



**HAL**  
open science

Mise en place d'un modèle rapide de propriétés  
radiatives des gaz pour le couplage  
rayonnement-combustion

Patrice Perez, David Joseph, Mouna El-Hafi

► To cite this version:

Patrice Perez, David Joseph, Mouna El-Hafi. Mise en place d'un modèle rapide de propriétés radiatives des gaz pour le couplage rayonnement-combustion. JITH 2007, Aug 2007, Albi, France. 5p. hal-00166803

**HAL Id: hal-00166803**

**<https://hal.science/hal-00166803>**

Submitted on 29 Aug 2007

**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.

# MISE EN PLACE D'UN MODÈLE RAPIDE DE PROPRIÉTÉS RADIATIVES DES GAZ POUR LE COUPLAGE RAYONNEMENT-COMBUSTION

Patrice PEREZ\*, David JOSEPH\*, Mouna EL HAFI\*

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

**Résumé** –La combustion met en jeu des phénomènes très variés, pris en compte de manière plus ou moins précise dans les simulations. En particulier, les transferts radiatifs jouent un rôle primordial dans certains systèmes et peuvent avoir des conséquences importantes sur la structure des flammes, la production de polluants ou encore la durée de vie des parois. La simulation d'un champ complet de termes sources radiatifs et de flux pariétaux avec le code DOMASIUM conduit actuellement à des temps de calcul qui sont de l'ordre de quatre fois le temps de calcul consacré à la simulation de la combustion sans rayonnement. Une autre promesse conduisant à des gains considérables de temps de calcul est le développement de modèles propriétés radiatives réduits. Un modèle de regroupement de bandes étroites est présenté et mis en oeuvre sur une configuration représentative de cas de combustion.

**Mots clés** –Rayonnement, gaz, combustion, couplage

## 1 INTRODUCTION

Le transfert radiatif est le mode de transfert de chaleur dominant dans les systèmes à hautes températures, de grandes dimensions tels que les fours ou les chaudières à l'échelle industrielle, ou des chambres de combustion de moteurs d'avions, de fusées, etc... Le dimensionnement énergétique et environnemental de ces installations passe donc par un calcul précis des échanges radiatifs dans l'enceinte. De plus, le transfert radiatif modifie le champ de températures et une modélisation fine est par conséquent nécessaire dans l'optique d'une prédiction de formation de polluants. Ces simulations précises doivent toutefois pouvoir être couplées à des simulations de mécanique des fluides ou de mécanismes de réactions chimiques pour atteindre un objectif vraiment prédictif. Le modèle de propriétés radiatives des gaz le plus précis, i.e. le modèle raie par raie [1], ne peut pas être utilisé dans des applications industrielles, en raison du temps de calcul trop important requis. A l'opposé, le modèle de gaz gris, représentant l'absorption par le milieu gazeux au moyen d'un seul coefficient d'absorption, conduit à de faibles temps de calcul, mais produit également des erreurs parfois inacceptables suivant la configuration étudiée [2]. Entre ces deux extrêmes, une littérature abondante a été consacrée au développement de modèles spectraux. Le modèle statistique à bandes étroites [3, 4], formulé en transmittivité moyenne ou en coefficients d'absorptions, est généralement considéré comme le modèle de propriétés radiatives le plus précis et est considéré comme un modèle de référence quand le modèle raie par raie ne peut être utilisé. Cependant, le couplage dans les applications en combustion ne nécessite pas forcément l'obtention de grandeurs radiatives spectrales à moyennes résolutions (à l'échelles de quelques  $cm^{-1}$ ), mais plutôt de grandeurs intégrées comme le terme source

radiatif par maille, ainsi que les flux pariétaux. Les modèles de sommes de gaz gris sous leurs différentes formes [5] répondent au double impératif de fournir les termes sources radiatifs et les flux aux parois avec une bonne précision et un temps de calcul réduit. Le regroupement de bandes étroites développé récemment semble également très prometteur pour ce type d'applications [6]. La méthode aux ordonnées discrètes (MOD), généralement considérée comme la méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif (ETR) offrant le meilleur compromis entre précision et temps de calcul, est d'abord présentée. L'utilisation d'un modèle de regroupement de bandes, associé à cette méthode, est ensuite présentée et étudiée. Ce travail s'inscrit dans le cadre plus large du projet CORAYL <sup>1</sup> visant à coupler le code DOMASIUM, basé sur la MOD, au code de combustion AVBP [7], basé sur une approche de simulation aux grandes échelles.

