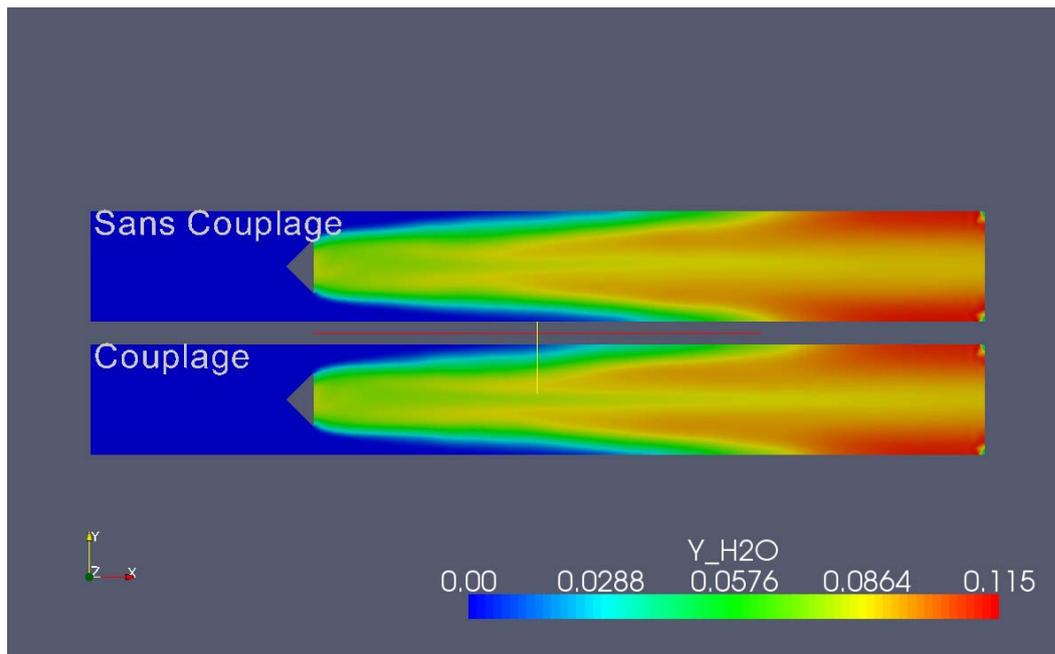


FIG. 9.34 – Champ de la fraction massique de  $H_2O$  moyenne dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

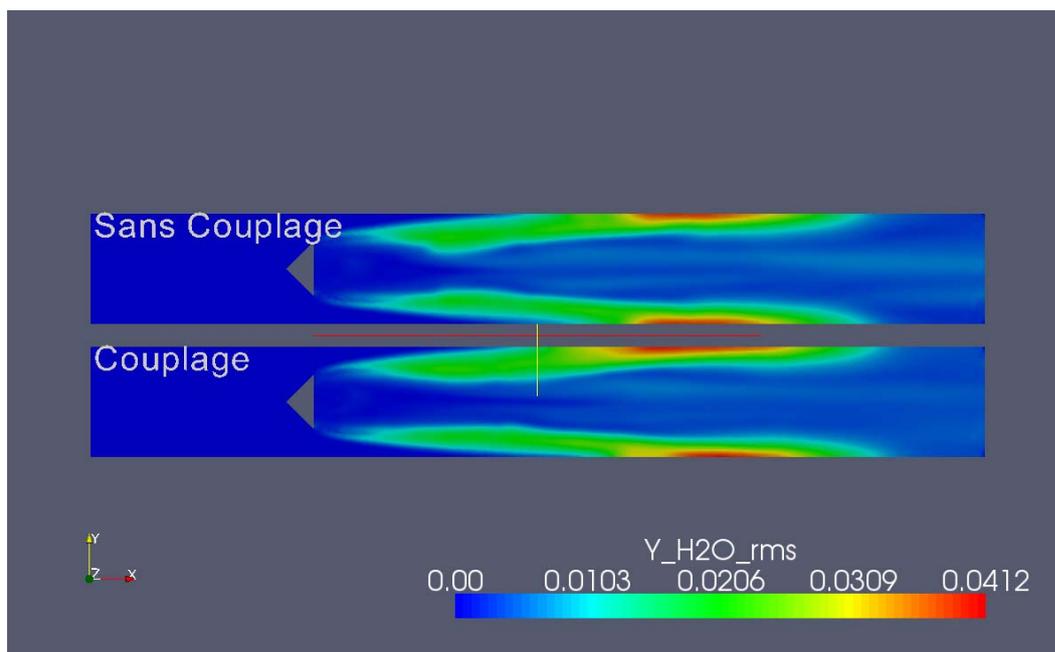


FIG. 9.35 – Champ de variance de la fraction massique de  $H_2O$  dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

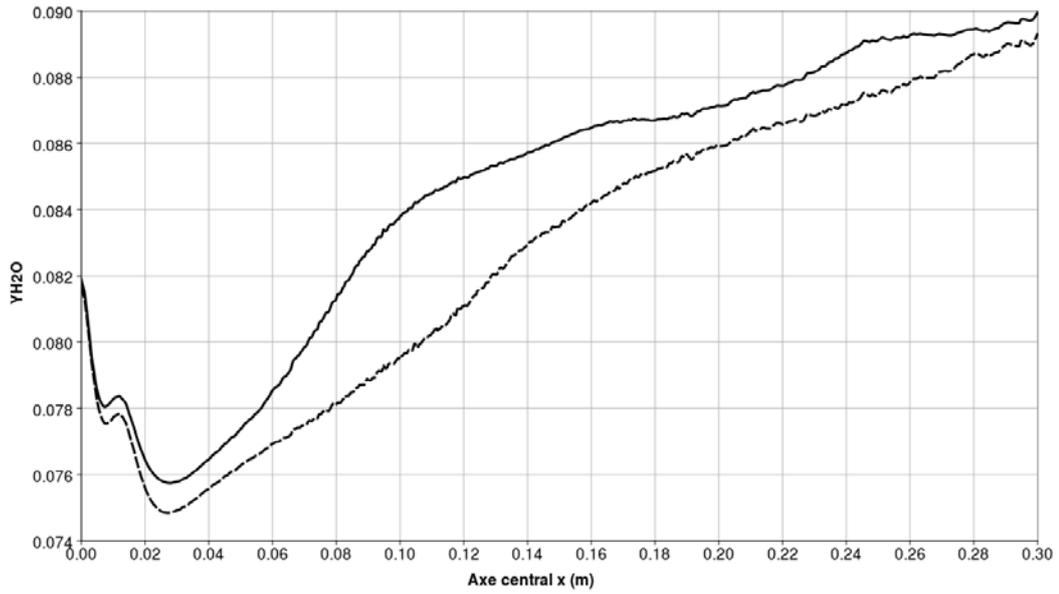


FIG. 9.36 – Profils de fraction massique de H<sub>2</sub>O moyenne le long de l'axe x pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

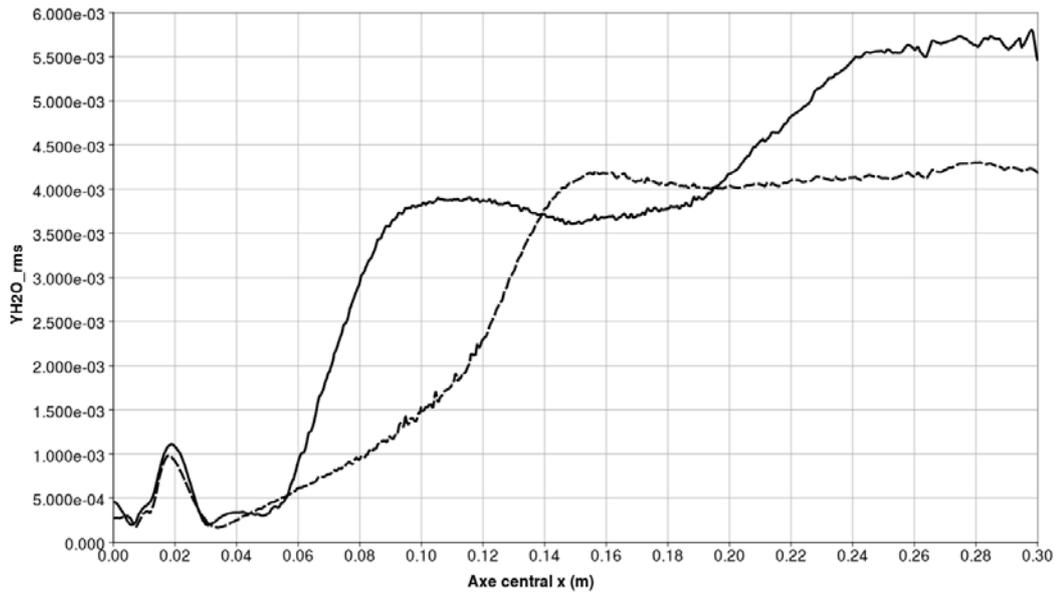


FIG. 9.37 – Profils de variance de H<sub>2</sub>O le long de l'axe x pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

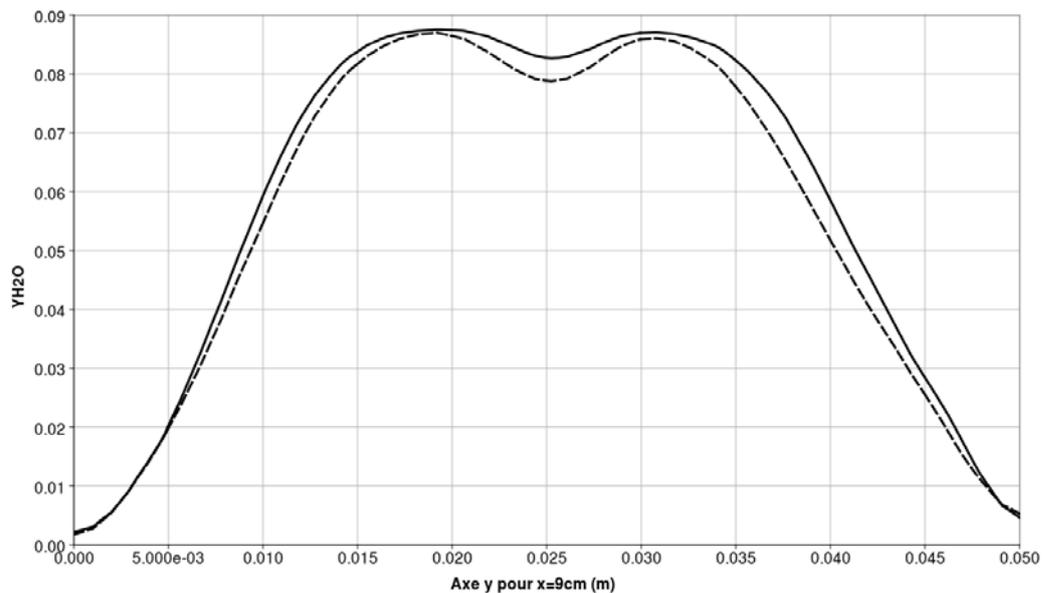


FIG. 9.38 – Profils de fraction massique de H<sub>2</sub>O moyenne le long de l'axe y pour  $x = 9$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

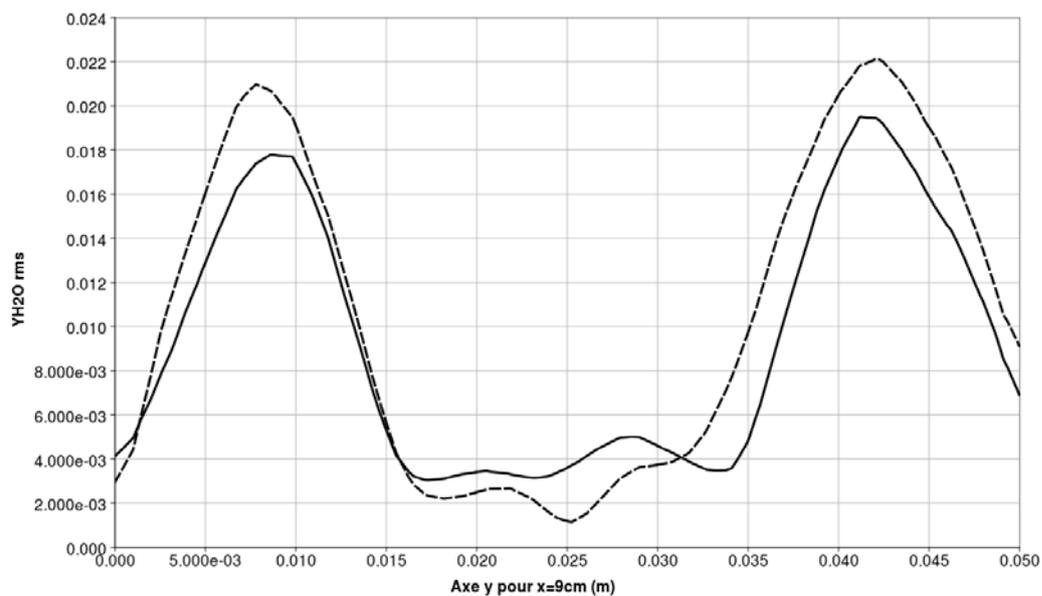


FIG. 9.39 – Profils de variance de H<sub>2</sub>O le long de l'axe y pour  $x = 9$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

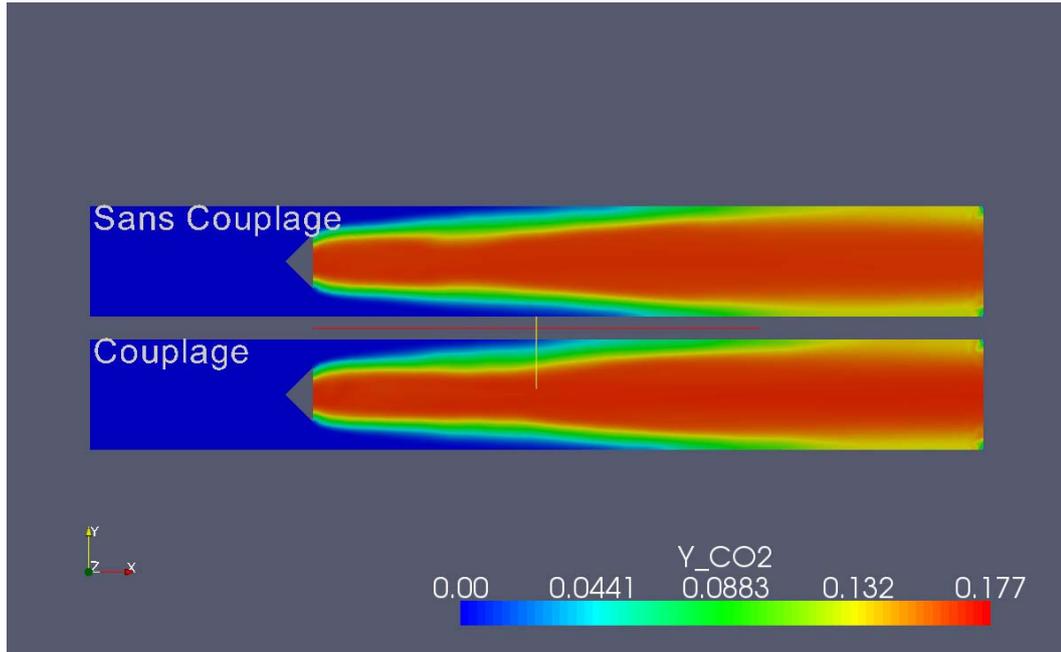


FIG. 9.40 – Champ de la fraction massique de CO<sub>2</sub> moyenne dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

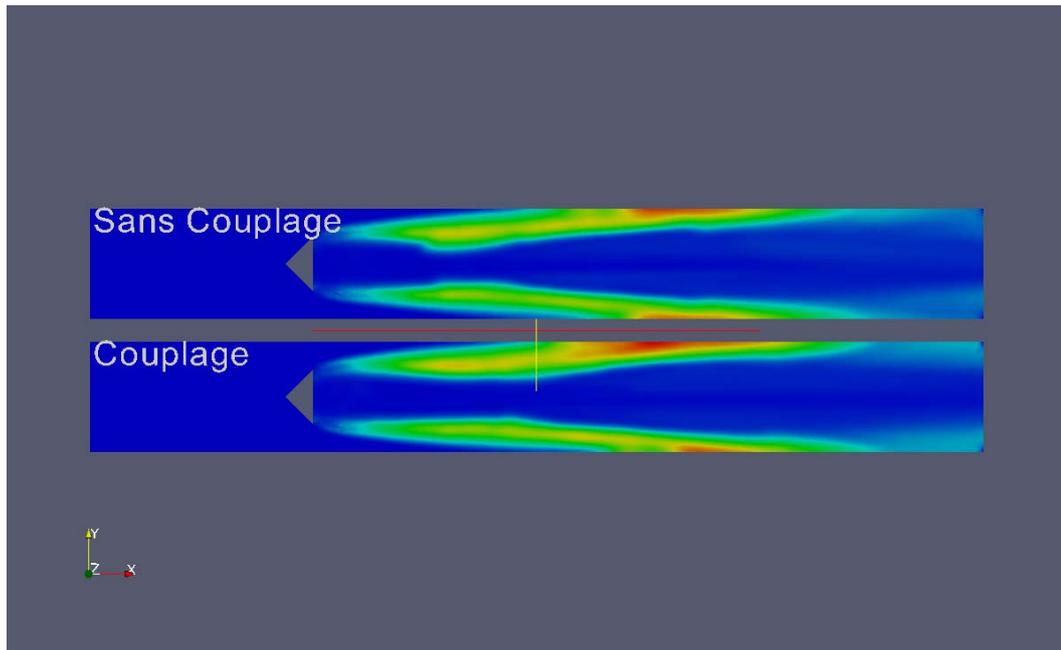


FIG. 9.41 – Champ de variance de la fraction massique de CO<sub>2</sub> dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

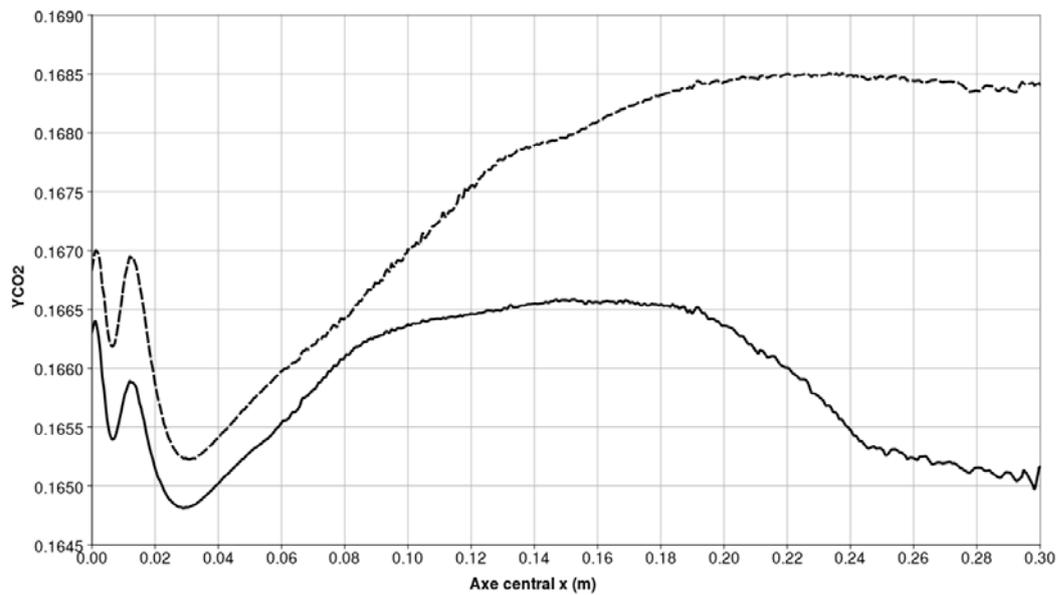


FIG. 9.42 – Profils de fraction massique de CO<sub>2</sub> moyenne le long de l'axe x pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

