

PRÉDICTION DES FLUX RADIATIFS ÉMIS PAR DES FLAMMES DE DIFFUSION TURBULENTES DE TYPE JET CHARGÉES EN SUIE

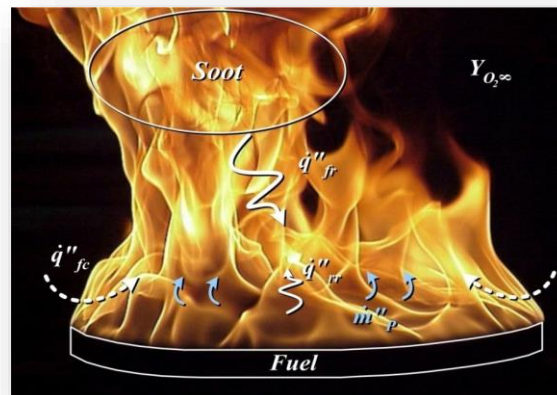
D. Burot^{*,}, F. Nmira^{*}, J.L. Consalvi^{**}**

* EDF R&D, 6 quai Watier, 78400 Chatou, France.

** Aix-Marseille Université, IUSTI/UMR CNRS 7343, 5 rue E. Fermi, 13453 Marseille Cedex 13, France.

1. CONTEXTE

- **Modélisation de flammes de diffusion turbulentes chargées en suies :**
 - Combustion turbulente et production de la suie
 - Couplage rayonnement/cinétique chimique
 - Interactions rayonnement/turbulence
 - Caractère spectral du rayonnement lié aux espèces gazeuses
- **Processus couplés → A modéliser pour prévoir correctement les différentes corrélations et les flux radiatifs au sein de la flamme.**



PLAN DE LA PRÉSENTATION

1. CONTEXTE

2. MODÈLES NUMÉRIQUES POUR LA SIMULATION DES FLAMMES TURBULENTES

2.1 COMBUSTION TURBULENTE

2.2 PRODUCTION DE SUIE

2.3 TRANSFERTS RADIATIFS

2.4 MÉTHODE DE TRANSPORT DE LA FONCTION DENSITÉ DE PROBABILITÉ (PDF)

3. CONFIGURATION EXPÉRIMENTALE

4. RÉSULTATS

2.1 STRUCTURE DE FLAMME

2.2 CARACTÉRISTIQUES RADIATIVES

5. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

2.1 COMBUSTION TURBULENTE

- **Turbulence : RANS avec k- ϵ**

- **Combustion : modèle de flammelettes [Peters, 1984]**

- Hypothèses :

- Chimie rapide : Séparation entre la structure de flamme et la dynamique de l'écoulement
- Structure de flamme : équations de flammelettes 1D laminaire :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k + \frac{\rho\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} \qquad \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{\rho\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

- Génération d'une librairie de flammelettes : propriétés de la phase gazeuse (Y_k, T, ρ, \dots) en fonction de 3 paramètres :

- Fraction de mélange z
- Taux de dissipation scalaire $\chi_{st} = 2D(\nabla z)_{st}^2$
- Paramètre de pertes radiatives $X_R = \frac{h - h_{ad}}{h_u - h_{ad}}$

- **Obtention des valeurs moyennes des propriétés de la phase gazeuse par approche statistique [Brookes and Moss, 1999]**

$$\tilde{\phi} = \int \phi(z, \chi_{st}, X_R) f(z, \chi_{st}, X_R) dz d\chi_{st} dX_R$$

2.2 MODÈLE DE PRODUCTION DE LA SUIE

▪ Modèle de Lindstedt [Lindstedt, 1994]

- Basé sur la fraction massique d'acétylène C_2H_2 + benzène C_6H_6
- Transport de Y_s et de N_s
- Modélisation de : nucléation, croissance en surface, oxydation par O_2 et OH , coagulation.
- Validé sur une 30aine de flammes laminares [Demarco *et al.*, 2012]

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \nabla(\rho Y_s \mathbf{V}) = -\nabla J_{Y_s} + \mathcal{S}_{Y_s}$$

$$\frac{\partial \rho N_s}{\partial t} + \nabla(\rho N_s \mathbf{V}) = -\nabla J_{N_s} + \mathcal{S}_{N_s}$$