## 2 MÉTHODE AUX ORDONNÉES DISCRÈTES (MOD)

Dans la MOD, l'ETR est résolue pour un nombre discret  $N_{dir}$  de directions  $\mathbf{s}_i$  en utilisant une approche aux volumes finis. L'intégration de l'ETR sur un volume  $V$ , limité par une surface  $\Sigma$ , et l'application du théorème de la divergence, conduisent à :

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

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

$$\sum_{j=1}^{N_{face}} I_j(\mathbf{s}_i) \cdot (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_j) A_j = \kappa V (I_b - I(\mathbf{s}_i)) \quad (2)$$

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

En considérant un cas monochromatique, le terme source radiatif  $S_r$  est alors donné par :

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

où  $Q_r$  est le flux radiatif. Pour le calcul de  $I(\mathbf{s}_i)$ , Ströhle et al. [8] ont proposé un schéma de dérivation spatiale basé sur un schéma de flux moyen très utilisé dans le cas de maillages hybrides. Ce schéma appelé "Diamond Mean Flux Scheme" (pour plus de détails, voir [9]) et plus précis que le schéma "Step" [10] sera utilisé dans la suite de cet article. On utilisera par ailleurs une quadrature angulaire  $S_4$  [11].

## 3 REGROUPEMENT DE BANDES

Les espèces rayonnantes considérées sont celles susceptibles d'intervenir majoritairement dans les applications en combustion, i.e.  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ , ainsi que la suie. Les données utilisées pour représenter les propriétés spectrales des gaz sont celles d'un modèle statistique à

<sup>1</sup>Projet ANR : Ecole Centrale de Paris, Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique, Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, CORAYL : COMbustion et RAYonnement par LES, ANR-05-CICG-012

bandes étroites basées sur un modèle de Malkmus [4]. Les données sont valables pour 367 bandes étroites d'une largeur de  $25 \text{ cm}^{-1}$ , recouvrant une région spectrale allant de  $150 \text{ cm}^{-1}$  à  $9300 \text{ cm}^{-1}$ , et pour des températures allant de  $300 \text{ K}$  à  $2900 \text{ K}$ . Ces données sont utilisées, avec la méthode aux ordonnées discrètes, par l'intermédiaire d'une formulation de l'équation de transfert radiatif où le coefficient d'absorption est la grandeur d'intégration spectrale. Cela est facilité car la fonction de distribution des coefficients d'absorptions pour le modèle de Malkmus a une expression analytique [12] :

$$f_M(\kappa) = \sqrt{\frac{\phi \bar{\kappa}}{2\pi \kappa^3}} \exp \left[ -\frac{\phi (\kappa - \bar{\kappa})^2}{2 \kappa \bar{\kappa}} \right] \quad (4)$$

où  $\bar{\kappa}$  est le coefficient d'absorption moyen sur la bande étroite, et  $\phi$  le paramètre de forme. On utilise alors l'expression de la fonction cumulée de la distribution des coefficients d'absorption comme variable de description spectrale ( $g(\kappa) = \int_0^\kappa f(\kappa') d\kappa'$ ), qui a comme expression analytique pour un modèle de Malkmus :

$$g_M(\kappa) = \Gamma \left[ -\sqrt{\frac{\phi}{\kappa/\bar{\kappa}}} \left( 1 - \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} \right) \right] + \exp(2\phi) \Gamma \left[ -\sqrt{\frac{\phi}{\kappa/\bar{\kappa}}} \left( 1 + \frac{\kappa}{\bar{\kappa}} \right) \right] \quad (5)$$

On établit ensuite une quadrature de Gauss-Legendre en  $N_{\text{quad}}$  points sur la fonction cumulée, et on obtient ainsi des valeurs  $\kappa_i$  du coefficient d'absorption associées à des poids de quadrature  $w_i$ . Ce modèle de propriétés spectrales est le modèle SNB-CK et a fait l'objet d'une littérature abondante [13, 14]. L'intégration sur l'intervalle spectral d'une bande étroite est alors réalisée et un terme source radiatif est alors obtenu par :