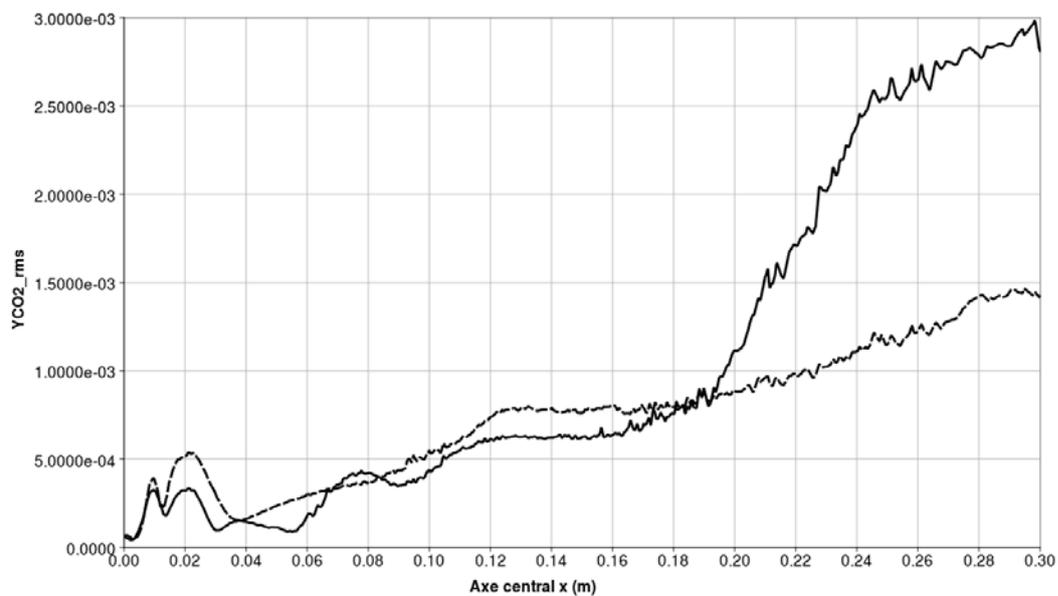


FIG. 9.43 – Profils de variance de CO<sub>2</sub> le long de l'axe x pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

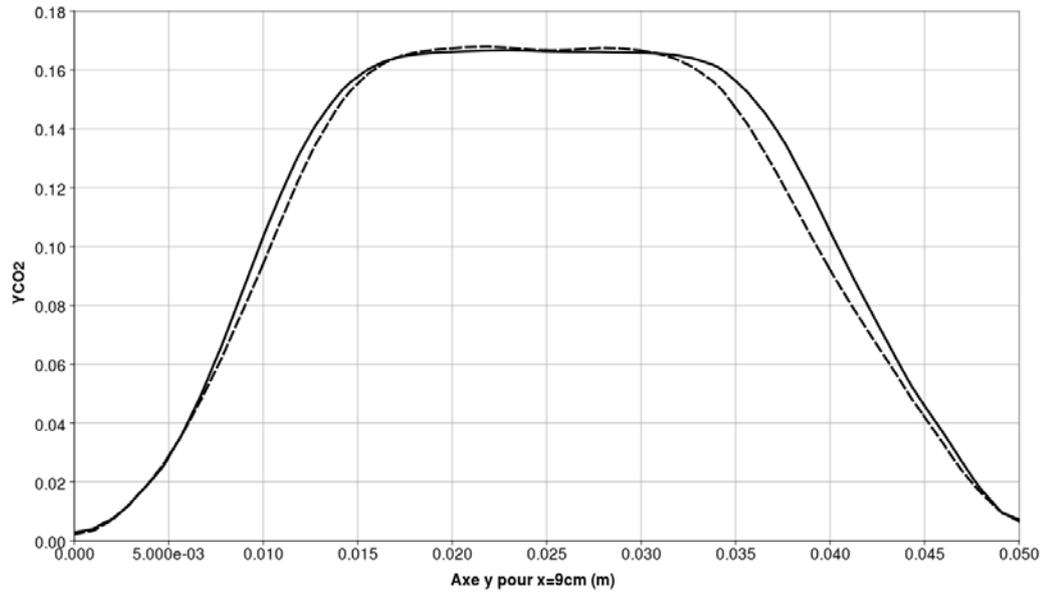


FIG. 9.44 – Profils de fraction massique de CO<sub>2</sub> moyenne le long de l'axe y pour  $x = 9$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

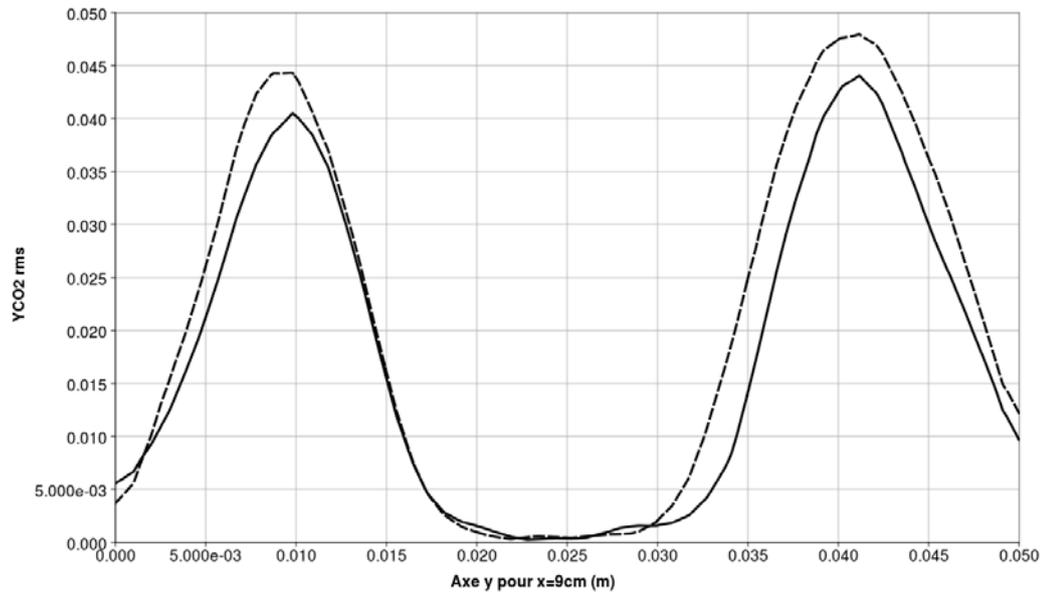


FIG. 9.45 – Profils de variance de CO<sub>2</sub> le long de l'axe y pour  $x = 9$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

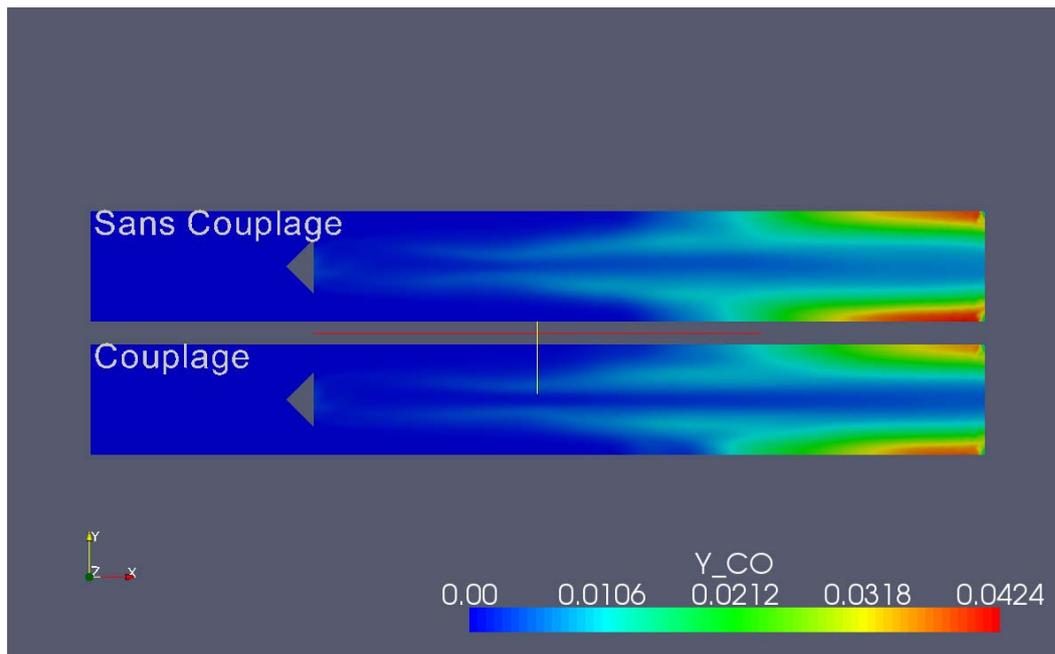


FIG. 9.46 – Champ de la fraction massique de CO moyenne dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

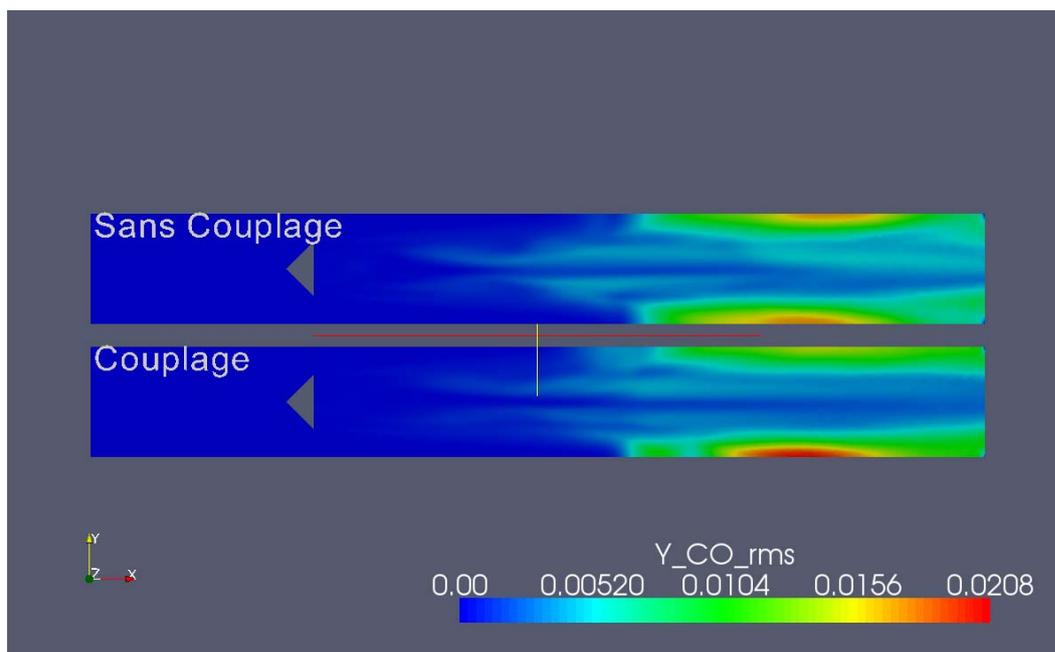


FIG. 9.47 – Champ de variance de la fraction massique de CO dans le plan  $z = 0$  pour les simulations avec et sans rayonnement.

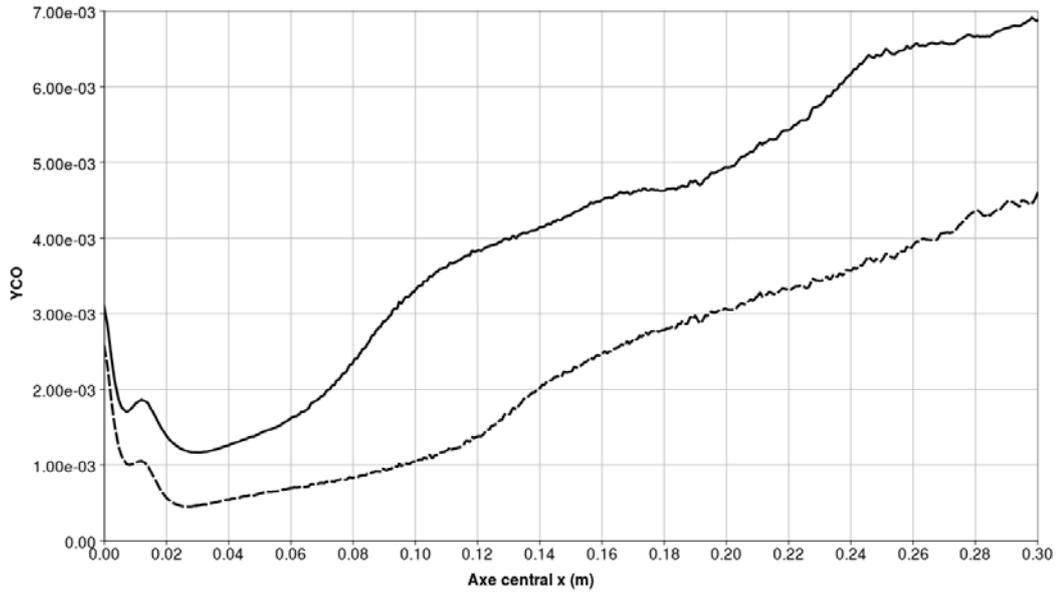


FIG. 9.48 – Profils de fraction massique de CO moyenne le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

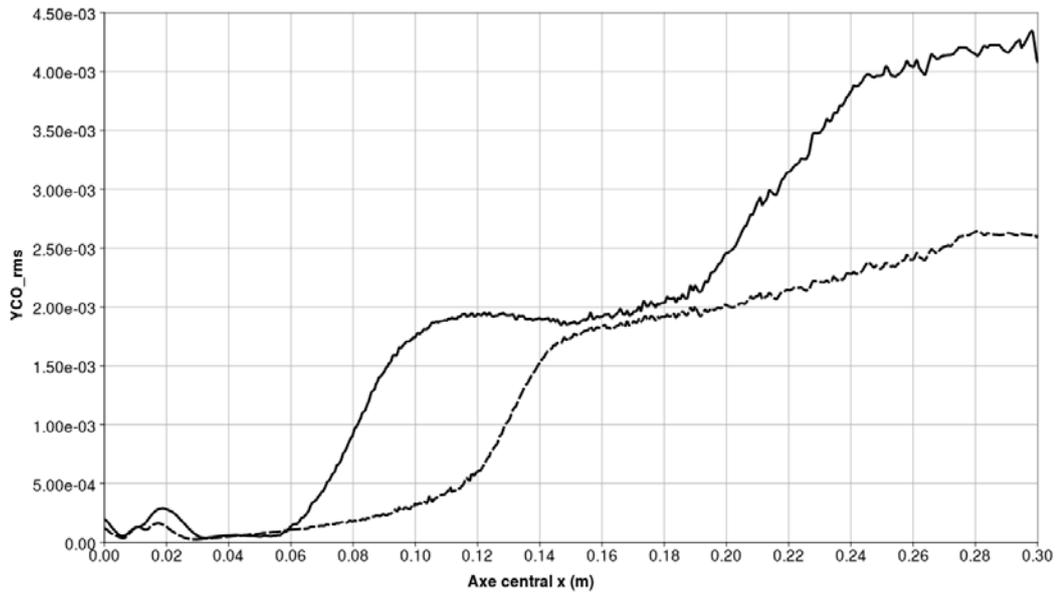


FIG. 9.49 – Profils de variance de CO le long de l'axe  $x$  pour  $y = 0$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

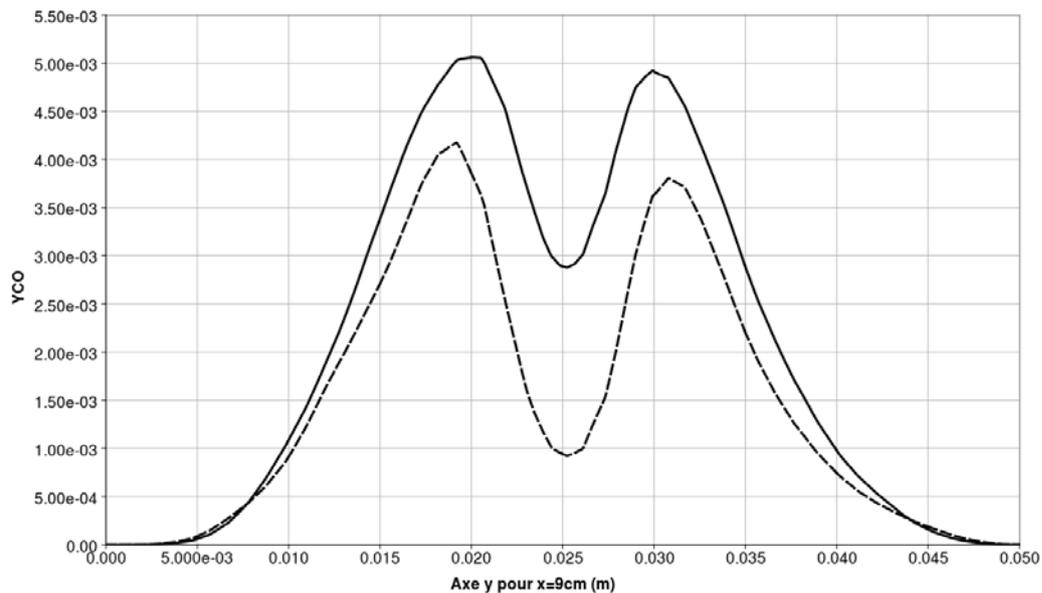


FIG. 9.50 – Profils de fraction massique de CO moyenne le long de l'axe y pour  $x = 9$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

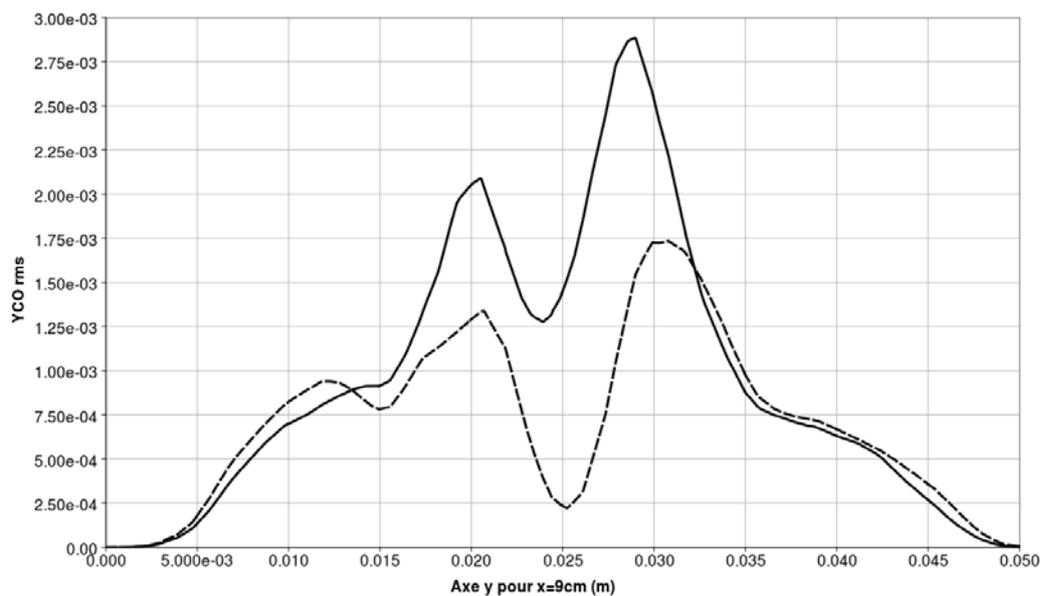


FIG. 9.51 – Profils de variance de CO le long de l'axe y pour  $x = 9$  cm,  $z = 0$  cm pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

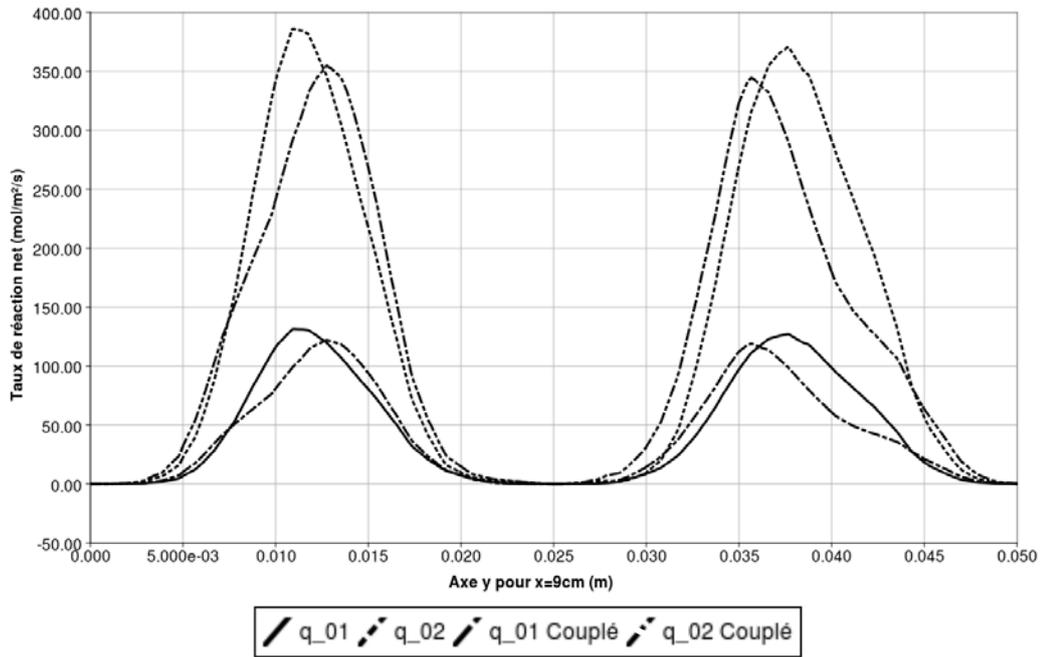


FIG. 9.52 – Taux de réaction nets pour les 2 réactions chimiques considérées pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu).