Termes sources :

- Nucléation
- Croissance en surface
- Oxydation
- Coagulation

2.2 MODÈLE DE SUIE ET FLAMMELETTES

[Carbonell *et al.*, 2009]

- **Temps caractéristiques des réactions liées à la production de la suie trop longs pour relier Y_s et N_s à z directement :**
 - Calcul des termes sources S_{Y_s} et S_{N_s} stockés dans la librairie de flammelettes
 - Calcul des valeurs moyennes des termes sources

$$\overline{S_{Y_s}} = \int S_{Y_s}(z, \chi_{st}, X_R, Y_s, N_s) f(z, \chi_{st}, X_R, Y_s, N_s) dz d\chi_{st} dX_R dY_s dN_s$$

$$\overline{S_{N_s}} = \int S_{N_s}(z, \chi_{st}, X_R, Y_s, N_s) f(z, \chi_{st}, X_R, Y_s, N_s) dz d\chi_{st} dX_R dY_s dN_s$$

- **Résolution des équations de transport au cours du calcul CFD**

2.3 TRANSFERTS RADIATIFS

■ Modèle de rayonnement

- Espèces participatives : CO₂, H₂O, suie
- Propriétés radiatives des gaz : WBCK
 - NB database : CDSD-1000 & HITEMP [Wang & Modest, 2005]
 - Mélange gazeux au niveau NB [Modest & Riazzi, 2005]
 - Assemblage des k-distributions à partir des k-distributions NB en utilisant la stratégie de lumping [Liu et al., 2001] :

$$g_i^{WB}(k, \underline{\phi}) = \frac{1}{\Delta\eta_{WB}} \sum_{j=1}^{NB_i} \Delta\eta_{WB,j} g_j^{NB}(k, \underline{\phi})$$

- Propriétés radiatives des suies : Rayleigh et coefficient d'absorption de Chang et Charalampopoulos [1990]
- RTE résolue par méthode FV [Chui & al., 1992]

2.3 TRANSFERTS RADIATIFS

- Interactions rayonnement turbulence (TRI) :

$$\frac{d\overline{I}_\eta}{ds} + \overline{(\kappa_{\eta s} + \kappa_{\eta g})} I_\eta = \overline{(\kappa_{\eta s} + \kappa_{\eta g})} I_{b\eta}$$

TRI d'absorption
Modélisée par l'OTFA:

$$= \overline{\kappa_{\eta s} + \kappa_{\eta g}} \overline{I}_\eta$$

Valide sur des flammes
modérément suitantes à l'échelle
du laboratoire [Mehta et al, 2010]

TRI d'émission

Calculée de façon exacte via la PDF:

$$= \int \left(\kappa_{\eta s}(\underline{\phi}) + \kappa_{\eta g}(\underline{\phi}) \right) I_{b\eta}(\underline{\phi}) f(\underline{\phi}) d\underline{\phi}$$

$\underline{\phi}$: vecteur composition représentatif de l'état local de l'écoulement, ici

$$f(z, \chi_{st}, X_R, Y_s, N_s)$$

2.4 EQUATION DE TRANSPORT DE LA PDF

[Pope, 1985]
[Fox, 2010]

- **Détermination de $f(z, \chi_{st}, X_R, Y_s, N_s) \equiv f(\underline{\psi})$: équation de transport**
 - Etablie à partir des équations de Navier-Stokes et des propriétés de $f(\underline{\psi})$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle f}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{u}_j f}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_T \frac{\partial f}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\langle \Gamma_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha | \underline{\psi} \rangle \langle \rho \rangle f \right] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\frac{\langle \rho \rangle \dot{\omega}_\alpha(\underline{\psi}) f}{\rho(\underline{\psi})} \right] - \delta_{\alpha(X_R)} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\langle \rho \rangle \left\langle \frac{\dot{Q}_{rad}}{\rho} \middle| \underline{\psi} \right\rangle f \right]$$

Convection par l'écoulement Diffusion turbulente

Micro-mixing (modèle IEM)