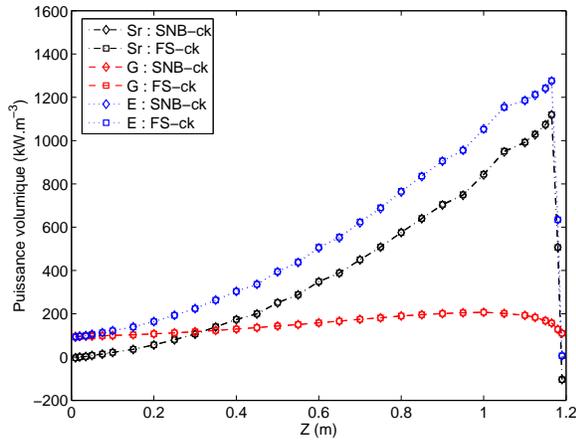
$$S_{r,MOD} = \sum_{i=1}^{N_{\text{bandes}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{quad}}} \Delta \nu_i w_{ij} \kappa_{ij} \left( 4\pi \bar{I}_{b,ij} - \sum_{k=1}^{N_{\text{dir}}} w_k I_{ij}(\mathbf{s}_k) \right) \quad (6)$$

Le nombre de calculs spectraux effectués par directions est alors  $N_s = 367 * N_{\text{quad}}$ . Pour diminuer ce nombre de calculs on peut effectuer un regroupement de  $N$  bandes étroites en utilisant les propriétés des fonctions de distributions et des fonctions cumulées [6] :

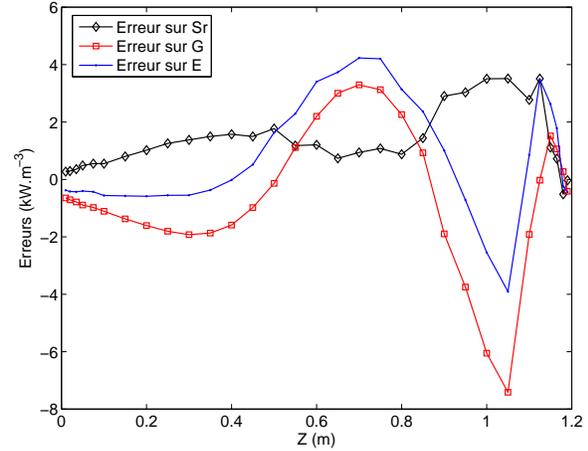
$$f_{RB}(\kappa, T) = \frac{1}{\sigma T^4} \sum_{i=1}^N I_{b,i}(T) f_i(\kappa) \Delta \eta_i \quad (7)$$

$$g_{RB}(\kappa) = \frac{1}{\sigma T^4} \sum_{i=1}^N I_{b,i}(T) g_i(\kappa) \Delta \eta_i \quad (8)$$

Où  $f_{RB}(\kappa)$  est la fonction de distribution des coefficients d'absorption pour un regroupement de  $N$  bandes, et  $g_{RB}$  est la fonction cumulée de ce regroupement,  $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzmann,  $\Delta \eta_i$  est la largeur de la bande étroite  $i$ . En regroupant toutes les bandes étroites disponibles (modèle FSCK pour Full Spectrum Correlated K), on réduit le nombre de calculs spectraux à  $N_{\text{quad}}$  par direction. Pour chaque valeur  $g_{RB_i}$  de  $g_{RB}$  obtenue pour la quadrature, on cherche alors par dichotomie la valeur de  $\kappa$  pour laquelle l'équation (8) est respectée. On peut par la suite utiliser cette valeur dans l'équation (6) pour résoudre l'ETR.



(a) Termes sources radiatifs ( $S_r$ ), puissance volumique reçue ( $G$ ), et puissance volumique émise ( $E$ ), sur l'axe d'un cylindre avec les modèles SNB-CK et FSCK.



(b) Erreurs du FSCK par rapport au SNB-CK

## 4 RÉSULTATS : APPLICATION À UN CAS ACADÉMIQUE

Le cas d'application présenté est un cylindre dont les parois sont considérées comme des corps noirs. Cette configuration a déjà fait l'objet de publications [15] et représente une cas de validation classique. Le cylindre a un rayon  $R = 0.3 \text{ m}$  et une longueur  $L = 1.2 \text{ m}$ . Les parois ont une température de  $800 \text{ K}$ , exceptée la paroi en  $x = L$  qui est à  $300 \text{ K}$ . Le milieu gazeux présente les profils de température et de fraction molaire de  $H_2O$  et de  $CO_2$  suivants :