### 9.3 INTERACTION DU RAYONNEMENT ET DE LA COMBUSTION TURBULENTE

Il est possible d'évaluer à nouveau la TRI à partir des fluctuations résolues par la LES, dans le même contexte que les études présentées au chapitre 4. En effet, même si une partie des fluctuations turbulentes est filtrée, la partie résolue des fluctuations permet une analyse de la TRI comme le suggère Coelho dans [4]. De plus les chapitres 5, 6 et 7 ont montré que le filtrage, tout comme le modèle de combustion (donc les fluctuations de sous-maille) avaient un impact faible sur le rayonnement. Aussi pour le modèle de combustion utilisé et les tailles de filtres étudiées, les fluctuations résolues par la LES sont suffisantes pour étudier la TRI

En détaillant le terme source radiatif moyen pour faire apparaître toutes les corrélations, on a (voir chapitre 4) :

$$\langle S_r(T, X_i) \rangle = 4\sigma\kappa_p(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle) \langle T \rangle^4 R_{\kappa_p} (R_{T^4} + R_{I_b}) - \int_0^\infty (\langle \kappa_\nu G_\nu \rangle + \langle \kappa'_\nu G'_\nu \rangle) d\nu \quad (9.2)$$

où  $R_{\kappa_p}$ ,  $R_{T^4}$  et  $R_{I_b}$  désignent les corrélations du terme d'émission, respectivement : l'autocorrélation du coefficient d'absorption, l'autocorrélation en température et la corrélation croisée température-absorption.  $\langle \kappa'_\nu G'_\nu \rangle$  désigne la corrélation du terme d'absorption.

La LES a été utilisée seulement récemment pour étudier le problème de la TRI, [135]. Dans ce travail les champs de LES moyens ont permis d'évaluer l'impact de la TRI sur 4 points sonde dans l'axe central d'une flamme swirlée. L'impact des fluctuations de sous-maille sur le rayonnement a été supposé négligeable sans étude préa-

lable. Ce paragraphe a pour objectif d'analyser qualitativement l'impact de la TRI dû aux fluctuations résolues sur la configuration étudiée.

Pour cela, la moyenne temporelle du terme source radiatif,  $\langle S_r(T, X_i) \rangle$  est comparée au terme source radiatif à partir des valeurs moyennes,  $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$  (Fig. 9.53). Qualitativement la prise en compte des fluctuations turbulentes, résolues en LES, rendent le champ de terme source radiatif plus diffus mais son niveau est localement diminué ou augmenté. Les Fig. 9.54 et 9.55 montrent que localement la turbulence peut diminuer le terme source radiatif de plus de 12% (axe central) ou l'augmenter significativement, de plus de 135% proche des parois sur l'axe  $y$  pour  $x = 9 \text{ cm}$ .

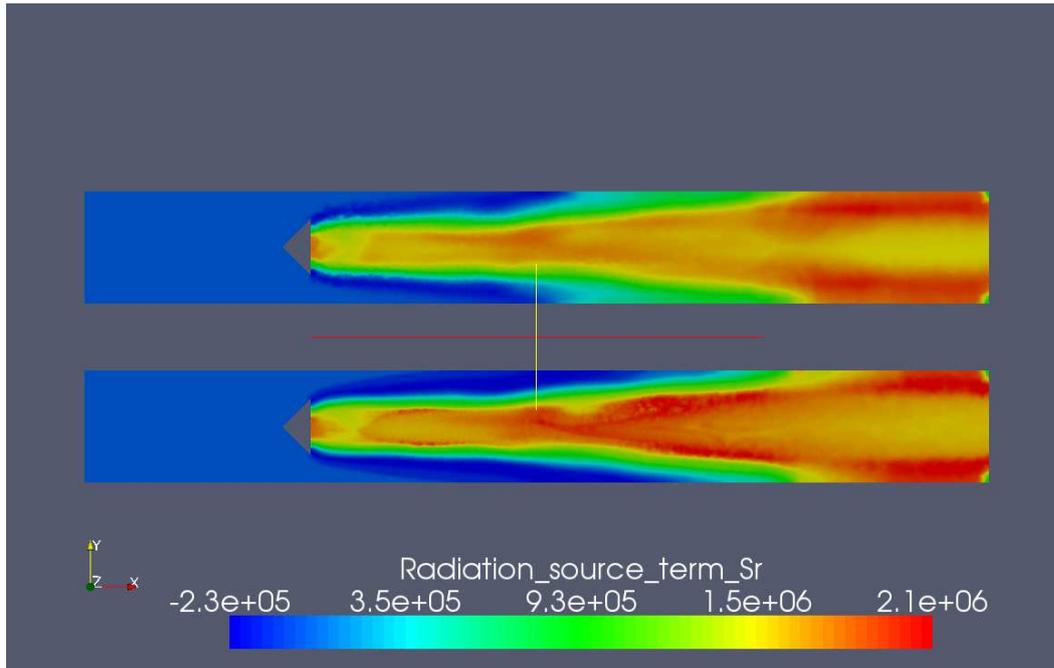


FIG. 9.53 – Comparaison de  $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ , en haut, et de  $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$ , en bas, suivant la coupe  $z = 0$ .

L'augmentation de l'émission est due aux fluctuations de températures. La Fig. 9.56 représente l'intensité des fluctuations de température,  $I_{rms}(T) = T_{rms} / \langle T \rangle$ . Il apparaît que de fortes fluctuations de température sont localisées dans les zones où le terme source est augmenté. Ceci suggère une contribution de l'autocorrélation en température,  $R_{T^4}$ .

La diminution du terme source radiatif dans la zone centrale peut être due soit à  $R_{Ib}$  soit à  $\langle \kappa'_v G'_v \rangle$  (voir chapitre 4 et 5). L'intensité des fluctuations montre que seules les fluctuations de CO sont localisées dans la zone où le terme source radiatif est diminué par la turbulence. Dans la corrélation  $R_{Ib}$ , seul le terme en  $\partial \kappa_p / \partial T$  peut être négatif mais il est multiplié par la variance de température (voir Eq. 5.1 et 5.2) qui est nulle dans la zone centrale. Ainsi  $R_{Ib}$  ne peut pas être mis en cause pour expliquer la diminution de  $S_r$  et il est plus probable qu'elle soit due à la corrélation entre luminance incidente et coefficient d'absorption,  $\langle \kappa'_v G'_v \rangle$ . Ceci suggère que, au regard des fluctuations temporelles, l'hypothèse des tourbillons optiquement fin (OTFA, voir chapitres 4 et 5) ne soit pas applicable pour une modélisation des corrélations de type RANS. Le coefficient moyen de Planck donné sur la Fig. 9.15 et la taille de la configuration  $L \sim 0,3 \text{ m}$  donnent une épaisseur optique maximale de l'ordre de 0,45, ce

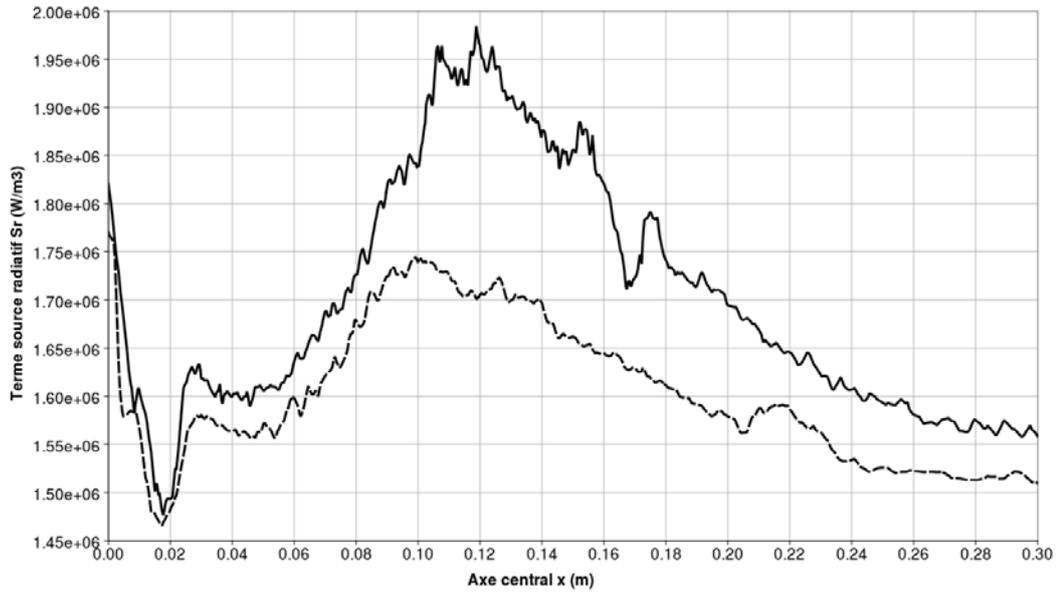


FIG. 9.54 – Comparaison de  $\langle S_r(T, X_i) \rangle$  (trait pointillé), et de  $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$  (trait continu) le long de l'axe  $x$  central.

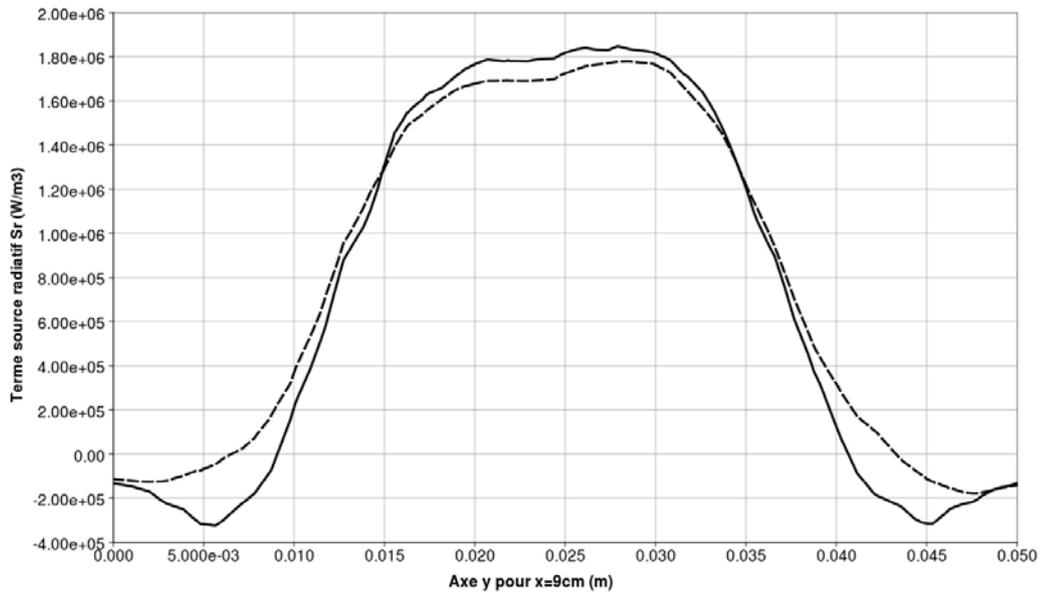


FIG. 9.55 – Comparaison de  $\langle S_r(T, X_i) \rangle$  (trait pointillé), et de  $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$  (trait continu) le long de l'axe  $y$  pour  $x = 9 \text{ cm}$ .

qui est supérieure aux épaisseurs optiques préconisées par Kabashnikov et Krebs (cf. paragraphe 4.2.2).

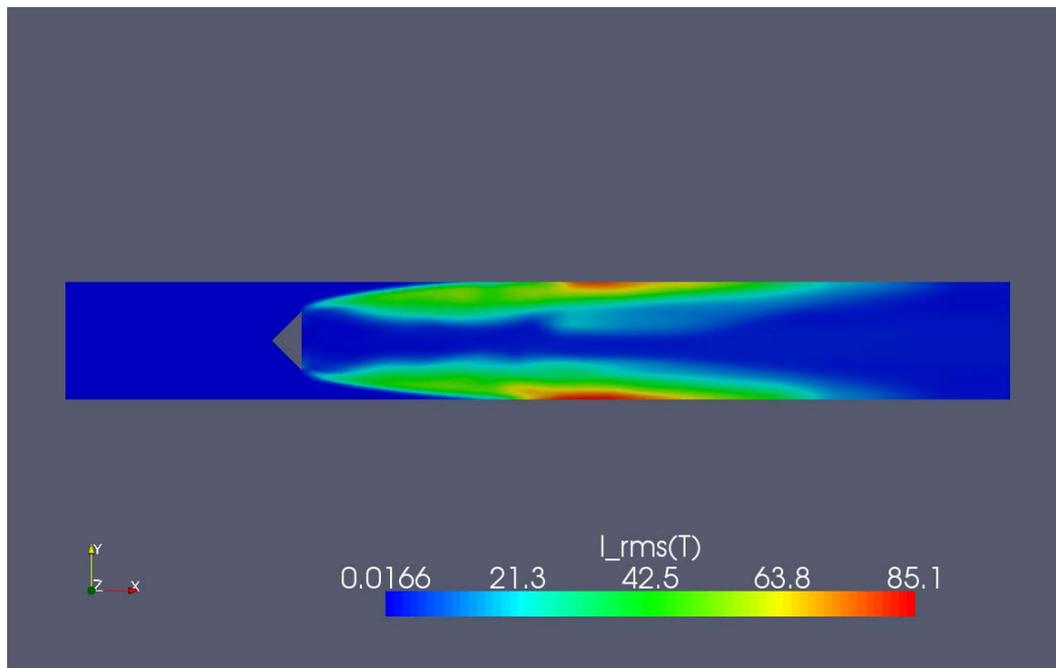


FIG. 9.56 – Intensité des fluctuations de température,  $I_{rms}(T) = T_{rms}/T$ .

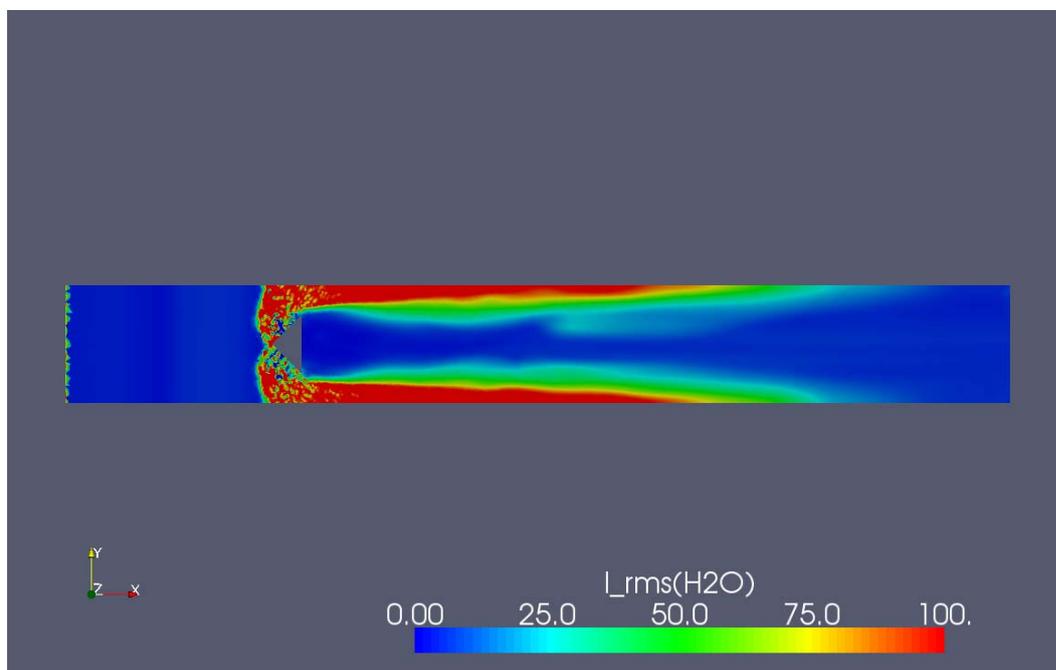


FIG. 9.57 – Intensité des fluctuations de fraction massique de  $H_2O$ ,  $I_{rms}(H_2O) = X_{H_2O,rms}/X_{H_2O}$ .

L'émission totale moyenne de la flamme est de 1280,76 W en tenant compte de la TRI ( $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ ) et de 1196,64 W sans la TRI ( $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$ ). Cela représente un écart de 6,54% ce qui est assez faible comparé à l'erreur majorée induite par les modèles utilisés pour le rayonnement (5,95%, cf. chapitre 8).

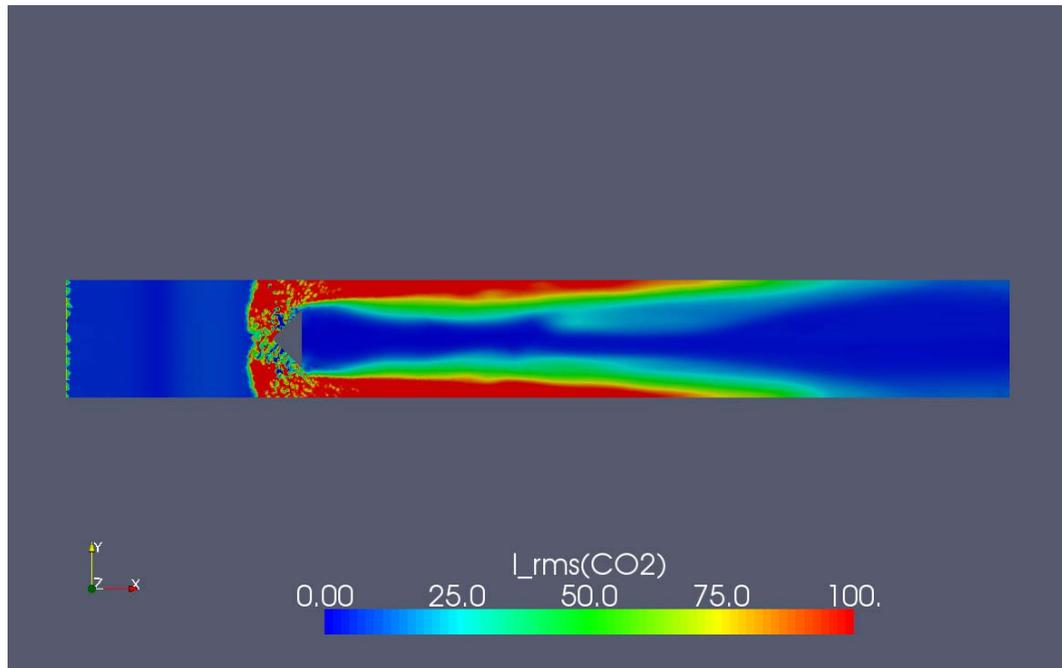


FIG. 9.58 – Intensité des fluctuations de fraction massique de  $CO_2$ ,  $I_{rms}(CO_2) = X_{CO_2,rms} / X_{CO_2}$ .

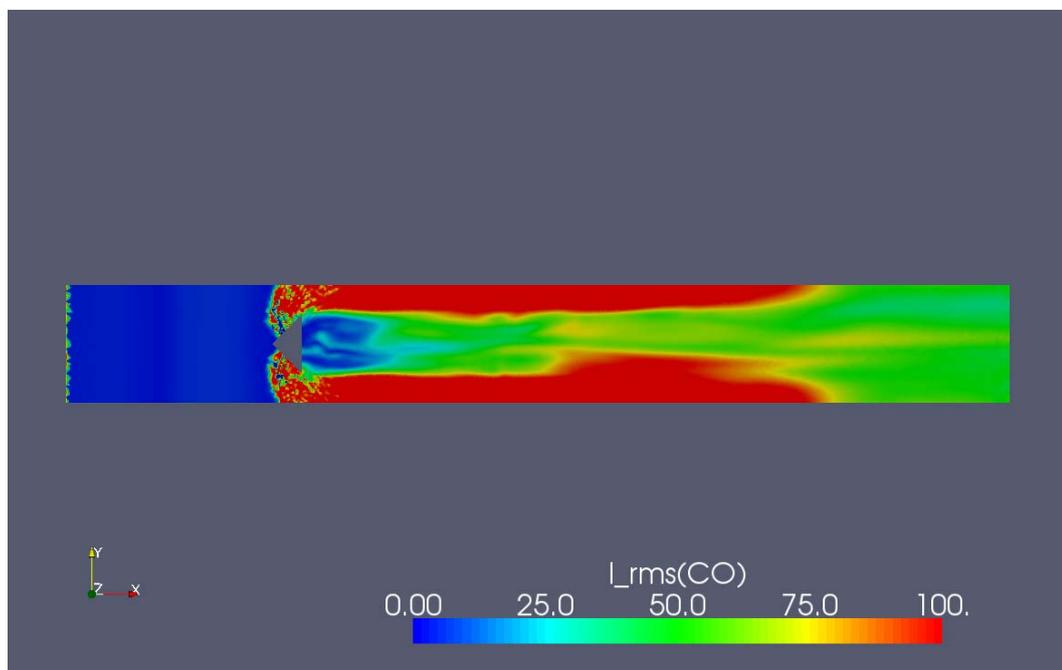


FIG. 9.59 – Intensité des fluctuations de fraction massique de  $CO$ ,  $I_{rms}(CO) = X_{CO,rms} / X_{CO}$ .