Terme source pour le scalaire α

Terme source pour X_R

$$\langle \Gamma_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha | \underline{\psi} \rangle \equiv \frac{C_\phi}{2} \omega(\tilde{\phi}_\alpha - \psi_\alpha)$$

Transport dans l'espace physique Transport dans l'espace de composition

- **Intérêt : Modéliser de manière exacte les interactions turbulence/production de suie et turbulence/émission du rayonnement.**

2.4 STOCHASTIC FIELDS

- **PDF multi-environnements** : $f(\underline{\Psi}; x, t) = \frac{1}{N_e} \sum_{n=1}^{N_e} \prod_{\alpha=1}^{N_\alpha} \delta(\Psi_\alpha - \phi_{\alpha,n}(x, t))$

- Nombre d'environnements $N_e=60$

- SPDE déterminée au sens d'Ito:

$$d\phi_{\alpha,n} = -\tilde{u}_j \frac{\partial \phi_{\alpha,n}}{\partial x_j} dt + \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_t \frac{\partial \phi_{\alpha,n}}{\partial x_j} \right] dt + S(\phi_{\alpha,n}) dt - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{k} C_\phi (\phi_{\alpha,n} - \tilde{\phi}_\alpha) dt + \left(\frac{2}{\langle \rho \rangle} \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right)^{1/2} \frac{\partial \phi_{\alpha,n}}{\partial x_j} dW_{j,n},$$

- Résolue en deux étapes :

- 1^{ère} étape déterministe : $d\phi_{\alpha,n} = -\tilde{u} \frac{\partial \phi_{\alpha,n}}{\partial x} dt + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_T \frac{\partial \phi_{\alpha,n}}{\partial x} \right) dt + S(\phi_{\alpha,n}) dt$

- 2^{ème} étape stochastique : $d\phi_{\alpha,n} = -\frac{C_\phi}{2} \frac{\varepsilon}{k} (\phi_{\alpha,n} - \tilde{\phi}) dt + \sqrt{2\Gamma_T} \frac{\partial \phi_{\alpha,n}}{\partial x} dW$

- Obtention des valeurs moyennes et de la variance de $Q(\underline{\phi})$:

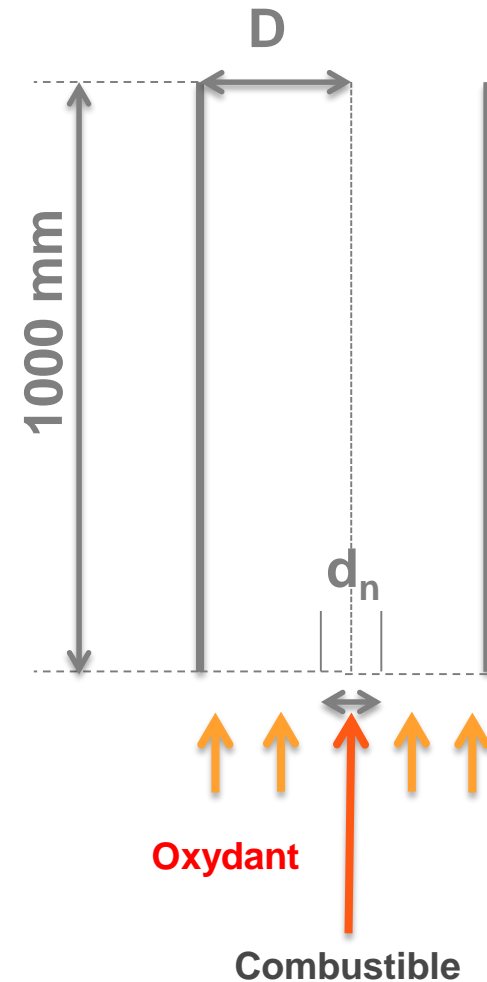
$$\tilde{Q}(x, t) = \frac{1}{N_e} \sum_{n=1}^{N_e} Q(\phi_{\alpha,n})(x, t)$$

$$\tilde{Q}''^2(x, t) = \frac{1}{N_e} \sum_{n=1}^{N_e} (\tilde{Q}(x, t) - Q(\phi_{\alpha,n}(x, t)))^2$$