$$T(x, r) = 800 + 1200(1 - r/R)(x/L) \quad (9)$$

$$x_{H_2O} = 0.05 [1 - 2(x/L - 0.5)^2] (2 - r/R) \quad (10)$$

$$x_{CO_2} = 0.04 [1 - 3(x/L - 0.5)^2] (2.5 - r/R) \quad (11)$$

De plus, une fraction volumique de suie  $f_{vs} = 10^{-7}$  est considérée. Cette configuration, bien qu'académique, présente cependant des gammes de températures et de concentrations d'espèces, ainsi qu'une dimension de l'ordre du mètre, qui la rendent caractéristique et représentative d'un grand nombre de configurations en combustion. Le modèle de regroupement de bandes sur l'ensemble du spectre est alors utilisé dans cette configuration pour calculer les termes sources radiatifs sur l'axe du cylindre. La solution obtenue est confrontée à des résultats calculés à partir des données spectrales non regroupées par un modèle SNB-CK (Fig. 1(a)). On peut souligner une excellente concordance entre les résultats obtenus par les deux modèles spectraux, aussi bien sur le terme source radiatif, que sur ses composantes reçues et émises. La figure 1(b) présente les différences entre les résultats obtenus par le modèle FSCK et la référence SNB-CK. Elle montre que l'erreur maximale est de l'ordre de  $8 \text{ kW/m}^3$ , ce qui est faible devant l'ordre de grandeur des termes sources calculés dans cette configuration. L'erreur sur le terme source calculé reste inférieure à  $4 \text{ kW/m}^3$ .

## 5 CONCLUSION

Un modèle spectral de regroupement de bande a été mis en oeuvre lors de l'utilisation d'une méthode aux ordonnées discrètes pour aborder des configurations réelles en combustion. Le modèle obtenu de calcul des termes sources radiatifs a été testé sur une configuration typique de

combustion et a montré un accord excellent avec une solution de référence plus consommatrice de temps de calcul. Le modèle de regroupement de bandes présenté fournit donc une très bonne précision sur les termes sources calculés et un gain en temps de calcul conséquent. Ce modèle constitue une très bonne piste dans l'optique de coupler le code DOMASIUM à des codes de combustion.

## REFERENCES

1. J. Taine and A. Soufiani. Gas ir radiatives properties : From spectroscopic data to approximate models. In *Advances in Heat Transfer*, volume 33, pages 295–414. 1999.
2. F. Liu, H.A. Becker, and Y. Bindar. A comparative study of radiative heat transfer modelling in gas-fired furnaces using the simple grey gas and the weighted-sum-of-frey-gases models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41 :3357–3371, 1998.
3. W. Malkmus. Random lorentz band model with exponential-tailed s-1 line-intensity distribution function. *Journal of Optical Society of America*, 57 :323–329, 1967.
4. Soufiani A. and Taine J. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow band model for  $h_2o$ ,  $co_2$  and  $co$  and correlated-k model for  $h_2o$  and  $co_2$ . *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(4) :987–991, 1997.
5. V. Gouttière, A. Charette, and L. Kiss. Comparative performance of nongray gas modeling techniques. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 41 :361–381, 2002.
6. F. Liu, M. Yang, G.J. Smallwood, and H. Zhang. 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.
7. B. Cuenot, Y. Sommerer, L. Gicquel, and T. Poinso. Les of reacting flows. In *3<sup>rd</sup> International Workshop on Rocket Combustion Modeling, Paris, France*, 2006.
8. Strohle J., Schnell U., and Hein K.R.G. A mean flux discrete ordinates interpolation scheme for general coordinates. In *3<sup>rd</sup> International Conference on Heat Transfer, Antalya*, 2001.
9. Joseph D. and El Hafi M., Fournier R., and Cuenot B. Comparison of three spatial differencing schemes in discrete ordinates method using three-dimensional unstructured meshes. *International Journal of Thermal Sciences*, 44(9) :851–864, 2005.
10. J. Liu, H.M. Shang, Y.S. Chen, and T.S. Wang. Development of an unstructured radiation model applicable for two dimensional planar, axisymmetric and 3-dimensional geometries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 66 :17–33, 2000.
11. B.G. Carlson. Tables of equal weight quadrature eqn over the unit sphere. Technical report, Los Alamos Scientific Report, LA-4734, 1971.
12. Dufresne J-L., Fournier R., and Grandpeix J-Y. Inverse gaussian k-distributions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61, 1999.
13. A.A. Lacis and V. Oinas. A Description of the Correlated K-Distribution Method. *Journal of Geophysical Research*, 96 :9027–9064, 1991.
14. L. Pierrot, A. Soufiani, and J. Taine. Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in  $h_2o$ ,  $co_2$ , and  $h_2o - co_2$  mixtures at high temperature. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62 :523–548, 1999.
15. Coelho P.J., Perez P., and El Hafi M. Benchmark numerical solutions for radiative heat transfer in two-dimensional nongray sooting media. *Numerical Heat Transfer part B-Fundamentals*, 43 :425–444, 2003.