## 9.4 CONCLUSION

Un couplage instationnaire combustion turbulente-rayonnement en LES a été réalisé sur une flamme de laboratoire. Ce calcul montre la faisabilité et la fonctionnalité d'un tel couplage sur une configuration complexe. Le coût en temps de calcul de ce couplage est acceptable grâce à l'optimisation du solveur radiatif.

La comparaison avec les valeurs expérimentales montre un bon accord sur la valeur moyenne de la variable de progrès pour les cas couplé et non couplé. L'accord sur la variance de la variable de progrès est sensiblement meilleur pour le calcul avec rayonnement.

L'analyse des grandeurs moyennes confirme que le couplage entre la dynamique moyenne de l'écoulement et le rayonnement est faible et que la vitesse est peu modifiée par le rayonnement. L'influence sur la température est plus importante avec des différences de température maximale de l'ordre de 110 K. La chimie de la combustion en est modifiée, particulièrement pour la production de CO qui diminue de près de 20%. Ce résultat démontre la nécessité de prendre en compte le rayonnement pour prédire les émissions de polluants ( $\text{NO}_x$ , suies, ...).

L'utilisation de la LES est également un outil supplémentaire pour étudier l'interaction rayonnement-turbulence. Les fluctuations résolues par la LES permettent de reconstruire toutes les corrélations de la TRI dans le contexte RANS. Les hypothèses de type OTFA peuvent être validées pour une configuration spécifique à partir d'un couplage combustion turbulente-rayonnement en LES.

Enfin le couplage combustion-rayonnement permet d'envisager le calcul LES de la production de suies pour lesquelles le couplage avec le rayonnement est fort. Il reste cependant une limitation forte due à l'incertitude qui pèse sur les températures de parois. Il faut donc s'orienter vers un couplage à 3 codes pour tenir compte des transferts thermiques dans les parois et calculer correctement les températures de parois.



# CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

L'ensemble du travail de cette thèse a pour finalité la prise en compte du rayonnement dans les simulations aux grandes échelles (SGE) de brûleurs industriels. Cette problématique a soulevé des questions à la fois fondamentales et pratiques.

Sur le plan fondamental, l'impact de la modélisation SGE de la turbulence et de la combustion sur le rayonnement, théoriquement non nul, a été quantifié. En effet, l'opération de filtrage appliquée aux équations du fluide génère des fluctuations de sous-maille dont l'effet sur la partie filtrée est représenté par des modèles adaptés, dits "de sous-maille". Si de nombreuses études dans le cadre de calculs moyennés (type RANS) ont montré un impact significatif des fluctuations turbulentes sur le terme source radiatif, il est montré dans ce travail que les fluctuations de sous-maille en SGE n'ont qu'un impact limité sur le rayonnement.

De même, le modèle de combustion turbulente utilisé dans ce travail, le modèle de flamme épaissie, ne modifie pas significativement les flux radiatifs dans la flamme malgré une épaisseur optique théoriquement plus grande. Les profils de terme source radiatif sont épaissis comme la flamme mais les valeurs extrémales changent peu et la faible épaisseur optique ne modifie pas le bilan radiatif. Une étude paramétrique en fonction de l'épaisseur optique montre que ce résultat est valable jusqu'à des épaisseurs optiques importantes, de l'ordre de  $\kappa_P = 10 \text{ m}^{-1}$ .

Ainsi le calcul du terme source radiatif en SGE ne nécessite pas de modèle sous-maille et peut être couplé directement à l'écoulement turbulent réactif filtré.

Sur le plan pratique le couplage du rayonnement avec un calcul instationnaire LES posait un défi en terme de temps de calcul, le calcul d'un champ radiatif étant beaucoup plus coûteux que le calcul d'un pas de temps pour le fluide.

Pour réduire ce temps de calcul, une première étape a été d'implanter un nouveau modèle spectral global par tabulation. Ce modèle s'est avéré très précis pour les applications de combustion visées, tout en réduisant significativement le temps de calcul.

Conjointement à cet effort sur le temps de calcul spectral, une méthodologie optimale de couplage combustion-rayonnement a été élaborée. Tout d'abord, un critère de fréquence de couplage a permis de réduire le nombre de calculs radiatifs en ne mettant à jour le terme source radiatif que toutes les  $N_{it} \approx 100$  itérations du solveur fluide. Ensuite, une réduction de maillage pour le calcul radiatif a été appliquée, partant du constat que de nombreuses zones du domaine sont quasi-homogènes en température. Une étude sur 3 niveaux de résolution a permis de démontrer la pertinence d'une telle approche. L'utilisation d'une résolution plus grossière que pour le calcul fluide sans altération de la précision confirme *a posteriori* que l'impact du filtrage, à l'échelle de la maille LES, est faible.

En combinant le critère de fréquence de couplage, le modèle global tabulé et la

réduction de maillage, le temps de calcul du rayonnement a été réduit d'un facteur  $\sim 350$ . Ce temps de calcul, moins important que le temps de calcul de la combustion turbulente, rend le couplage instationnaire accessible.

Un calcul couplé a donc été mis en oeuvre sur une configuration de flamme turbulente de laboratoire. Cette configuration est un premier pas vers une configuration complexe et démontre la faisabilité d'un calcul couplé et précis sur une flamme réelle.

L'influence directe du rayonnement sur la structure de flamme est modérée, mais suffisamment importante pour modifier certains aspects instationnaires et la cinétique chimique des polluants. Un point faible de cette simulation est le comportement thermique des parois, traitées comme des parois isothermes froides. Ce point constitue une des premières améliorations à apporter et sera traité dans un avenir proche, notamment grâce aux travaux de J. Amaya [26, 76].

Notre travail de thèse a donc abouti au développement et à la validation d'un outil de calcul couplé combustion turbulente-rayonnement, respectant les contraintes du calcul haute performance donc permettant des calculs précis en configuration complexe dans des temps de restitution acceptables. Un tel outil va s'avérer précieux pour les calculs de thermique, de production de suies et de polluants, d'allumage et d'extinction ou encore d'interaction avec les parois.

En plus de ces nouveaux champs d'investigation qui ouvrent de larges perspectives, un certain nombre de perspectives d'amélioration peuvent être envisagées à la suite de ce travail.

En plus des modèles globaux et des optimisations utilisées dans le solveur radiatif pour réduire le temps de calcul, un parallélisme par sous-domaines doit être développé pour le rayonnement. Cela permettra d'envisager sereinement de résoudre des géométries industrielles avec des maillages de plusieurs dizaines de millions de mailles. Une piste pour développer cet aspect a été discutée, qui consiste à appliquer la méthode de résolution sur différents sous-domaines de façon itérative pour converger vers la solution finale en communiquant la luminance aux bornes des sous-domaines à chaque itération. Cette solution ne sera intéressante que pour un nombre de sous-domaines suffisant grand et supérieur au nombre d'itérations nécessaires pour converger vers la solution finale. Cette solution pourrait aussi permettre d'éviter la réduction de maillage entre le rayonnement et la combustion.

D'autre part, la méthode employée dans ce travail pour résoudre le rayonnement est basée sur les DOM. Cependant, les DOM restent une méthode approchée pour laquelle il est indispensable de s'assurer de la convergence en quadrature angulaire. Par ailleurs les DOM resteront toujours limitées pour prendre en compte le phénomène de diffusion qui peut être importante dans des écoulements multiphasiques avec présence de gouttes ou de suies de grande taille. Pour ces raisons il est important de développer dès aujourd'hui un solveur radiatif basé sur la méthode de Monte Carlo. Dans un premier temps des solutions Monte Carlo permettront une évaluation de l'erreur de la solution par rapport à un calcul DOM en post-traitement. A terme, les calculs Monte Carlo permettront un gain en précision avec une prise en compte de la diffusion et éventuellement des calculs de sensibilité. Cependant les coûts de calculs très importants rendent difficile d'envisager un couplage instationnaire avec un calcul Monte Carlo dans un avenir proche.

Enfin, et comme précisé plus haut, le calcul couplé a été réalisé en supposant des

parois froides. Cette hypothèse forte a pour conséquence d'augmenter les pertes radiatives. La seule solution pour lever cette hypothèse est de calculer la température de la paroi en résolvant les transferts thermiques dans les parois. Il faut pour cela réaliser un couplage à 3 codes : combustion/rayonnement/thermique.



# NOTATIONS

|          |   |
|----------|---|
| BSP      | Binary Space Partitionning                |
| CKFG     | Correlated-k with Fictitious Gases        |
| DNS      | Direct Numerical Simulation               |
| DMFS     | Diamond Mean Flux Scheme                  |
| DOM      | Discrete Ordinate Method                  |
| FS-SNBcK | Full Spectrum SNBcK                       |
| FVM      | Finite Volume Method                      |
| LES      | Large Eddy Simulation                     |
| LBL      | Line-by-line                              |
| MCM      | Monte-Carlo Method                        |
| NEF      | Net Exchange Formulation                  |
| OTFA     | Optically Thin Fluctuations Approximation |
| PDF      | Probability Density Function              |
| PCS      | Parallel Coupling Strategy                |
| PLIF     | Planar LASER Induced Fluorescence         |
| RANS     | Reynolds Averaged Numerical Simulation    |
| RTE      | Radiative Transfer Equation               |
| SCS      | Sequential Coupling Strategy              |
| SLW      | Spectral Line WSGG                        |
| SNB      | Statistical Narrow Band                   |
| SNBcK    | SNB with cK approximation                 |
| TRI      | Turbulence Radiation Interaction          |
| WSGG     | Weighted Sum of Gray Gases                |

# LISTE DES FIGURES

|      |  |    |
|------|--|----|
| 1.1  | Flamme prémélangée (a) et flamme de diffusion (b), d'après [8] . . . . .   | 14 |
| 1.2  | Systèmes pratiques classés selon le type d'injection (prémélangée ou non) et la nature laminaire ou turbulente de l'écoulement, d'après [8] . .  | 14 |
| 1.3  | Modélisation d'une flamme 1) DNS, 2) LES, 3) RANS, <i>Remerciements Laurent Gicquel</i> . . . . .  | 21 |
| 1.4  | Évolution d'une grandeur turbulente en DNS,LES et RANS, d'après [8].   | 21 |
| 1.5  | Spectre d'énergie pour une THI avec les approches DNS, LES et RANS, d'après [8]. . . . .   | 21 |
| 1.6  | Exemple de profils de température pour une flamme laminaire de méthane sans épaissement et pour un épaissement de $F = 20$ . . . . .   | 27 |
| 1.7  | Influence de l'épaissement dans l'interaction combustion-turbulence ( $F = 1$ et $F = 5$ ). Le taux de réaction est représenté en noir le long du front de flamme, superposé au champ de vitesse. La turbulence augmente le plissement de la flamme et donc la vitesse de réaction. L'épaissement réduit le plissement et ainsi la vitesse de réaction, ce qui est compensé par la fonction d'efficacité. D'après [7]. . . . .         | 27 |
| 2.1  | La luminance. . . . .  | 34 |
| 2.2  | Différentes contributions du bilan radiatif local. . . . .   | 38 |
| 2.3  | Absorption d'un flux de photons incidents. . . . .   | 38 |
| 2.4  | Formulation intégrale de l'équation de transfert radiatif pour une couche de gaz comprise entre $x_0$ et $x$ . . . . .   | 42 |
| 2.5  | Calcul du terme source pour un volume $V_i$ . . . . .  | 43 |
| 2.6  | Diagramme des processus radiatifs et collisionnels couplant les niveaux haut (u) et bas (l) d'une transition. De gauche à droite : émission spontanée, absorption, émission stimulée, excitation collisionnelle et désexcitation collisionnelle. L'absorption et l'émission stimulée ont la particularité de dépendre du champ de rayonnement. Les coefficients $A_{ij}$ et $C_{ij}$ désignent les probabilités de transition. . . . . | 45 |
| 2.7  | Quadrature angulaire $S_4$ : 3 directions $\times$ 8 quadrants = 24 , d'après [2].   | 57 |
| 2.8  | Transformation géométrique liée au terme $D_{ij}$ , d'après [2]. . . . .   | 59 |
| 2.9  | Principe de réordonnement, d'après [2]. . . . .  | 60 |
| 2.10 | Gauche : Parallélisation en directions et en fréquences ; dans cet exemple 10 processeurs (notés de I à X) calculent chacun la moitié du spectre pour 5 directions. Droite : Exemple de parallélisation par domaine sur six processeurs, le terme d'émission est calculé en utilisant tous les processeurs disponibles, enfin une parallélisation sur les 5 directions de l'exemple se fait sur 5 processeurs, d'après [26]. . . . .   | 61 |
| 2.11 | Effet de rayon sur le rayonnement incident $G_v(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u})d\Omega \simeq \sum_{k=1}^{N_{dir}} \omega_k^a L_v(\mathbf{x}, \mathbf{u}_k)$ . . . . .   | 62 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 3.1  | Comparaison des temps de calcul (échelle log) entre le modèle WSGG, FS-SNBcK et SNBcK dans une configuration homogène. . . . .  | 78  |
| 3.2  | Comparaison des temps de calcul (échelle log) entre le modèle WSGG, FS-SNBcK et SNBcK dans une configuration inhomogène. . . . .  | 78  |
| 3.3  | Terme source radiatif dans le cas 2 (cylindre inhomogène) pour les modèles FS-SNBcK et FS-SNBcK Tabulé. . . . .   | 79  |
| 3.4  | Comparaison des temps de calcul (échelle log) entre le modèle WSGG, FS-SNBcK, SNBcK et FS-SNBcK Tabulé dans une configuration inhomogène. . . . .   | 80  |
| 4.1  | Autocorrélation en température calculée par des densité de probabilité en fonction de l'intensité des fluctuations. La zone colorée correspond à la zone de variation de l'autocorrélation en température pour les différentes pdf étudiées [82]. . . . . | 93  |
| 4.2  | Mesures et simulation de la luminance monochromatique dans la flamme Sandia D [98, 97]. . . . .   | 95  |
| 4.3  | Luminances monochromatiques dans une flamme D à $x/d=45$ calculé à partir des propriétés moyennes (MP) et à partir des simulation stochastiques dans le temps et l'espace (TASS). Les symboles représentent les données expérimentales. [96]. . . . .     | 95  |
| 4.4  | Luminance monochromatique moyenne et fluctuante pour une longueur d'onde $\lambda = 4,27\mu m$ le long de différentes cordes traversant la flamme Sandia D [97]. . . . .  | 95  |
| 4.5  | Lumiance monochromatique pour la flamme Sandia D à $x/d=45$ [99]. . . . .   | 96  |
| 4.6  | Luminance monochromatique pour la flamme Sandia D à $x/d=45$ , 1 :sans TRI, 2 :TRI partielle, 3 :TRI complète, 4 :modèle stochastique [99]. . . . .   | 97  |
| 4.7  | Profils de température prédits pour la flamme Sandia D (symboles : mesures; ligne A : flamme adiabatique; ligne B : milieu optiquement fin, $\kappa_P$ , OTFA; ligne C : DOM, $\kappa_P$ , TRI complète; ligne D : DOM, SLW, TRI complète [103]. . . . .  | 99  |
| 4.8  | Contours de température (K) pour une flamme similaire à la flamme D avec un diamètre quatre fois supérieur : 1 sans rayonnement, 2 avec rayonnement mais sans TRI, 3 avec rayonnement et TRI. [107]. . . . .  | 100 |
| 4.9  | Contours prédits de la puissance radiative émise par une flamme lumineuse en jet d'air-éthylène [60] : (a) sans TRI et (b) avec TRI. . . . .  | 101 |
| 4.10 | DNS pour une flamme de diffusion turbulente et statistiquement unidimensionnelle [111]. . . . .   | 102 |
| 4.11 | Température moyenne normalisée le long de l'axe de la flamme [111]. . . . .   | 103 |
| 4.12 | Autocorrélation en température pour différentes épaisseurs optiques [111].  | 103 |
| 4.13 | Corrélation croisée température-coefficient d'absorption ( $R_{Ib}$ ) et corrélation du rayonnement incident avec le coefficient d'absorption pour différentes épaisseurs optiques [111]. . . . .   | 103 |
| 5.1  | Densité de probabilité de la température. . . . .   | 121 |
| 5.2  | Densité de probabilité des concentrations. . . . .  | 121 |
| 5.3  | Champ instantané de température. . . . .  | 121 |
| 5.4  | Champ instantané de $H_2O$ . . . . .  | 121 |
| 5.5  | Evolution du coefficient d'absorption pour un mélange $Y_{CO_2} = 0.2589$ et $Y_{H_2O} = 0.3164$ avec un modèle somme de gaz gris et un modèle SNB-cK. . . . .  | 122 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 5.6  | Densité spectrale de puissance de la température le long de l'axe central.  | 123 |
| 5.7  | Erreur relative sur tout le domaine en fonction de la taille du filtre pour l'approche sans TRI. . . . .  | 124 |
| 6.1  | Front de flamme turbulent, en régime de flammelettes la structure locale du front de flamme (encadré) conserve les propriétés de la flamme laminaire, d'après [7]. . . . .                | 133 |
| 6.2  | Configuration du calcul mono-dimensionnel pour le rayonnement et la combustion. . . . .   | 134 |
| 6.3  | Profils de température pour différents épaissements F le long de l'axe.   | 136 |
| 6.4  | Profils de H <sub>2</sub> O pour différents épaissement F le long de l'axe. . . . .   | 137 |
| 6.5  | Profils de CO <sub>2</sub> pour différents épaissement F le long de l'axe. . . . .  | 137 |
| 6.6  | Profils de CO pour différents épaissement F le long de l'axe . . . . .  | 138 |
| 6.7  | Terme source radiatif $S_r$ le long de l'axe central pour différentes valeurs d'épaissement $F = 1$ (cas non épaissi), $F = 5$ , $F = 10$ , $F = 20$ et $F = 30$ .                        | 139 |
| 6.8  | Terme source radiatif $S_r$ représenté en fonction de la variable de progrès $c = \frac{T-T_0}{T_1-T_0}$ pour différents épaissements (scatter plot). . . . .                             | 139 |
| 6.9  | Composante x du flux radiatif, $q_{r,x}$ , le long de l'axe central pour différentes valeurs d'épaissement $F = 1$ (cas non épaissi), $F = 5$ , $F = 10$ , $F = 20$ et $F = 30$ . . . . . | 140 |
| 6.10 | Composante x du flux radiatif, $q_{r,x}$ représenté en fonction de la variable de progrès $c = \frac{T-T_0}{T_1-T_0}$ pour différents épaissements (scatter plot). . . . .                | 141 |
| 6.11 | Profil de température suivant les couches de gaz pour $F=1$ . . . . .   | 142 |
| 6.12 | Matrice des puissances nettes échangées sur le profil $F=1$ . . . . .   | 142 |
| 6.13 | Profil de température suivant les couches de gaz pour $F=30$ . . . . .  | 143 |
| 6.14 | Matrice des puissances nettes échangées sur le profil $F=30$ . . . . .  | 143 |
| 6.15 | Coefficient d'absorption sans suies. . . . .  | 145 |
| 6.16 | Coefficient d'absorption avec des suies, $f_{v,max} = 10^{-6}$ . . . . .  | 145 |
| 6.17 | Coefficient d'absorption avec des suies, $f_{v,max} = 10^{-5}$ . . . . .  | 145 |
| 6.18 | Coefficient d'absorption avec des suies, $f_{v,max} = 10^{-4}$ . . . . .  | 145 |
| 6.19 | Terme source radiatif $S_r$ représenté en fonction de la variable de progrès pour $f_{v,max} = 10^{-6}$ . . . . .   | 146 |
| 6.20 | Terme source radiatif $S_r$ représenté en fonction de la variable de progrès pour $f_{v,max} = 10^{-5}$ . . . . .   | 146 |
| 6.21 | Terme source radiatif $S_r$ représenté en fonction de la variable de progrès pour $f_{v,max} = 10^{-4}$ . . . . .   | 147 |
| 6.22 | Composante $q_{r,x}$ du flux radiatif représentée en fonction de la variable de progrès pour $f_{v,max} = 10^{-6}$ . . . . .  | 147 |
| 6.23 | Composante $q_{r,x}$ du flux radiatif représentée en fonction de la variable de progrès pour $f_{v,max} = 10^{-5}$ . . . . .  | 148 |
| 6.24 | Composante $q_{r,x}$ du flux radiatif représentée en fonction de la variable de progrès pour $f_{v,max} = 10^{-4}$ . . . . .  | 148 |
| 7.1  | Configuration de l'interaction flamme-vortex. . . . .   | 152 |
| 7.2  | Champ de température pour la flamme non épaissie. . . . .   | 153 |
| 7.3  | Champ de température pour la flamme épaissie $F = 5$ . . . . .  | 154 |
| 7.4  | Champ de température pour la flamme épaissie $F = 15$ . . . . .   | 154 |
| 7.5  | Champ du terme source radiatif $S_r$ pour la flamme non épaissie. . . . .   | 155 |
| 7.6  | Champ du terme source radiatif $S_r$ pour la flamme épaissie $F = 5$ . . . . .  | 155 |
| 7.7  | Champ du terme source radiatif $S_r$ pour la flamme épaissie $F = 15$ . . . . .   | 156 |