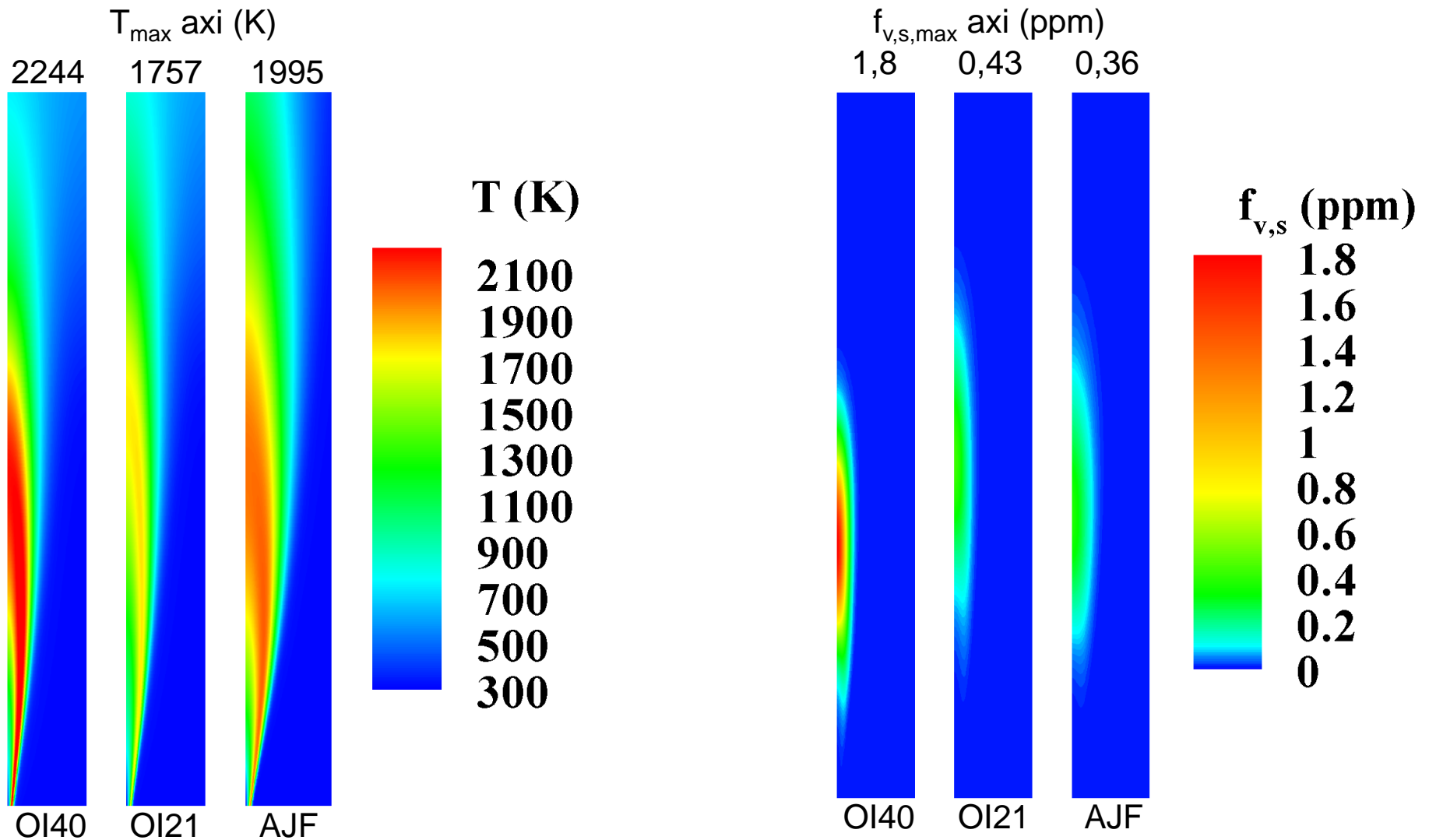
- **Modèle validé sur 12 flammes turbulentes avec Reynolds et fuels variés**

3. CONFIGURATION EXPÉRIMENTALE

Ref.	Wang et al., 2002		Mahmoud et al., 2014
Nom	OI40	OI21	AJF
Combustible	C_3H_8		63.8% C_2H_4 4.6% H_2 31.6% N_2
Oxydant	40% O_2 60% N_2	21% O_2 79% N_2	
Vitesse injection fuel	21,8 m/s		57 m/s
Diamètre injection fuel d_n	3 mm		4,4 mm
Diamètre chambre D	200 mm		560 mm
Reynolds à l'injection	14800		15000

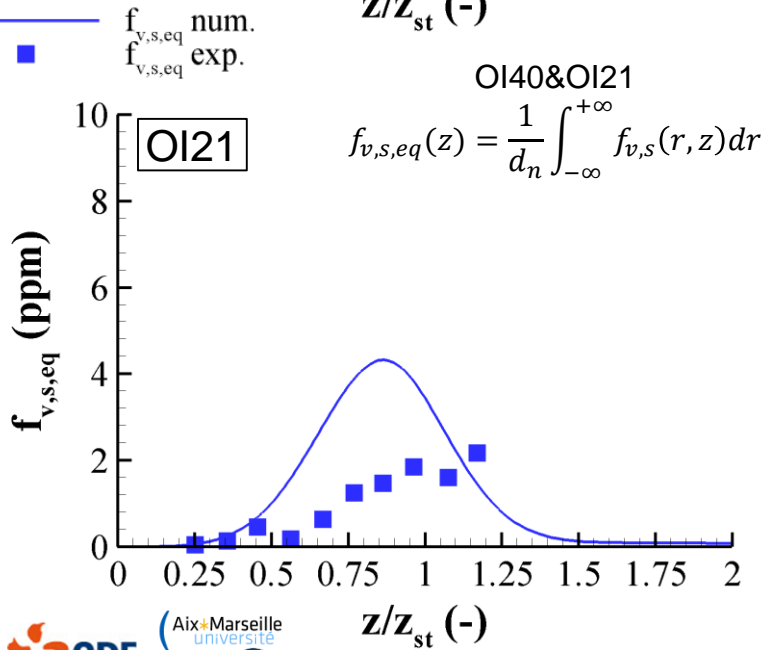
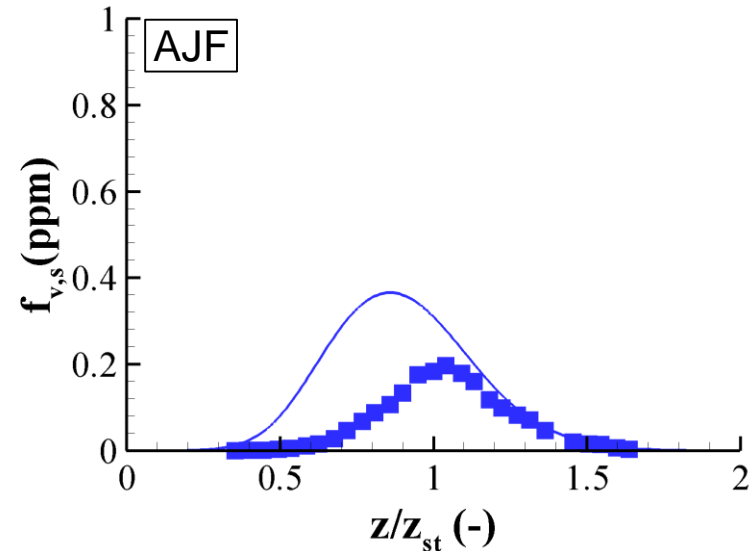
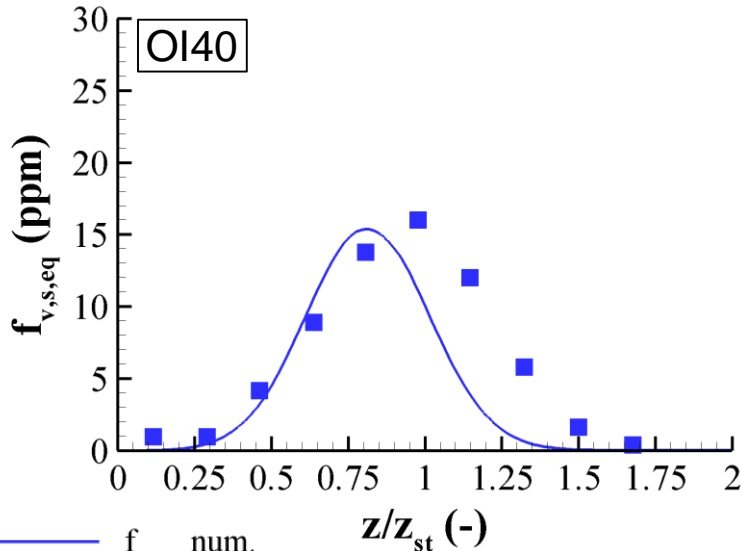