|      |  |     |
|------|--|-----|
| 8.1  | Photo du dispositif expérimental de l'EM2C (éteint) [125, 126, 127, 123].  | 166 |
| 8.2  | Photo du dispositif expérimental de l'EM2C (allumé) [125, 126, 127, 123].  | 166 |
| 8.3  | Configuration pour le calcul couplé combustion rayonnement en LES. Une flamme d'air/propane prémélangée est stabilisée derrière un accroche flamme triangulaire[125]. . . . .  | 167 |
| 8.4  | Maillage utilisé dans AVBP avec 4,7 millions de cellules tétraédriques. .  | 168 |
| 8.5  | Détail du maillage près de l'accroche flamme. . . . .  | 168 |
| 8.6  | L'origine est au centre du dièdre, plusieurs axes sont définis pour tracer des profils : l'axe $x$ central, l'axe transverse $y$ pour $x = 9\text{ cm}$ et un axe $x$ à la paroi pour $y = 2,5\text{ cm}$ . . . . .  | 169 |
| 8.7  | (a) Stratégie de couplage séquentielle (SCS) et (b) Stratégie de couplage parallèle (PCS). . . . .   | 170 |
| 8.8  | Validation du critère de couplage en comparant $Sr(T(t_1), X_i(t_1))$ , $Sr(T(t_1 + 100it), X_i(t_1 + 100it))$ et $Sr(\langle T \rangle_{100it}, \langle X_i \rangle_{100it})$ . . . . .   | 173 |
| 8.9  | Coupes du champ de température sur une solution instantanée suivant $y = 0$ et $z = 0$ . . . . .   | 173 |
| 8.10 | Coupes du champ de terme source radiatif $S_r$ ( $W/m^3$ ) sur une solution instantanée suivant $y = 0$ et $z = 0$ . . . . .   | 174 |
| 8.11 | Impact du modèle spectral sur $S_r$ avec les modèles : SNBcK, FS-SNBcK pour $N_q = 7, 10, 15$ et WSGG. . . . .   | 175 |
| 8.12 | Impact de la tabulation du modèle FS-SNBcK avec $N_q = 15$ . . . . .   | 176 |
| 8.13 | Impact de la quadrature angulaire sur la solution radiative, solution $LC_{11}$ avec 96 directions, solution $S_4$ avec 24 directions. . . . .   | 177 |
| 8.14 | Champ moyen de température sur les coupes $y = 0$ et $z = 0$ . . . . .   | 178 |
| 8.15 | Champs moyen de fluctuations de température $T_{RMS}$ sur les coupes $y = 0$ et $z = 0$ . . . . .  | 179 |
| 8.16 | Maillage 1 : 2 500 560 cellules, les mailles dans la zone de fluctuation de température ont la même taille que sur le maillage original (1 mm de côté). . . . .  | 180 |
| 8.17 | Maillage 2 : 621 167 cellules, les mailles dans la zone de fluctuation de température ont une taille deux fois plus grande que sur le maillage original (2 mm de côté). . . . .  | 180 |
| 8.18 | Influence des maillages 0, 1 et 2 sur le terme source radiatif le long de l'axe $x$ central avec le modèle FS-SNBcK, $N_q = 15$ , $S_4$ sans réflexion. . .  | 181 |
| 8.19 | Influence des maillages 0, 1 et 2 sur le terme source radiatif le long de l'axe $y - L_y/2$ pour $x = 9\text{ cm}$ avec le modèle FS-SNBcK, $N_q = 15$ , $S_4$ sans réflexion. . . . .   | 182 |
| 8.20 | Différentes échelles spatiales associées aux maillages de la DNS $\Delta x_{DNS}$ , de la LES $\Delta x_{LES}$ et du rayonnement $\Delta x_{Rad}$ . Les fluctuations de sous-maille de la LES correspondent aux échelles non résolues entre $\Delta x_{DNS}$ et $\Delta x_{LES}$ . . . . .   | 182 |
| 8.21 | Évolution de l'émissivité des parois de quartz en fonction de la longueur d'onde. Estimée à partir des de [123](basées sur les données constructeur) dans l'intervalle $[0,5; 4,5\ \mu m]$ , de [132] pour $[4,5; 15\ \mu m]$ . Au delà, $[15; 68\ \mu m]$ , elle est supposée égale à 1. <i>Remerciements à Y. Lemaoult (CRO-MeP, EMAC)</i> . . . . . | 184 |
| 8.22 | Influence de la réflexion aux parois sur $S_r$ le long de l'axe central pour le modèle spectral SNBcK sur le maillage 2 en utilisant une quadrature $S_4$ . . . . .  | 185 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 8.23 | Influence de la réflexion sur le calcul des flux aux parois en $y = 2,5 \text{ cm}$ et $z = 0$ (paroi de quartz), sans réflexion (trait continu) et avec réflexion (trait pointillé). . . . .   | 185 |
| 8.24 | Ratio du temps de calcul PRISSMA/AVBP pour l'ensemble des paramètres étudiés. Les temps de calcul plus longs que la combustion ne sont pas acceptables, ratio $> 1$ . . . . .   | 189 |
| 9.1  | Canevas de l'application PALM pour coupler le solveur fluide AVBP au solveur radiatif PRISSMA en échangeant les données <i>via</i> la branche « Bridge ». . . . .   | 193 |
| 9.2  | Influence sur le terme source radiatif $S_r$ de la communication des données entre les deux solveurs pour des maillages disjoints sur la coupe $z = 0$ . En haut $S_r$ extrait de PRISSMA, au milieu $S_r$ extrait de AVBP, en bas $S_r$ dans AVBP après filtrage à l'échelle du maillage LES. . . . .  | 195 |
| 9.3  | Influence sur le terme source radiatif $S_r$ de la communication des données entre les deux solveurs pour des maillages disjoints le long de l'axe central ( $0,01 < x < 0,3, y = 0$ et $z = 0$ ). . . . .  | 195 |
| 9.4  | Mesures faites sur des axes transverses $y$ pour $x = 7 \text{ cm}$ , $x = 9 \text{ cm}$ et $x = 11 \text{ cm}$ . . . . .   | 197 |
| 9.5  | Profils de la variable de progrès le long de l'axe $y$ pour $x = 7 \text{ cm}$ ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé. . . . .   | 199 |
| 9.6  | Profils de la variable de progrès le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé. . . . .   | 199 |
| 9.7  | Profils de la variable de progrès le long de l'axe $y$ pour $x = 11 \text{ cm}$ ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé. . . . .  | 199 |
| 9.8  | Profils de variance de la variable de progrès le long de l'axe $y$ pour $x = 7 \text{ cm}$ ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé. . . . .   | 200 |
| 9.9  | Profils de variance de la variable de progrès le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé. . . . .   | 200 |
| 9.10 | Profils de variance de la variable de progrès le long de l'axe $y$ pour $x = 11 \text{ cm}$ ; pointillés longs : données expérimentales, trait continu : calcul non couplé, pointillés courts : calcul couplé. . . . .  | 200 |
| 9.11 | Terme sources en $W/m^3$ : dégagement de chaleur (trait continu) et du terme source radiatif (trait pointillé) sur l'axe $x = 0,11 \text{ m}$ . La valeur absolue du terme source radiatif a été représentée pour utiliser une échelle logarithmique en ordonnée. Le terme source est négatif au milieu du profil (refroidissement des gaz chauds). . . . . | 202 |
| 9.12 | Champ du terme source radiatif $S_r$ pour le calcul couplé. . . . .   | 202 |
| 9.13 | Champ du taux de dégagement de chaleur sur le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 203 |
| 9.14 | Profils de taux de dégagement de chaleur le long de l'axe $y = 2 \text{ cm}$ , $z = 0$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .   | 203 |
| 9.15 | Coefficient moyen de Planck calculé à partir des valeurs moyennes de température et de concentration du calcul couplé dans le plan $z = 0$ . . .  | 204 |

|      |  |     |
|------|--|-----|
| 9.16 | Champ de température moyenne dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 205 |
| 9.17 | Champ de variance de température dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 205 |
| 9.18 | Profils de la température moyenne le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                     | 206 |
| 9.19 | Profils de variance de température le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                    | 206 |
| 9.20 | Profils de la température moyenne le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                     | 207 |
| 9.21 | Profils de variance de température le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                    | 207 |
| 9.22 | Champ de la norme du vecteur vitesse moyenne dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 209 |
| 9.23 | Champ de variance de la norme du vecteur vitesse dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 209 |
| 9.24 | Profils de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .             | 210 |
| 9.25 | Profils de variance de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . . | 210 |
| 9.26 | Profils de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .             | 211 |
| 9.27 | Profils de variance de la norme moyenne de la vitesse le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . . | 211 |
| 9.28 | Champ de température instantanée dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 212 |
| 9.29 | Positions des points sonde dans la configuration pour mesures les densités spectrale de puissance en vitesse $u$ . . . . .   | 213 |
| 9.30 | Densité spectrale de puissance de la vitesse $u$ en $x = 1 \text{ cm}$ , $y = 1,5 \text{ cm}$ , $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 213 |
| 9.31 | Densité spectrale de puissance de la vitesse $u$ en $x = 1,5 \text{ cm}$ , $y = 1,5 \text{ cm}$ , $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 214 |
| 9.32 | Densité spectrale de puissance de la vitesse $u$ en $x = 15 \text{ cm}$ , $y = -2,5 \text{ cm}$ , $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 214 |
| 9.33 | Densité spectrale de puissance de la vitesse $u$ en $x = 10 \text{ cm}$ , $y = -1,5 \text{ cm}$ , $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 215 |
| 9.34 | Champ de la fraction massique de $\text{H}_2\text{O}$ moyenne dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .  | 217 |
| 9.35 | Champ de variance de la fraction massique de $\text{H}_2\text{O}$ dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .  | 217 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 9.36 | Profils de fraction massique de H <sub>2</sub> O moyenne le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . . | 218 |
| 9.37 | Profils de variance de H <sub>2</sub> O le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                  | 218 |
| 9.38 | Profils de fraction massique de H <sub>2</sub> O moyenne le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . . | 219 |
| 9.39 | Profils de variance de H <sub>2</sub> O le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                  | 219 |
| 9.40 | Champ de la fraction massique de CO <sub>2</sub> moyenne dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .  | 220 |
| 9.41 | Champ de variance de la fraction massique de CO <sub>2</sub> dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .  | 220 |
| 9.42 | Profils de fraction massique de CO <sub>2</sub> moyenne le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .  | 221 |
| 9.43 | Profils de variance de CO <sub>2</sub> le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                   | 221 |
| 9.44 | Profils de fraction massique de CO <sub>2</sub> moyenne le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .  | 222 |
| 9.45 | Profils de variance de CO <sub>2</sub> le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                   | 222 |
| 9.46 | Champ de la fraction massique de CO moyenne dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 223 |
| 9.47 | Champ de variance de la fraction massique de CO dans le plan $z = 0$ pour les simulations avec et sans rayonnement. . . . .   | 223 |
| 9.48 | Profils de fraction massique de CO moyenne le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .               | 224 |
| 9.49 | Profils de variance de CO le long de l'axe $x$ pour $y = 0 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                                | 224 |
| 9.50 | Profils de fraction massique de CO moyenne le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .               | 225 |
| 9.51 | Profils de variance de CO le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ , $z = 0 \text{ cm}$ pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .                                | 225 |
| 9.52 | Taux de réaction nets pour les 2 réactions chimiques considérées pour les simulations avec (trait pointillé) et sans rayonnement (trait continu). . . . .   | 226 |
| 9.53 | Comparaison de $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ , en haut, et de $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$ , en bas, suivant la coupe $z = 0$ . . . . .  | 227 |
| 9.54 | Comparaison de $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ (trait pointillé), et de $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$ (trait continu) le long de l'axe $x$ central. . . . .   | 228 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 9.55 | Comparaison de $\langle S_r(T, X_i) \rangle$ (trait pointillé), et de $S_r(\langle T \rangle, \langle X_i \rangle)$ (trait continu) le long de l'axe $y$ pour $x = 9 \text{ cm}$ . . . . .  | 228 |
| 9.56 | Intensité des fluctuations de température, $I_{rms}(T) = T_{rms}/T$ . . . . .   | 229 |
| 9.57 | Intensité des fluctuations de fraction massique de $\text{H}_2\text{O}$ , $I_{rms}(\text{H}_2\text{O}) = X_{\text{H}_2\text{O},rms}/X_{\text{H}_2\text{O}}$ . . . . .   | 229 |
| 9.58 | Intensité des fluctuations de fraction massique de $\text{CO}_2$ , $I_{rms}(\text{CO}_2) = X_{\text{CO}_2,rms}/X_{\text{CO}_2}$ . . . . .   | 230 |
| 9.59 | Intensité des fluctuations de fraction massique de $\text{CO}$ , $I_{rms}(\text{CO}) = X_{\text{CO},rms}/X_{\text{CO}}$ . . . . .   | 230 |
| A.1  | Variation de $\kappa_5$ avec la température avec un pas $\Delta T = 1\text{K}$ pour : un mélange de 20% de $\text{H}_2\text{O}$ , 10% de $\text{CO}_2$ et 5% de $\text{CO}$ , une composition mono espèce de 10% de $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{CO}_2$ puis $\text{CO}$ . . . . . | 261 |
| A.2  | Variation de $\kappa_5$ avec la fraction molaire de $\text{H}_2\text{O}$ pour $T = 500, 1500$ et $2500\text{K}$ . . . . .   | 261 |
| A.3  | Variation de $\kappa_5$ avec la fraction molaire de $\text{CO}_2$ pour $T = 500, 1500$ et $2500\text{K}$ . . . . .  | 262 |
| A.4  | Variation de $\kappa_5$ avec la fraction molaire de $\text{CO}$ pour $T = 500, 1500$ et $2500\text{K}$ . . . . .  | 262 |
| A.5  | Dépendance de $\kappa_5$ (échelle log) en fonction de la température et la fraction molaire de $\text{H}_2\text{O}$ . . . . .   | 263 |
| A.6  | Dépendance de $\kappa_5$ (échelle log) en fonction de la température et la fraction molaire de $\text{CO}_2$ . . . . .  | 264 |
| A.7  | Dépendance de $\kappa_5$ (échelle log) en fonction de la température et la fraction molaire de $\text{CO}$ . . . . .  | 264 |
| A.8  | Dépendance de $\kappa_5$ aux fractions molaires de $\text{H}_2$ et $\text{CO}_2$ . . . . .  | 265 |
| A.9  | Dépendance de $\kappa_5$ aux fractions molaires de $\text{H}_2$ et $\text{CO}$ . . . . .  | 266 |
| A.10 | Pas de température minimum pour une erreur de 1% sur $\kappa_5$ pour le mélange 20% $\text{H}_2\text{O}$ , 10% $\text{CO}_2$ , 5% $\text{CO}$ avec un critère d'arrêt à $\Delta T = 1\text{K}$ . . . . .  | 267 |
| A.11 | Pas de concentration minimum pour chaque espèce à une température de 500K. . . . .  | 267 |
| A.12 | Pas de concentration minimum pour chaque espèce à une température de 1500K. . . . .   | 268 |
| A.13 | Pas de concentration minimum pour chaque espèce à une température de 2500K. . . . .   | 268 |

# Liste des tableaux

|     |   |     |
|-----|---|-----|
| 5.1 | Approches de TRI : sans, partielle, complète dans le contexte RANS sur la configuration étudiée. . . . .  | 120 |
| 6.1 | Paramètres pour le modèle chimique de combustion du méthane à deux étapes. . . . .  | 135 |
| 6.2 | Erreurs relatives maximales sur $S_r$ et $q_{r,x}$ pour $F = 30$ par rapport au cas non épaissi en fonction de la concentration de suies. . . . .   | 149 |
| 7.1 | Paramètres des tourbillons de l'interaction flamme-vortex . . . . .   | 153 |
| 7.2 | Valeurs moyennées sur les champs des grandeurs radiatives pour étudier l'influence du plissement sur le rayonnement. . . . .  | 158 |
| 8.1 | Paramètres pour le modèle chimique de combustion du propane à deux étapes. . . . .  | 170 |
| 8.2 | Emissions globales de la flamme pour différents modèles spectraux et erreurs relatives par rapport au modèle SNBcK. . . . .   | 176 |
| 8.3 | Utilisation mémoire du solveur radiatif PRISSMA pour les différents maillages utilisés. . . . .   | 179 |
| 8.4 | Emissions globales de la flamme pour différents modèles spectraux en tenant compte de la réflexion et écarts relatifs par rapport aux cas sans réflexion (cf tableau 8.2). . . . .  | 184 |
| 8.5 | Estimation de la précision des solutions, l'erreur majorée des pertes radiatives totales est estimée en sommant les erreurs induites par chaque paramètre (erreurs indépendante) : modèle spectral, maillage, quadrature angulaire. . . . .   | 186 |
| 8.6 | Temps de calcul du solveur radiatif en fonction de l'ensemble des paramètres pour le rayonnement. Les calculs de référence sont surlignés en jaune, les calculs donnant une précision acceptable sont sur fond gris et les calculs dont la précision est insuffisante sont surlignés en rouge. Les temps de calculs sont tous donnés pour un calcul qui utiliserait 24 processeurs de type Intel(R) Xeon(R) CPU @ 2.66 GHz. . . . . | 187 |
| 9.1 | Convergence de la solution initiale pour le couplage . . . . .  | 196 |
| 9.2 | Fractions massiques moyennes dans la chambre avec et sans rayonnement.216   |     |

# BIBLIOGRAPHIE

- [1] Lewis. *Pourquoi j'ai mangé mon père*.
- [2] D. Joseph. *Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004.
- [3] A. De Guilhem De Lataillade. *Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans des système en combustion*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2001.
- [4] P. J. Coelho. Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 33(4) :311–383, August 2007.
- [5] K. V. Deshmukh, D. C. Haworth, and M. F. Modest. Direct numerical simulation of turbulence radiation interactions in homogeneous nonpremixed combustion systems. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1) :1641–1648, 2007.
- [6] M. F. Modest. Multiscale modelling of turbulence, radiation and combustion interactions in turbulent flames. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 3 :85–106, 2005.
- [7] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2001.
- [8] D. Veynante. Modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente : exemples, challenges et perspectives. *La Lettre de l'IDRIS*.
- [9] Denis Veynante and Luc Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(3) :193–266, March 2002.
- [10] The AVBP Handbook. Technical report, CERFACS, 2007.
- [11] P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible*. Mathématiques & Applications, Vol. 30, 1998.
- [12] Denis Veynante and Ronnie Knikker. Comparison between LES results and experimental data in reacting flows. *Journal of Turbulence*, 2006.
- [13] G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, C. G. Speziale, and T. A. Zang. Toward the Large-Eddy simulation of compressible turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 238(-1) :155–185, 1992.
- [14] F. Ducros, F. Nicoud, and T. Poinso. Wall-adapting local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries. In Baines M. J., editor, *ICFD*, pages 293–300, 1998.

- [15] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- [16] B. F. Magnussen and B. W. Hjertager. On the structure of turbulence and a generalised eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. In *19th AIAA Aerospace Meeting*, St. Louis, 1981.
- [17] D. Veynante and T. Poinso. *Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion*. New tools in turbulence modelling, O. Metais and J. Ferziger Editor, 1996.
- [18] S. Menon and W. H. Jou. Large-eddy simulations of combustion instability in an axisymmetric ramjet combustor. *AIAA Journal*, 90-0267, 1990.
- [19] T. D Butler and P. J. O'Rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. In *Symposium on Combustion (International), 16th, Cambridge, Mass., August 15-20, 1976, Proceedings. (A77-48158 23-25) Pittsburgh, Pa., Combustion Institute, 1977, p. 1503-1513; Comments, p. 1513-1515. ERDA-Navy-supported research.*, pages 1503–1513, 1977.
- [20] O. Colin. *Simulation aux Grandes Echelles de la Combustion Turbulente Prémélangée dans les Statoréacteurs - TH/CFD/00/21*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France -Mécanique des Fluides, 2000.
- [21] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion part2. *Physics of Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.
- [22] G. Staffelbach, L. Y. M. Gicquel, and T. Poinso. *Highly Parallel Large Eddy Simulations of Multiburner Configurations in Industrial Gas Turbines*, pages 325–336. 2007.
- [23] C. Prière. *Simulations aux grandes échelles : application au jet transverse*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.
- [24] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, vol.101(1) :104–129, 1992.
- [25] P. Schmitt. *Thermally accurate LES of the stability-emission performance of staged gas-turbine combustion*. PhD thesis, Université Paul Sabatier, June 2005.
- [26] J. Amaya, O. Cabrit, D. Poitou, B. Cuenot, and M. El Hafi. Unsteady coupling of Navier-Stokes and radiative heat transfer solvers applied to an anisothermal multicomponent turbulent channel flow. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(2) :295–301, 2010.
- [27] M. F. Modest. *Radiative Heat Transfert*. Mc Graw Hill International Editions, 1993.
- [28] J. S. A. Green. Division of radiative streams into internal transfer and cooling to space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 93(397) :371–372, 1967.
- [29] H.C. Hottel and A.F. Sarofim. *Radiative Transfer*. McGraw-Hill, New York, 1976.

- [30] R. Fournier. *Rayonnement thermique dans les gaz en cavité : analyse du couplage avec la convection naturelle*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse, 1994.
- [31] M. Cherkaoui, J.-L. Dufresne, R. Fournier, J.-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Monte carlo simulation of radiation in gases with a Narrow-Band model and a Net-Exchange formulation. *Journal of Heat Transfer*, 118(2) :401–407, May 1996.
- [32] M. Cherkaoui, J.-L. Dufresne, R. Fournier, J.-Y. Grandpeix, and A. Lahellec. Radiative net exchange formulation within One-Dimensional gas enclosures with reflective surfaces. *Journal of Heat Transfer*, 120(1) :275–278, February 1998.
- [33] J.L. Dufresne, R. Fournier, and J.Y. Grandpeix. Inverse gaussian k-distribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61 :433–441, March 1999.
- [34] P. Perez. *Algorithmes de synthèse d'images et propriétés spectrales des gaz de combustion : méthode de Monte Carlo pour la simulation des transferts radiatifs dans les procédés à haute température*. PhD thesis, INP Toulouse, 2003.
- [35] V. Eymet, R. Fournier, S. Blanco, and J.L. Dufresne. A boundary-based net-exchange monte carlo method for absorbing and scattering thick media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 91(1) :27–46, February 2005.
- [36] R. Siegel and J.R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Taylor and Francis, 4th edition, 2002.
- [37] F. Liu, G.J. Smallwood, and O.L. Gülder. Band lumping strategy for radiation heat transfer calculations using a narrowband model. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 14(2) :278 – 281, 2000.
- [38] M. F. Modest. The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer. *ASME Transactions Journal of Heat Transfer*, 113 :650–656, August 1991.
- [39] A. Soufiani and E. Djavdan. A comparison between weighted sum of gray gases and statistical narrow-band radiation models for combustion applications. *Combustion and Flame*, 97(2) :240 – 250, 1994.
- [40] M. K. Denison and B. W. Webb. A spectral line based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers. *ASME Journal of Heat Transfer*, (115) :1004–1012, 1993.
- [41] M. K. Denison and B. W. Webb. The spectral-line-based weighted-sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media. *ASME Journal of Heat Transfer*, (117) :359–365, 1995.
- [42] L. Pierrot, P. Rivière, A. Soufiani, and 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(5) :609 – 624, 1999.
- [43] L. Pierrot, A. Soufiani, and J. Taine J. 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 :523–548, July 1999.

- [44] M. F. Modest and H. Zhang. The full-spectrum correlated-k distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures. *Journal of Heat Transfer*, 124(1) :30–38, 2002.
- [45] Frédéric André and Rodolphe Vaillon. The k-moment method for the narrow band modeling of radiative properties of nonuniform gaseous media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 109(2) :258–268, 2008.
- [46] V. Goutiere, F. Liu, and A. Charette. An assessment of real-gas modelling in 2D enclosures. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64 :299–326, February 2000.
- [47] V. Goutière, A. Charette, and L. Kiss. Comparative performance of non-gray gas modeling techniques. *Numerical Heat Transfer Part B : Fundamentals*, 41 :361–381, March 2002.
- [48] F. Liu, M. Yang, G.J. Smallwood, and H. Zhang. Evaluation of the snb based full-spectrum ck method for thermal radiation calculations in  $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$  mixtures. In *Proceedings of ICHMT*, 2004.
- [49] 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(9) :935–942, September 1974.
- [50] W. Malkmus. Random lorentz band model with Exponential-Tailed s-1 Line-Intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America*, 57(3) :323–329, March 1967.
- [51] A. Soufiani and J. Taine. High temperature gas radiative propriety parameters of statistical narrow-band model for  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$  and  $\text{CO}$  and correlated-k model for  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$ . *Technical note in International Journal of Heat and mass transfer*, 40 :987–991, 1997.
- [52] J. Thiévin, R. Georges, S. Carles, A. Benidar, B., R., and J.P. Champion. High-temperature emission spectroscopy of methane. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 109(11) :2027–2036, July 2008.
- [53] F. Liu, G. J. Smallwood, and O. L. Gülder. Application of the statistical narrow-band correlated-k method to non-grey gas radiation in  $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$  mixtures : approximate treatments of overlapping bands. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 68(4) :401–417, February 2001.
- [54] R. Goody, R. West, L. Chen, and D. Crisp. The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 42(6) :539–550, December 1989.
- [55] J. Taine and A. Soufiani. Gas ir radiatives properties : From spectroscopic data to approximate models. *Advanced Heat Transfer*, 33 :296–414, 1999.
- [56] F. Liu and G. J. Smallwood. An efficient approach for the implementation of the SNB based correlated-k method and its evaluation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84(4) :465–475, April 2004.

- [57] F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood, and M. El Hafi. Effects of gas and soot radiation on soot formation in counterflow ethylene diffusion flames. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84(4) :501–511, April 2004.
- [58] P. J. Coelho, P. Perez, and M. El Hafi. Benchmark numerical solutions for radiative heat transfer in two-dimensional axisymmetric enclosures with non-gray sooting media. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 43(5) :425 – 444, 2003.
- [59] P. Perez, M. El Hafi, P. J. Coelho, and R. Fournier. Accurate solutions for radiative heat transfer in two-dimensional axisymmetric enclosures with gas radiation and reflective surfaces. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 47(1) :39 – 63, 2004.
- [60] L. Tessé, F. Dupoirieux, and J. Taine. Monte carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(3) :555–572, 2004.
- [61] Y. Wu, M. F. Modest, and D. C. Haworth. A high-order photon monte carlo method for radiative transfer in direct numerical simulation. *J. Comput. Phys.*, 223(2) :898–922, 2007.
- [62] M. Roger, S. Blanco, M. El Hafi, and R. Fournier. Monte carlo estimates of Domain-Deformation sensitivities. *Physical Review Letters*, 95(18) :180601, October 2005. Copyright (C) 2009 The American Physical Society ; Please report any problems to prola@aps.org.
- [63] A. Schuster. Radiation through a foggy atmosphere. *Journal of Astrophysics*, 217 :1–22, 1905.
- [64] H. C. Hamaker. Radiation and heat conduction in light scattering material. *Philips Research Repport*, 2 :55–67, 103–125, 1947.
- [65] R. G. Siddall and N. Selçuk. Evaluation of a new six-flux model for radiative transfer in rectangular enclosures. *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, 57 :163–169, 1979.
- [66] D. Joseph, P. Perez, M. El Hafi, and B. Cuenot. Discrete ordinates and monte carlo methods for radiative transfer simulation applied to computational fluid dynamics combustion modeling. *Journal of Heat Transfer*, 131(5) :052701–9, May 2009.
- [67] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Dover, Mineola, NY, 1960.
- [68] B. G. Carlson. *Tables of equal weight quadrature eq over the unit sphere*. 1971.
- [69] W. A. Fiveland. *Discrete ordinate methods for radiative heat transfer in isotropically and anisotropically scattering media*. W. A. Babcock and Wilcox Research and Development Div., 1987.
- [70] W. A. Fiveland. Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *ASME Transactions Journal of Heat Transfer*, 106 :699–706, November 1984.
- [71] J. S. Truelove. *Discrete-ordinate solutions of the radiation transport equation*. 1987.

- [72] K. A. Jensen, J.F. Ripoll, A. Wray, D. Joseph, and M El Hafi. On various modeling approaches to radiative heat transfer in pool fires. *Combustion and Flame*, 148(4) :263–279, March 2007.
- [73] D. Joseph, P. J. Coelho, B. Cuenot, and M. El Hafi. Application of the discrete ordinates method to grey media in complex geometries using 3-dimensional unstructured meshes. In *Eurotherm73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media*, volume 11, pages 97–106, Mons (Belgium), 2003. Eurotherm series.
- [74] D. Joseph, M. El Hafi, R. Fournier, and B. Cuenot. Comparison of three spatial differencing schemes in discrete ordinates method using three-dimensional unstructured meshes. *International Journal of Thermal Sciences*, 44(9) :851–864, September 2005.
- [75] J. Ströhle, U. Schnell, and K. Hein. A mean flux discrete ordinate interpolation scheme for general coordinates. In *3rd International Conference on Heat Transfer*, Antalya, 2001.
- [76] J. Amaya. *Multiphysical coupled simulations on parallel architectures*. PhD thesis, CERFACS, 2010.
- [77] D. Poitou, J. Amaya, Bushan Singh C., D. Joseph, M. El Hafi, and B. Cuenot. Validity limits for the global model FS-SNBcK for combustion applications. In *Proceedings of Eurotherm83 – Computational Thermal Radiation in Participating Media III*, 2009.
- [78] V.P. Kabashnikov and G.I. Kmit. Influence of turbulent fluctuations on thermal radiation. *Journal Applied Spectroscopy*, 31(2) :963–967, 1979.
- [79] V.P. Kabashnikov and G.I. Myasiwko. Thermal radiation in turbulent flows - temperature and concentration fluctuations. *Heat Transfer - Soviet Research*, 17(6) :116–125, 1985.
- [80] A. Yu. Snegirev. Statistical modeling of thermal radiation transfer in buoyant turbulent diffusion flames. *Combustion and Flame*, 136(1-2) :51–71, 2004.
- [81] S-M Jeng, M-C Lai, and G. M Faeth. Nonluminous radiation in turbulent buoyant axisymmetric flames. *Combustion Science and Technology*, 40(1) :41 – 53, 1984.
- [82] S.P. Burns. Turbulence radiation interaction modeling in hydrocarbon pool fire simulation. Technical report, 1999.
- [83] G. Cox. On radiant heat transfer in turbulent flames. *Combustion Science and Technology*, 17 :75–78, 1977.
- [84] Stephen J. Fischer, Bénédicte Hardouin-Duparc, William L. Grossh, and ler. The structure and radiation of an ethanol pool fire\*1. *Combustion and Flame*, 70(3) :291–306, December 1987.
- [85] W.L. Grosshandler and P. Joulain. The effect of large-scale fluctuations on flame radiation. *Prog Aeronaut Astronaut*, 52(105-123), 1986.

- [86] W. Krebs, R. Koch, H.J. Bauer, R. Kneer, and S. Witting. Effect of turbulence on radiative heat transfer inside a model combustor. In *Proceeding of Eurotherm seminar no. 37-heat transfer in radiating and combusting systems 2*, pages 349–362, Saluggia, Italy, October 1994.
- [87] G. M. Sivathanu, M. E. Kounalakis, and G. M. Faeth. Soot and continuous radiation statistics of luminous turbulent diffusion flames. In *Proceedings of the Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, pages 1543–1550, 1990.
- [88] J. P. Gore and G. M. Faeth. Structure and radiation properties of luminous turbulent acetylene/air diffusion flames. *Journal of Heat Transfer*, 110 :173–181, 1988.
- [89] J. P. Gore and G. M. Faeth. Structure and spectral radiation properties of turbulent ethylene/ air diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 21(1) :1521–1531, 1986.
- [90] M.E. Kounalakis, Y.R. Sivathanu, and G.M. Faeth. Infrared radiation statistics of non luminous turbulent diffusion flames. *Journal of Heat transfer*, 113(437-445), 1991.
- [91] M. E. Kounalakis, J. P. Gore, and G. M. Faeth. Mean and fluctuating radiation properties of non premixed turbulent carbon monoxide/air flames. *Journal of Heat Transfer*, 111 :1021–1030, 1989.
- [92] M. E. Kounalakis, J. P. Gore, and G. M. Faeth. Turbulence/radiation interactions in nonpremixed hydrogen/air flames. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1) :1281–1290, 1988.
- [93] J. P. Gore, S. M. Jeng, and G. M. Faeth. Spectral and total radiation properties of turbulent hydrogen/air diffusion flames. *AIAA and ASME*, 109 :165–171, 1987.
- [94] J. P. Gore, S. M. Jeng, and G. M. Faeth. Spectral and total radiation properties of turbulent carbon monoxide/air diffusion flames. *AIAA Journal*, 25 :339–345, 1987.
- [95] F. Kritzstein and A. Soufiani. Infrared gas radiation from a homogeneously turbulent medium. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(7) :1749–1762, May 1993.
- [96] Y. Zheng, R. S. Barlow, and J. P. Gore. Measurements and calculations of spectral radiation intensities for turbulent Non-Premixed and partially premixed flames. *Journal of Heat Transfer*, 125(4) :678–686, 2003.
- [97] Y. Zheng, R. S. Barlow, and J. P. Gore. Spectral radiation properties of partially premixed turbulent flames. *Journal of Heat Transfer*, 125(6) :1065–1073, December 2003.
- [98] Y. Zheng, Y.R. Sivathanu, and J.P. Gore. Measurements and stochastic time and space series simulations of spectral radiations intensities for turbulent non-premixed and partially premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1957–1963, 2002.

- [99] P. J. Coelho. Detailed numerical simulation of radiative transfer in a nonluminous turbulent jet diffusion flame. *Combustion and Flame*, 136(4) :481–492, March 2004.
- [100] V. P. Kabashnikov. The generalized telegraphic process approximation for thermal radiation of a turbulent flow. *Energy*, 23(2) :113–123, February 1998.
- [101] T. H. Song and R. Viskanta. Interaction of radiation with turbulence : application to a combustion system. *Journal Thermophysics Heat Transfer*, 1 :56–62, 1987.
- [102] B. R. Adams and P. J Smith. Modeling effects of soot and Turbulence-Radiation coupling on radiative transfer in turbulent gaseous combustion. *Combustion Science and Technology*, 109(1) :121 – 140, 1995.
- [103] P. J. Coelho, O. J. Teerling, and D. Roekaerts. Spectral radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous turbulent jet diffusion flame. *Combustion and Flame*, 133(1-2) :75–91, April 2003.
- [104] G. Li and M. F. Modest. Numerical simulation of turbulence radiation interaction in turbulent reacting fluxes. *Modelling and Simulation of Heat Transfer*, pages 77–109, 2007.
- [105] S. Mazumder and M. F. Modest. A probability density function approach to modelling turbulence-radiation interactions in non luminous flames. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 42 :971–991, 1999.
- [106] G. Li and M. F. Modest. Application of composition PDF methods in the investigation of turbulence-radiation interactions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73(2-5) :461–472, June 2002.
- [107] G. Li and M. F. Modest. Importance of Turbulence-Radiation interactions in turbulent diffusion jet flames. *Journal of Heat Transfer*, 125(5) :831–838, October 2003.
- [108] M. F. Modest and R. S. Mehta. Modelling absorption TRI in optically thick eddies. In Lybaert P Lemmonier D, Selçuk N, editor, *Proceedings of Eurotherm seminar 78 - computational thermal radiation in participating media II*, pages 63–72. Lavoisier, 2006.
- [109] Wang A and M.F. Modest. An adaptive emission model for monte carlo simulations in highly-inhomogeneous media represented by stochastic particle fields. . p. In Lybaert P Lemmonier D, Selcuk N, editor, *roceedings of Eurotherm seminar 78-computational thermal radiation in participating media II.*, pages 63–72. Paris : Lavoisier, 2006.
- [110] X. Xu, Y. L. Chen, and H. Wang. Detailed numerical simulation of thermal radiation influence in Sandia flame D. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(13-14) :2347–2355, July 2006.
- [111] K. V. Deshmukh, M. F. Modest, and D. C. Haworth. Direct numerical simulation of turbulence radiation in a statistically one-dimensional non premixed system. In Lybaert P Lemmonier D, Selçuk N, editor, *Proceedings of Eurotherm seminar 78 - computational thermal radiation in participating media II*, pages 235–244. Lavoisier, 2006.

- [112] Y. Wu, D. C. Haworth, M. F. Modest, and B. Cuenot. Direct numerical simulation of turbulence/radiation interaction in premixed combustion systems. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :639–646, 2005.
- [113] D. Poitou, M. El Hafi, and B. Cuenot. Diagnosis of Turbulence Radiation Interaction in turbulent flames and implications for modeling in Large Eddy Simulation. *Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences*, 31 :371–381, 2007.
- [114] <http://public.ca.sandia.gov/tnf/radiation.html>. Technical report, SANDIA, 2003.
- [115] M. Roger, C. B. Da Silva, and P. J. Coelho. Analysis of the turbulence-radiation interactions for large eddy simulations of turbulent flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(9-10) :2243 – 2254, 2009.
- [116] P. J. Coelho. Approximate solutions of the filtered radiative transfer equation in large eddy simulations of turbulent reactive flows. *Combustion and Flame*, 156(5) :1099–1110, May 2009.
- [117] V. Eymet. *Simulation Monte-Carlo et analyse en Puissance Nettes Echangées des transferts radiatifs infrarouges avec diffusion : vers une paramétrisation dans un Modèle de Circulation Générale atmosphérique*. PhD thesis, Université Paul Sabatier, 2003.
- [118] S.J. Brooke and J.B. Moss. Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 116(4) :486–503, March 1999.
- [119] C. S. Yoo and H. G. Im. Transient soot dynamics in turbulent nonpremixed ethylene–air counterflow flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1) :701–708, January 2007.
- [120] P. -H. Renard, D. Thévenin, J. C. Rolon, and S. Candel. Dynamics of flame/vortex interactions. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26(3) :225–282, June 2000.
- [121] P. E. Desjardin and S. H. Frankel. Two-dimensional large eddy simulation of soot formation in the near-field of a strongly radiating nonpremixed acetylene-air turbulent jet flame. *Combustion and flame*, 119(1-2) :121–132, 1999.
- [122] W.P. Jones and M.C. Paul. Combination of DOM with LES in a gas turbine combustor. *International Journal of Engineering Science*, 43(5-6) :379–397, March 2005.
- [123] R. Gonçalves dos Santos. *Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion Including Radiative Heat Transfer*. PhD thesis, EM2C, 2007.
- [124] R. Gonçalves dos Santos, M. Lecanu, S. Ducruix, O. Gicquel, E. Iacona, and D. Veynante. Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combustion and Flame*, 152(3) :387–400, February 2008.
- [125] R. Knikker, D. Veynante, J.C. Rolon, and C. Meneveau. Planar laser-induced fluorescence in a turbulent premixed flame to analyze Large Eddy Simulation models. In *Proceedings of the 10th international Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, 2000.

- [126] R. Knikker, D. Veynante, and C. Meneveau. A priori testing of a similarity model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2) :2105–2111, 2002.
- [127] C. Nottin, R. Knikker, M. Boger, and D. Veynante. Large eddy simulations of an acoustically excited turbulent premixed flame. *Symposium (International) on Combustion*, 28(1) :67–73, 2000.
- [128] F. Duchaine, A. Corpron, L. Pons, V. Moureau, F. Nicoud, and T. Poinso. Development and assessment of a coupled strategy for conjugate heat transfer with Large Eddy Simulation. application to a cooled turbine blade. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, submitted, 2009.
- [129] M. Leacanu. *Couplage multi-physique combustion turbulent - rayonnement - cinétique chimique*. PhD thesis, École centrale Paris, 2005.
- [130] Y. Wang. *Direct Numerical Simulation of non-premixed combustion with soot and thermal radiation*. PhD thesis, University of Maryland, 2005.
- [131] Jin Zhang, Olivier Gicquel, Denis Veynante, and Jean Taine. Monte carlo method of radiative transfer applied to a turbulent flame modeling with LES. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7) :539–549.
- [132] Edward D. Palik and Gorachand Ghosh. *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, 1998.
- [133] T. Lagarde, A. Piacentini, and O. Thual. A new representation of data-assimilation methods : The PALM flow-charting approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 127 :189–207, January 2001.
- [134] M. Coantic and O. Simonin. Radiative effects on turbulent temperature spectra and budgets in the planetary boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41(17) :2629–2651, September 1984.
- [135] W. Malalasekera, M. Deiveegan, S.K. Sadasivuni, and S.S. Ibrahim. Evaluation of turbulence/radiation effects using les combustion simulation data. In *Proceedings of Eurotherm83 – Computational Thermal Radiation in Participating Media III*, 2009.