4.1 STRUCTURE DE FLAMME



4.2 QUANTITÉ DE SUIE

— $f_{v,s}$ num.
■ $f_{v,s}$ exp.



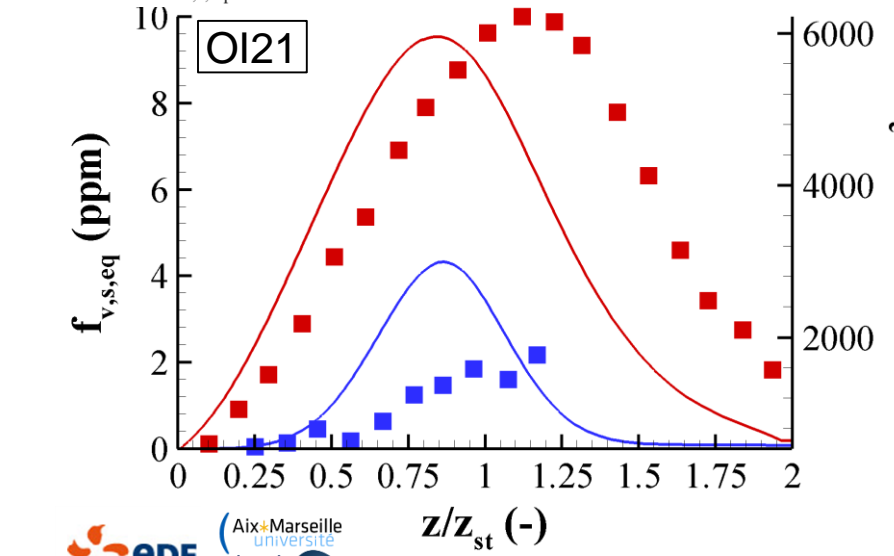
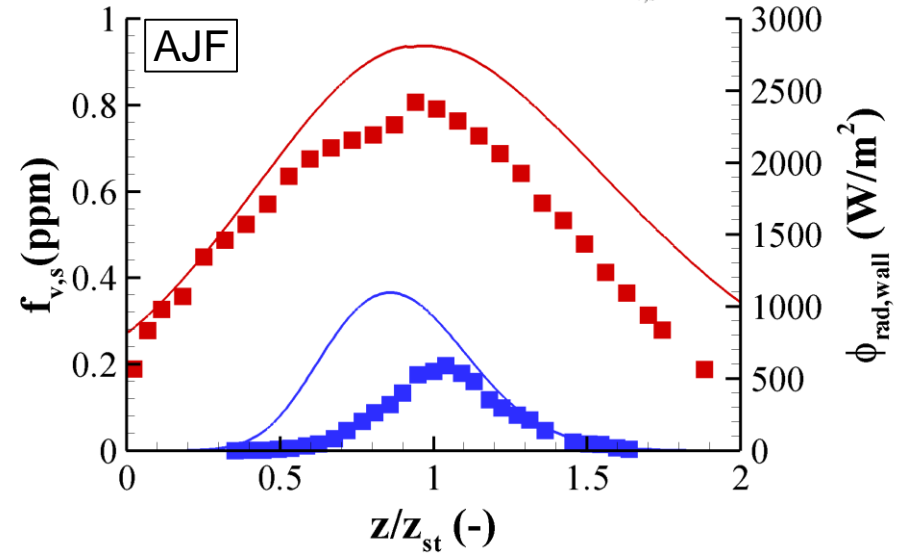
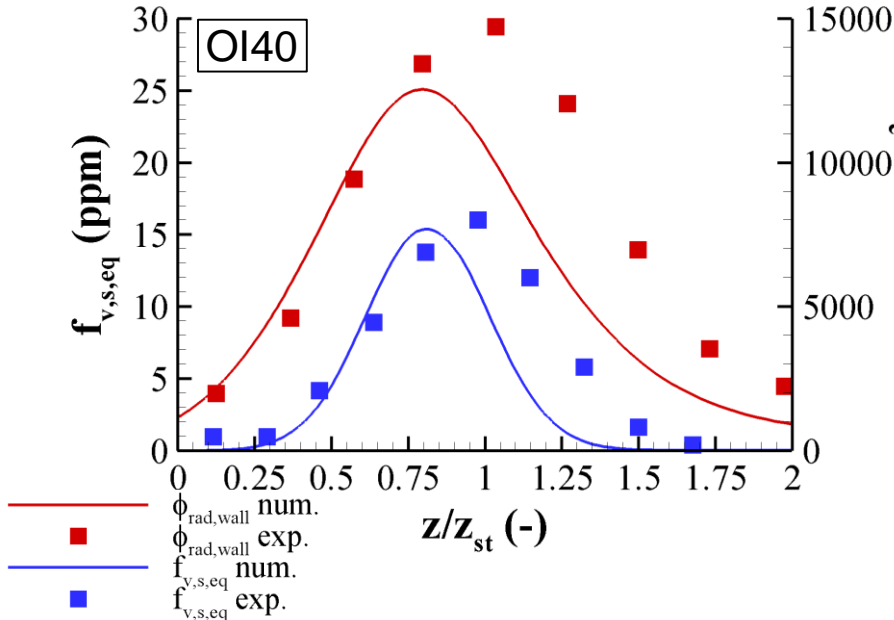
OI40 : en accord global. Pic en amont ($k-\epsilon$).
Même décroissance dans la zone d'oxydation.