# **Annexe**



# TABULATION DU MODÈLE FS-SNBcK



Le modèle global FS-SNBcK a montré de bons résultats en terme de précision comparé au modèle SNBcK. Le temps de calcul ce modèle se situe environ à mi-chemin entre celui du modèle SNBcK et du modèle WSGG. La différence de temps de calcul par rapport au modèle WSGG provient essentiellement du calcul des coefficients d'absorption. Ces coefficients vont être tabulés afin d'atteindre un temps de calcul comparable au modèle WSGG.

Le développement d'une version tabulée du modèle FS-SNBcK se fait en deux étapes. La première est la construction d'une table des coefficients d'absorption en fonction de chaque paramètre. La dépendance de la fonction à tabuler à tous les paramètres est étudiée en détails pour choisir correctement les intervalles de la table. Dans une deuxième étape, pour l'utilisation de la table, les valeurs tabulées sont interpolées sur des paramètres d'entrée quelconques.

## A.1 TABULATION

Le coefficient d'absorption est fonction de cinq variables : température, pression, concentration de  $H_2O$ ,  $CO_2$  et  $CO$ . Pour tabuler les coefficients en fonction de chaque paramètre, la dimension de la table est d'ordre 5. En l'absence d'onde de choc dans les applications visées, la pression peut être considérée constante. La table est donc construite pour une pression donnée.

Les coefficients doivent être tabulés en fonction des quatre paramètres restants avec des pas de tabulation appropriés. L'ensemble des  $N_q$  valeurs de  $\kappa$  est stocké pour un ensemble de valeurs  $T_i$ ,  $X_{H_2O,j}$ ,  $X_{CO_2,k}$  et  $X_{CO,l}$ . Les paramètres sont tous à pas constant dans la table :  $\Delta T$ ,  $\Delta X_{H_2O}$ ,  $\Delta X_{CO_2}$  et  $\Delta X_{CO}$ . Le nombre de valeurs stockées dans la table dépend de l'intervalle de variation de chaque paramètre, il vaut :

$$N_{val} = N_q \times \frac{(T_{max} - T_{min})}{\Delta T} \times \prod_{i=1}^3 \frac{(X_{i,max} - X_{i,min})}{\Delta X_i} \quad (A.1)$$

où les espèces  $i = 1, 2, 3$  sont respectivement  $H_2O$ ,  $CO_2$  et  $CO$ .

Les intervalles des paramètres sont :

- $[300; 2900K]$  pour la température  $T$ ,
- $[0; 1]$  pour chaque fraction molaire  $X_i$ .

Cependant les fractions molaires maximales sont souvent inférieures à 1,  $X_{i,max} \lesssim 0,3$ . Si la fraction molaire  $X_{i,max}$ , utilisée pour construire la table, est

adaptée à la configuration, le nombre de valeurs tabulées peut être considérablement réduit et par conséquent la taille de la table également.

Enfin une bonne détermination des pas de tabulation est importante afin de ne pas trop dégrader les résultats obtenus en utilisant des coefficients d'absorption tabulés. Les pas utilisés ne peuvent pas être infiniment fins pour une raison de stockage. Aussi une bonne connaissance de la variation de  $\kappa$  avec les paramètres  $T$  et  $X_i$  permet de choisir convenablement les pas  $\Delta T$  et  $\Delta X_i$  de la table.

### A.1.1 Dépendance de $\kappa$ avec un seul paramètre

Pour déterminer le comportement de  $\kappa$  avec chaque paramètre, il faut déterminer des cas représentatifs pour les applications de combustion visées. Dans un premier temps chaque paramètre est étudié individuellement sur l'ensemble de son intervalle en fixant les autres paramètres à une valeur nulle.

Cinq points de quadrature ont été utilisés dans cette étude. La valeur de  $N_q$  doit être spécifiée à la construction de la table et déterminée en fonction de l'accord entre une solution FS-SNBcK et SNBcK. Les graphiques suivants représentent la valeur  $\kappa_5$  en fonction de chacun des paramètres, le dernier point de quadrature donne la valeur avec l'amplitude la plus importante.

#### Température

La variation de  $\kappa_5$  a été représentée sur la Fig. A.1 pour un mélange de 20% d' $\text{H}_2\text{O}$ , 10% de  $\text{CO}_2$  et 5% de  $\text{CO}$  avec un pas  $\Delta T = 1\text{K}$ . La dépendance de  $\kappa$  avec la température est de nature polynomiale, mais les coefficients sont fonctions de la composition du mélange. Aussi pour une flamme turbulente, la courbe de  $\kappa$  en fonction de la température n'a pas de forme spécifique.

Sur la Fig. A.1 le bruit observé à basse température est dû à la tabulation des propriétés SNB tous les 100K. La cumulée  $g(\kappa)$  par bande est pondérée par la luminance de Planck, fonction continue. A plus haute température l'effet de la fonction de Planck devient dominant et lisse les fluctuations liées à la tabulation des propriétés SNB.

#### Fractions molaires

La variation de  $\kappa_5$  en fonction de la fraction massique de chaque espèce a été représentée sur les Fig. A.2, A.3 et A.4 à trois températures données (500, 1500 et 2500K). Pour chaque espèce, la variation de  $\kappa_5$  est quasiment linéaire.

### A.1.2 Dépendance de $\kappa$ avec deux paramètres

Pour compléter l'analyse du comportement de  $\kappa_5$  des représentations en fonction de deux paramètres ont été utilisées. Dans l'espace à quatre dimensions formé par les paramètres, certaines régions ne sont pas représentatives de situations de combustion. Les gaz absorbants sont présents dans les gaz brûlés, à haute température pour les flammes de prémélange.

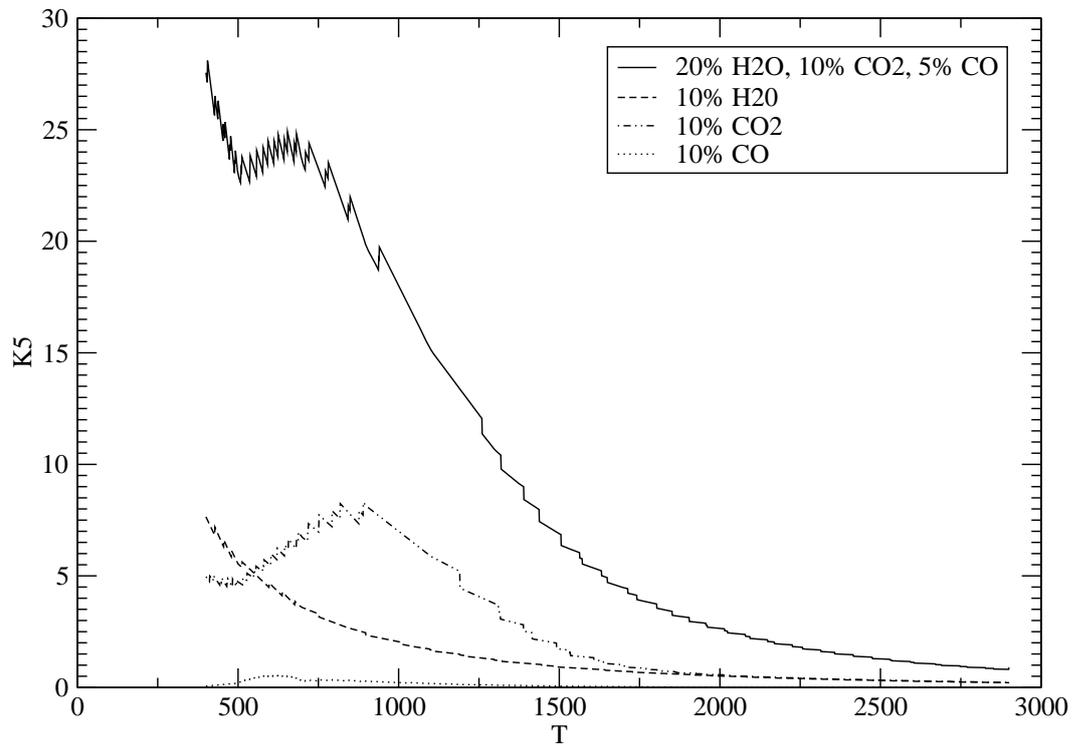


FIG. A.1 – Variation de  $\kappa_5$  avec la température avec un pas  $\Delta T = 1\text{K}$  pour : un mélange de 20% de H<sub>2</sub>O, 10% de CO<sub>2</sub> et 5% de CO, une composition mono espèce de 10% de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> puis CO.

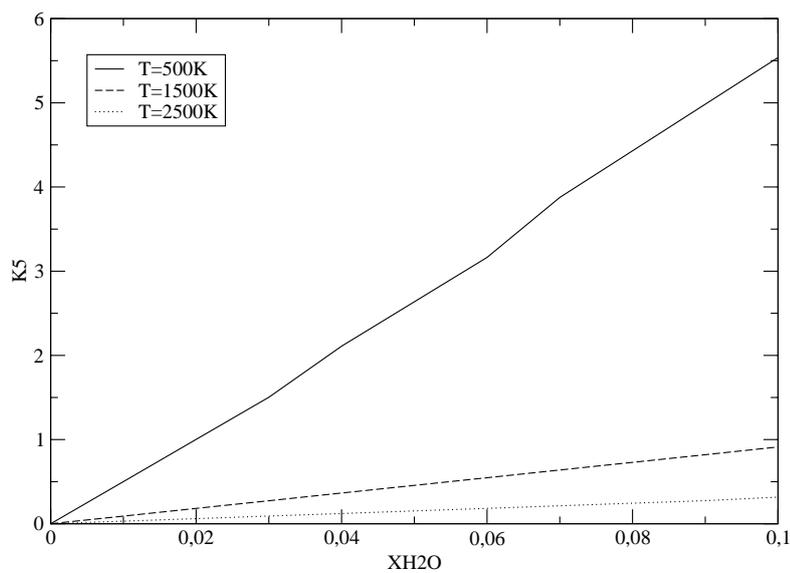


FIG. A.2 – Variation de  $\kappa_5$  avec la fraction molaire de H<sub>2</sub>O pour  $T = 500, 1500$  et  $2500\text{K}$ .

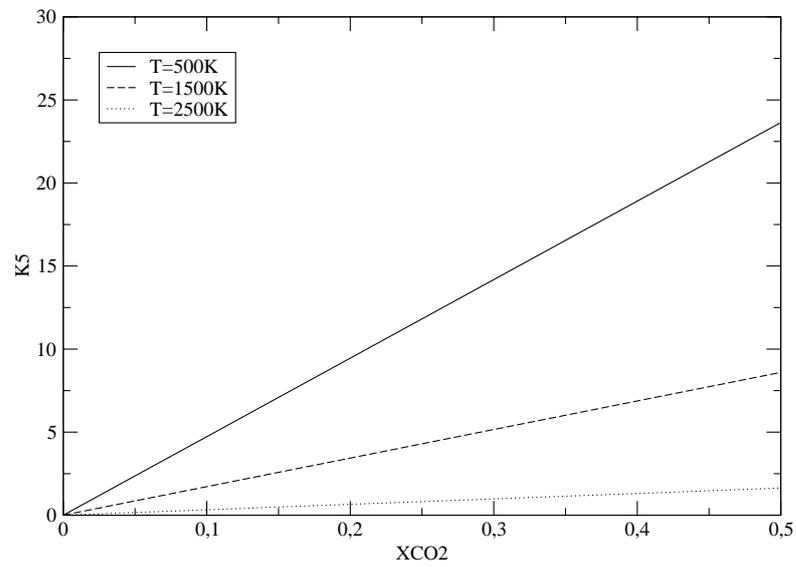


FIG. A.3 – Variation de  $\kappa_5$  avec la fraction molaire de  $\text{CO}_2$  pour  $T = 500, 1500$  et  $2500\text{K}$ .

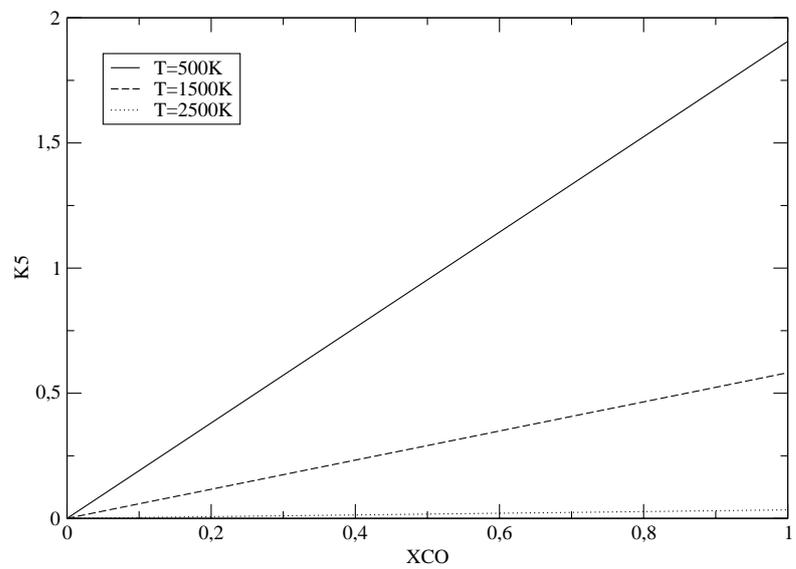


FIG. A.4 – Variation de  $\kappa_5$  avec la fraction molaire de  $\text{CO}$  pour  $T = 500, 1500$  et  $2500\text{K}$ .

Dans les régions d'intérêt de l'espace des paramètres, certains paramètres peuvent être corrélés. Dans le calcul des paramètres SNB pour le modèle SNBcK, dans le calcul des  $\bar{\gamma}_i$ , les paramètres sont corrélés. Il faut donc s'assurer qu'en fonction de deux paramètres, la fonction  $\kappa_5$  ne subit pas de brusques variations causées par des corrélations. Par ailleurs, il est possible d'évaluer le poids relatif de chaque paramètre pour rendre l'interpolation de la table plus précise.

### Température et fraction molaire

Les Fig. A.5, A.6 et A.7 donnent la dépendance de  $\kappa_5$  en fonction de la température et de la fraction molaire dans des cas avec une seule espèce.

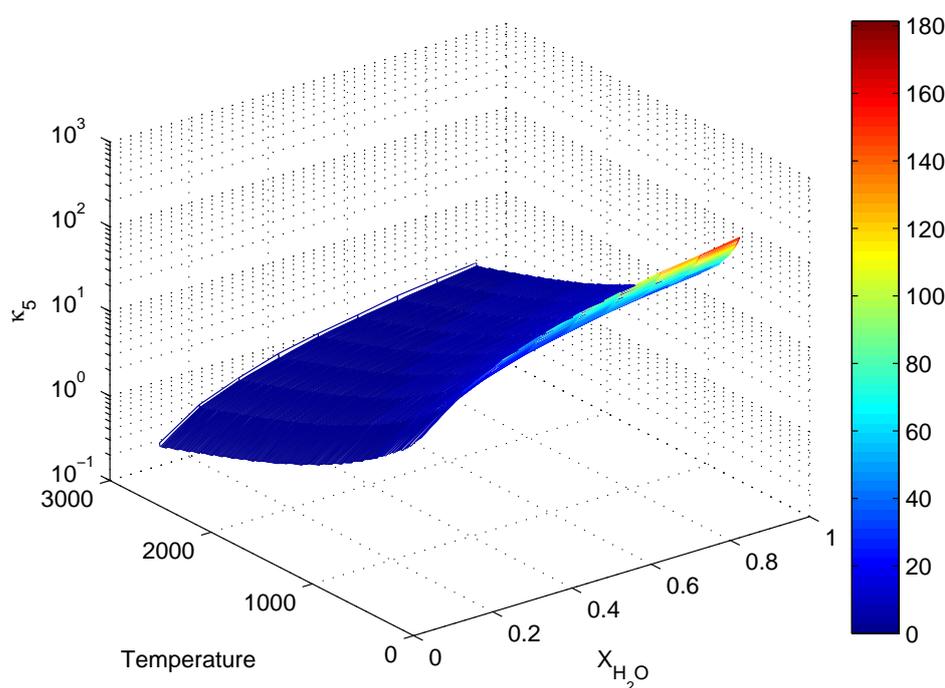


FIG. A.5 – Dépendance de  $\kappa_5$  (échelle log) en fonction de la température et la fraction molaire de  $H_2O$ .

Les plans  $\kappa_5(T, X_i)$  montrent une faible corrélation entre les variables  $T$  et  $X_i$  pour chaque espèce. Sur la Fig. A.1, la courbe de  $\kappa_5(T)$  est bruitée à basse température par la tabulation des propriétés SNB. Cependant l'impact de cet effet est limité car les gaz frais n'absorbent pas et les gaz brûlés absorbants sont en faible concentration à basse température.

### Fractions molaires

Les Fig. A.8 et A.9 donnent la dépendance à deux fractions molaires d'espèces pour une température de 1500K. Par ailleurs les concentrations sont liées par :

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{espèces}}} X_i = 1 \quad (\text{A.2})$$

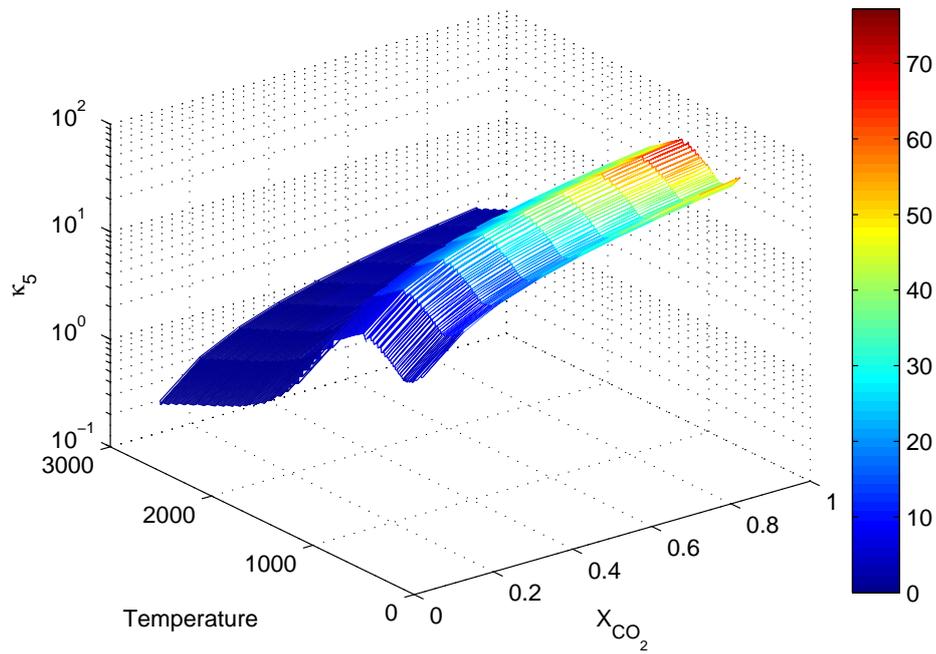


FIG. A.6 – Dépendance de  $\kappa_5$  (échelle log) en fonction de la température et la fraction molaire de  $\text{CO}_2$ .