OI21 : surestimation

AJF : pic surestimé et prédit en amont
(modèle de suie ne prévoit pas l'inhibition du mécanisme HACA due à l'ajout de H_2)

→ Globalement en accord. Ecart d'un facteur 2 liés aux incertitudes expérimentales

4.2 FLUX RADIATIFS

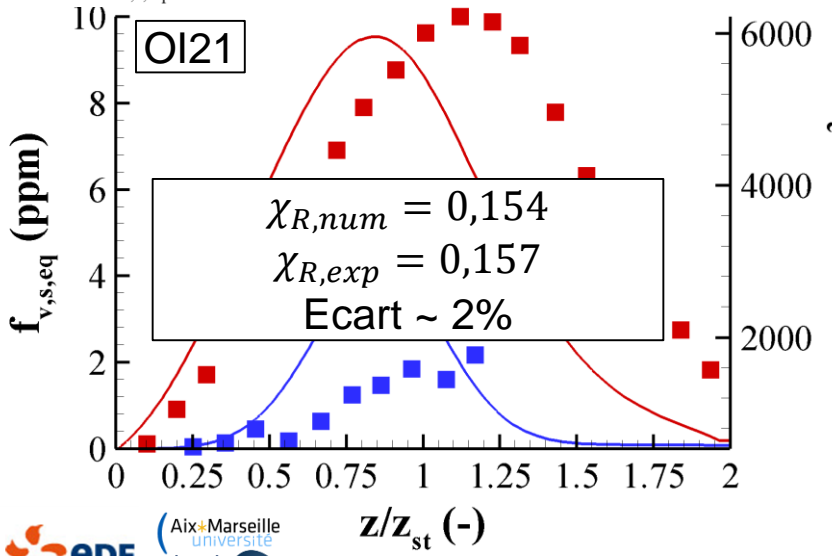
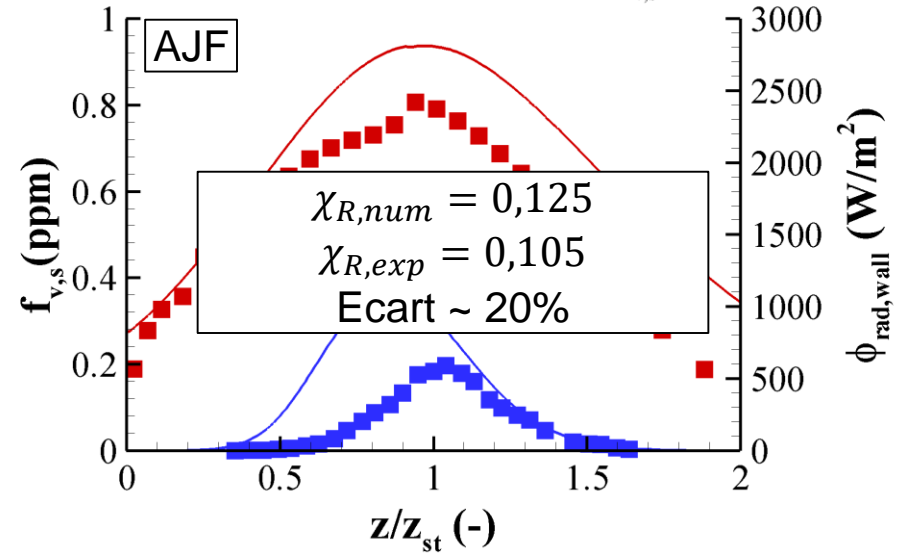
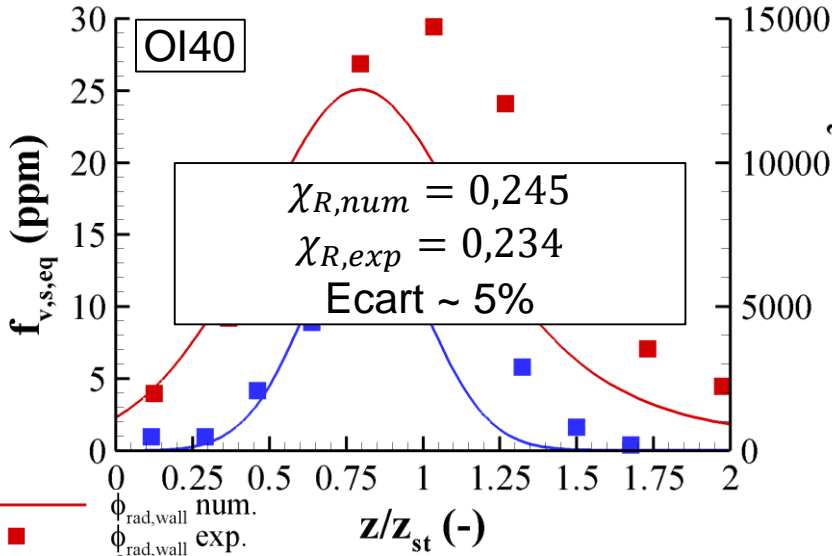


Pour les trois flammes

Ecarts entre num. et exp. similaires à ceux sur les quantités de suie. Bon accord général (~20% des mesures expérimentales)

4.2 FRACTIONS RAYONNEES

$\phi_{\text{rad,wall}}$ num.
 $\phi_{\text{rad,wall}}$ exp.
 $f_{\text{v,s}}$ num.
 $f_{\text{v,s}}$ exp.



Pour les trois flammes

Ecart < 20% : OK

5. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

- **Mise en place d'un modèle numérique permettant la simulation de flammes jet turbulentes et produisant de la suie, incluant les transferts radiatifs induits y compris les interactions rayonnement/turbulence d'émission**
- **Simulation de trois flammes de ce type pour lesquelles on a accès aux flux radiatifs**
 - Résultats en accord global avec les données expérimentales
- **Travaux en cours**
 - Etude de l'influence des interactions rayonnement/turbulence sur l'émission radiative des suies
 - Etude de l'influence des interactions rayonnement/chimie