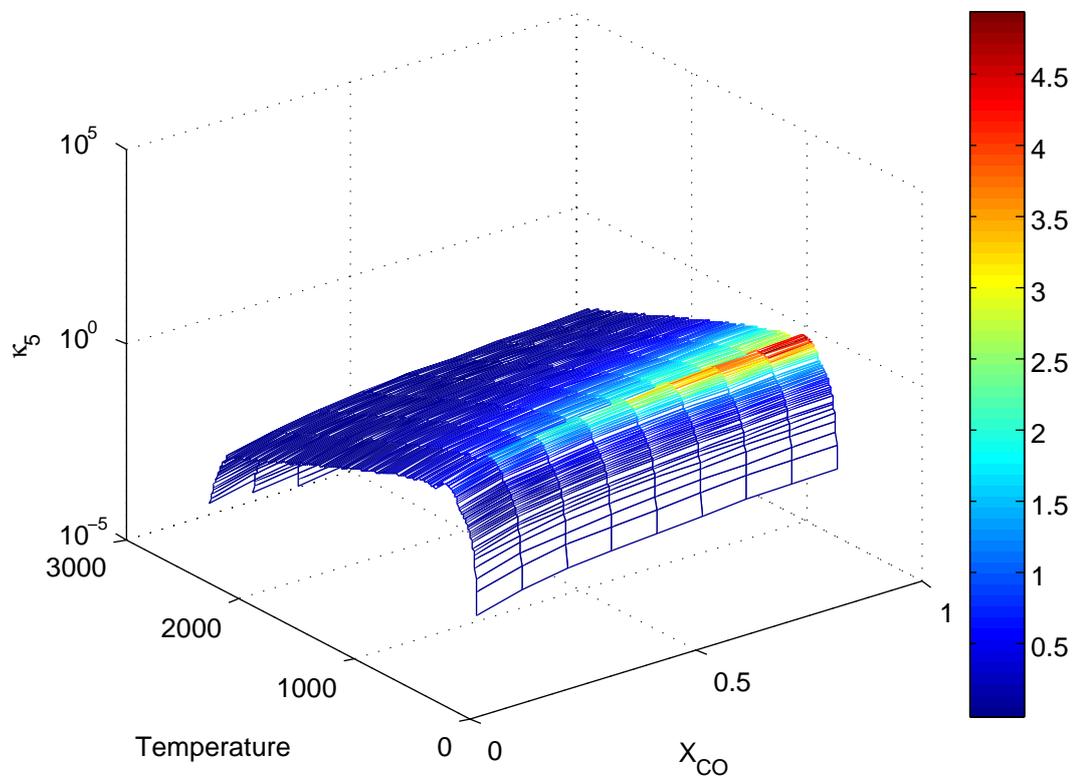


FIG. A.7 – Dépendance de  $\kappa_5$  (échelle log) en fonction de la température et la fraction molaire de  $\text{CO}$ .

Dans les cas balayés lors de la construction de la table, une partie concerne des cas non physiques avec une somme des fractions molaires supérieure à 1. Dans ce cas le coefficient tabulé a été imposé à 0 pour optimiser le temps de construction de la table (*i.e.* la partie supérieure de la diagonale est nulle dans les Fig. A.8 et A.9). La technique employée n'est pas optimisée en mémoire car une grande partie de la matrice est creuse. Cependant pour les cas étudiés la taille de la table conserve une taille acceptable (<100Mo).

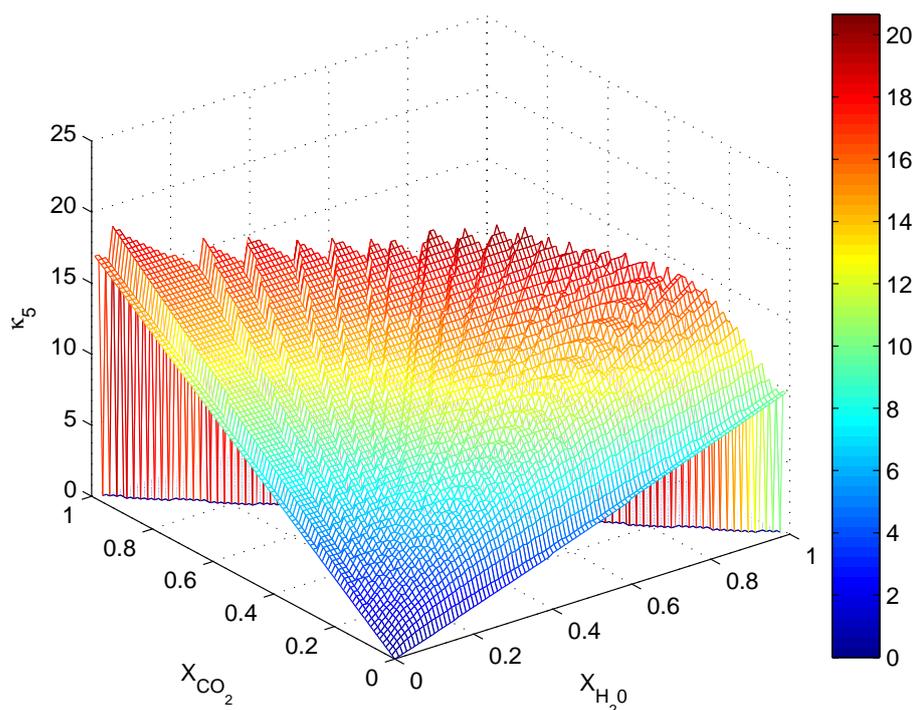


FIG. A.8 – Dépendance de  $\kappa_5$  aux fractions molaires de  $H_2$  et  $CO_2$ .

La dépendance de  $\kappa_5$  entre  $H_2O$  et  $CO_2$  est légèrement corrélée, tandis que la dépendance entre  $H_2O$  et  $CO$  est presque complètement décorrélée. Les Fig. A.8 et A.9 montrent également que la participation de  $CO_2$  et  $H_2O$  à l'absorption est du même ordre, alors que celle du  $CO$  est beaucoup plus faible.

### A.1.3 Pas des paramètres $T$ et $X_i$

Pour déterminer les pas  $\Delta T$  et  $\Delta X_i$  de la table une estimation de l'erreur par une interpolation linéaire a été menée. L'erreur est calculée comme :

$$\epsilon = \frac{\left| (\kappa(i) + \kappa(i + \Delta_i)) / 2 - \kappa(i + \frac{\Delta_i}{2}) \right|}{\kappa(i + \frac{\Delta_i}{2})} \quad (A.3)$$

Tant que l'erreur est supérieure à 1% le pas  $\Delta_i$  est divisé par deux. Un critère d'arrêt à  $\Delta T = 1K$  a été imposé pour la température.

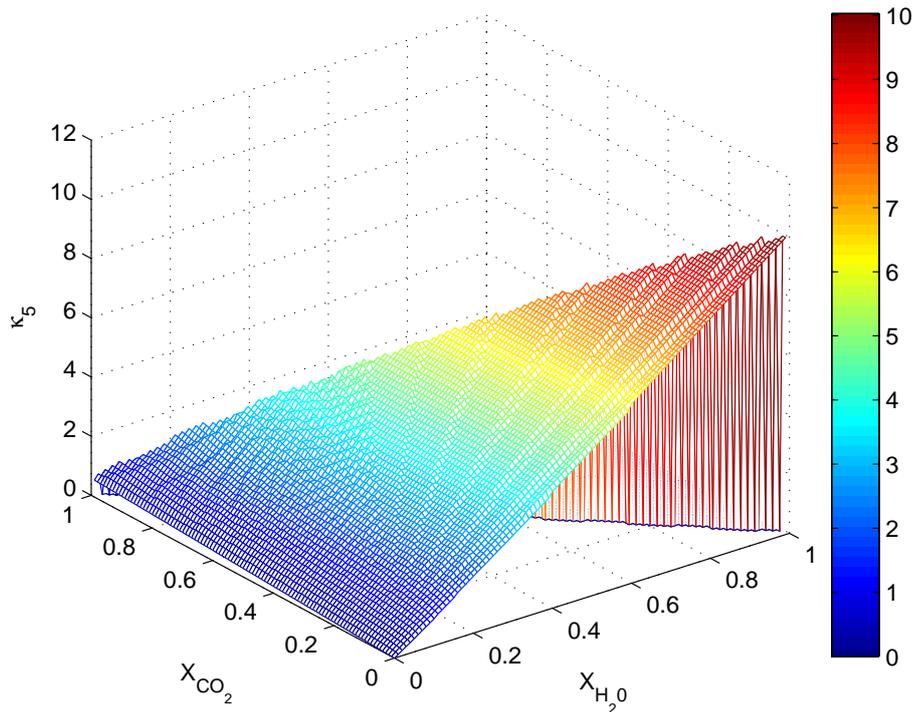


FIG. A.9 – Dépendance de  $\kappa_5$  aux fractions molaires de  $H_2$  et  $CO$ .

Le calcul du pas minimum de température en fonction de la température est donné sur la Fig. A.10 pour le mélange 20%  $H_2O$ , 10%  $CO_2$ , 5%  $CO$ . Un pas de température de 10 K semble bien adapté bien que certains points soient en dessous de cette valeur. Les points où le pas de  $T$  doit être réduit nécessitent un  $\Delta T \sim 1K$  ce qui ne semble pas justifié à cause de la tabulation des propriétés SNB (voir A.1). La même étude pour des compositions différentes donne le même type de résultats. Les compositions où le plus de points sont en dessous du seuil  $\Delta T = 10K$  sont celles contenant uniquement  $H_2O$ .

Les pas de concentration minimum sont donnés pour chaque espèce sur les Fig. A.11, A.12 et A.13 pour des températures de 500, 1500 et 2500K. Si un pas de 0,5 suffit pour  $CO$ , un pas plus faible doit être utilisé pour  $H_2O$  et  $CO_2$  en fonction de la température. Plus la température est basse plus le pas pour ces espèces doit être réduit. Cependant ces produits de la réaction sont en général présents à plus haute température. En utilisant les minima des pas trouvés aux différentes températures, les valeurs suivantes semblent pouvoir être retenues :  $\Delta Y_{H_2O} \sim 1 - 5\%$ ,  $\Delta Y_{CO_2} \sim 10 - 20\%$  et  $\Delta Y_{CO} \sim 50\%$ .

La détermination des pas de la table doit être faite au cas par cas en comparaison avec une solution FS-SNBcK non tabulée pour validation. Le modèle non tabulé doit être lui même validé par une solution SNBcK pour s'assurer que le nombre de points de quadrature utilisé est suffisant.

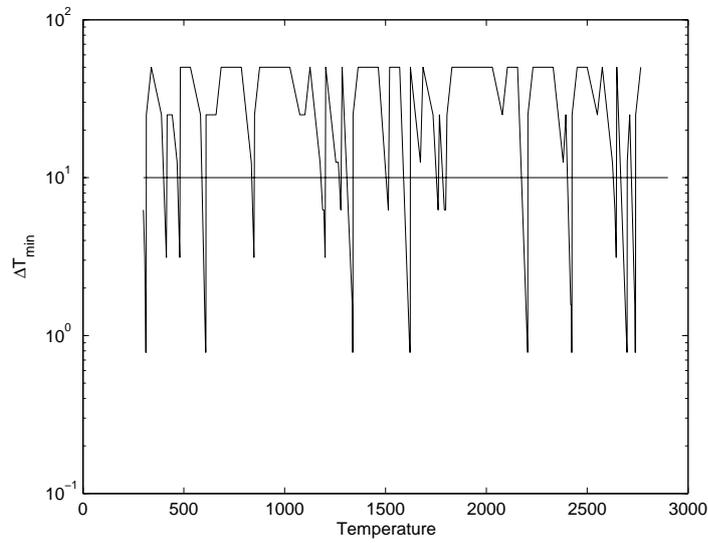


FIG. A.10 – Pas de température minimum pour une erreur de 1% sur  $\kappa_5$  pour le mélange 20%  $H_2O$ , 10%  $CO_2$ , 5%  $CO$  avec un critère d'arrêt à  $\Delta T = 1K$ .

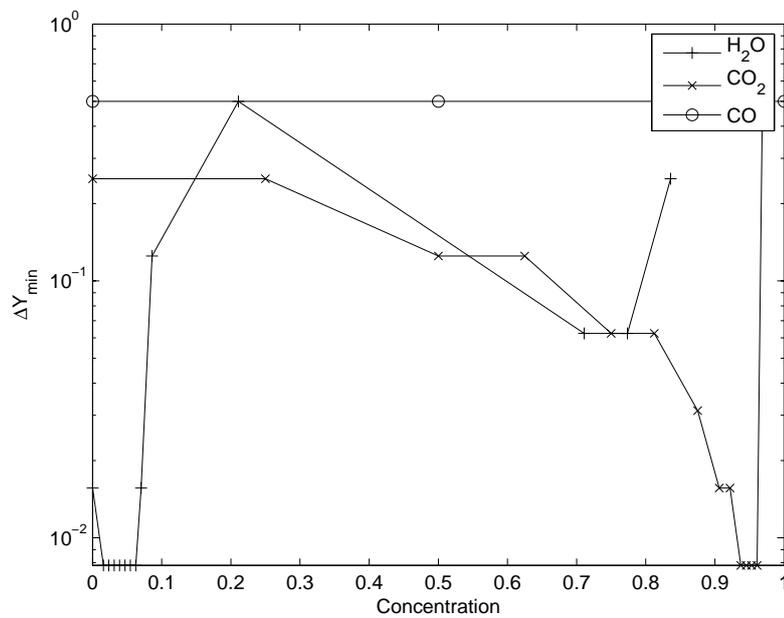


FIG. A.11 – Pas de concentration minimum pour chaque espèce à une température de 500K.

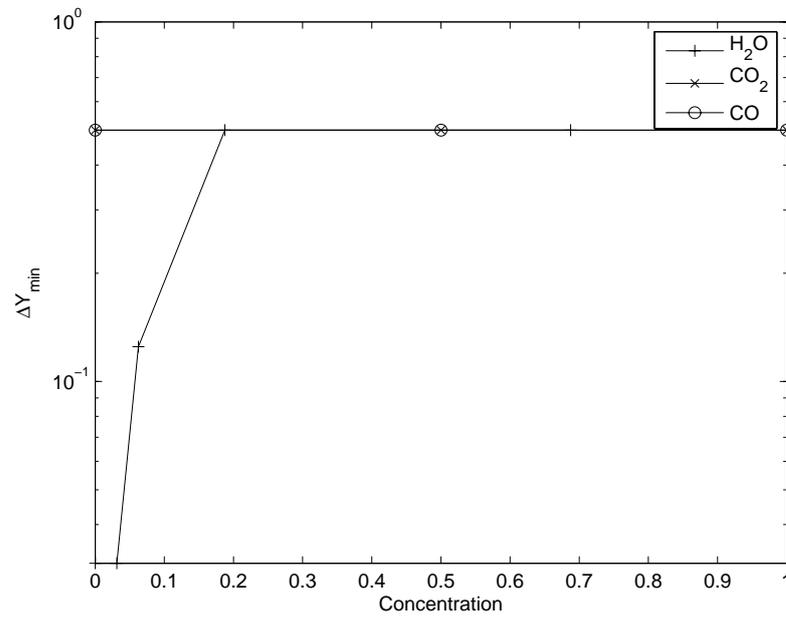


FIG. A.12 – Pas de concentration minimum pour chaque espèce à une température de 1500K.

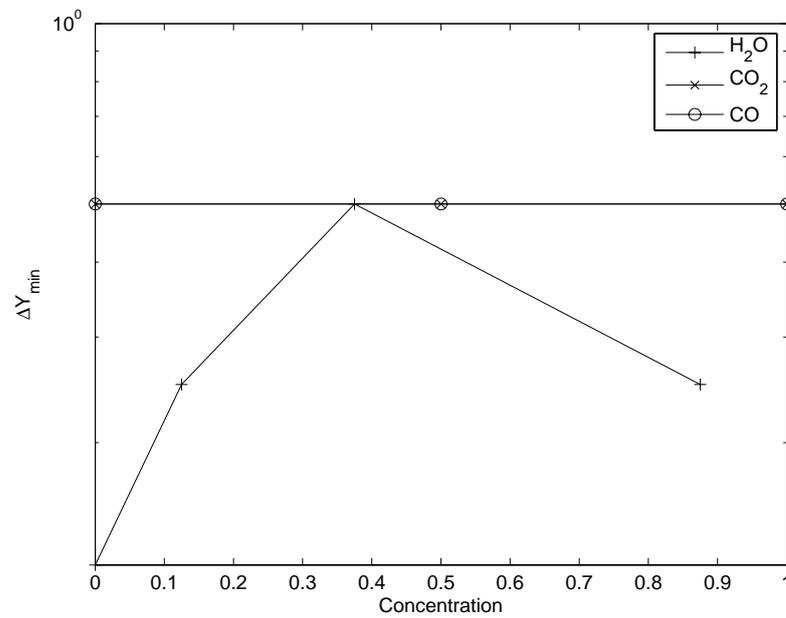


FIG. A.13 – Pas de concentration minimum pour chaque espèce à une température de 2500K.

## A.2 INTERPOLATION

Après la construction de la table, les coefficients d'absorption pour des valeurs quelconques  $T$  et  $X_i$  doivent être déterminés lors du calcul radiatif. Pour cela les valeurs tabulées sont interpolées par une interpolation linéaire. L'espace des paramètres étant de dimension quatre, il y a seize sommets voisins  $j$  dans un hypercube autour du point  $P(T, X_i)$ . La valeur interpolée est calculée comme :

$$\kappa(T, X_i) = \left( \sum_{k=1}^{16} \frac{d_k}{16} \right) \sum_{j=1}^{16} \frac{1}{d_j} \kappa_j \quad (\text{A.4})$$

où  $d_j$  est la distance entre le point  $P(T, X_i)$  et le point  $j$  et vaut :

$$d_j = \omega_T \sqrt{(T - T_j)^2} + \sum_{i=1}^3 \omega_{X_i} \sqrt{(X - X_{i,j})^2} \quad (\text{A.5})$$

Avec  $\omega_T$  et  $\omega_{X_i}$  qui sont des poids pour tenir compte de l'importance relative de chaque paramètre. Pour la version tabulée utilisée dans ce travail ces poids sont égaux à :

$$\begin{aligned} \omega_T &= 1 \\ \omega_{X_i} &= \frac{\Delta T}{\Delta X_i} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Ils pourront être ajustés pour améliorer l'interpolation si la précision n'est pas suffisante à partir des données de la section [A.1.2](#).

Ce document a été préparé à l'aide de l'éditeur de texte GNU Emacs et du logiciel de composition typographique L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>.

**Titre** MODÉLISATION DU RAYONNEMENT DANS LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DE LA COMBUSTION TURBULENTE

**Résumé** La simulation de la combustion turbulente connaît un nouvel essor avec l'introduction de la Simulation aux Grandes Échelles (SGE) qui permet de prédire l'évolution instationnaire de l'écoulement réactif turbulent. Dans ce contexte la prise en compte du rayonnement soulève des questions d'ordre à la fois fondamental et pratique. En effet les processus physiques du rayonnement et de la combustion sont de nature radicalement différente : la combustion est contrôlée par des échanges locaux sur une durée finie, alors que le rayonnement est instantané et fait intervenir des échanges à distance. En premier lieu il convient de s'interroger sur l'impact de la modélisation SGE de la combustion turbulente sur le rayonnement. Cette question est traitée dans le cadre plus général de l'interaction rayonnement-turbulence. A partir d'études théoriques et numériques, il est montré que cette interaction est faible et qu'une solution SGE peut être directement utilisée pour un calcul radiatif, sans modélisation supplémentaire. Il s'agit ensuite de mettre en place de façon pratique le couplage instationnaire rayonnement-combustion turbulente. Un point clé est la réduction du temps de calcul pour le rayonnement, et diverses stratégies sont proposées. En particulier un nouveau modèle spectral est introduit, utilisant une technique de tabulation et garantissant un niveau de précision suffisant. Le temps de calcul radiatif a ainsi été réduit de deux ordres de grandeur, permettant la réalisation d'un calcul couplé sur une configuration de flamme prémélangée turbulente.

**Mots-clés** Combustion turbulente, Simulations aux Grandes Échelles, Transfert radiatif, Modèles spectraux globaux, Ordonnées discrètes, Couplage, Interaction Rayonnement-Turbulence

**Title** RADIATION MODELLING IN LARGE EDDY SIMULATION OF TURBULENT COMBUSTION

**Abstract** Simulation of turbulent combustion has gained high potential with the Large Eddy Simulation (LES) approach, allowing to predict unsteady turbulent reactive flows. In this context, taking into account radiation rises new fundamental and practical questions. Indeed the physics involved in radiation and in combustion are completely different : combustion is controlled by local exchanges and finite times whereas radiation is instantaneous and is based on non-local exchanges. In a first step, the impact of LES modelling of turbulent combustion on radiation is regarded. This question is treated in the more general frame of the turbulence-radiation interaction. From theoretical and numerical studies, it is shown that this interaction is weak in the LES context so that LES solutions can be directly coupled to radiative calculations, without further modelling. Then the unsteady coupling of radiation and turbulent combustion is realised. A key point is the reduction of calculation time of radiation, and several strategies are proposed. In particular a new global spectral model is introduced, using a tabulation technique and ensuring a sufficient level of accuracy. The radiative time calculation is finally decreased by two orders of magnitude, enabling the realization of a coupled calculation of a turbulent premixed flame.

**Keywords** Turbulent combustion, Large Eddy Simulation, Radiative transfer, Global spectral models, Discrete ordinate, Coupling, Turbulence-Radiation Interaction