

Simulation de transferts radiatifs dans les systèmes à hautes températures par Méthode aux Ordonnées Discrètes et solution de contrôle par Méthode Monte Carlo

Document interne HPC SA

1 Problématiques industrielles

Dans les procédés à hautes températures, le transfert de chaleur par rayonnement devient prépondérant dès lors que le milieu est semi-transparent, et ce phénomène s'avère d'autant plus important lorsque l'on considère des systèmes de grandes dimensions. Pourtant, à l'heure actuelle, le rayonnement est souvent négligé dans les calculs scientifiques parce que le transfert radiatif est impossible à appréhender de façon simple et efficace. L'erreur commise par cette hypothèse lourde est impossible à quantifier, ce qui aboutit souvent à l'établissement de champs de température faux.

Parallèlement à ce type d'approche en simulation, il existe un réel besoin pour les constructeurs de sécuriser les installations afin de pouvoir mieux définir leurs durées de vie. Pour leurs utilisateurs, l'optimisation énergétique et la maîtrise de l'émission d'espèces polluantes sont de réels enjeux économiques et environnementaux. Ceci passe par une bonne connaissance des flux thermiques aux parois et plus particulièrement des flux radiatifs.

Une bonne estimation des transferts radiatifs permet une meilleure optimisation des systèmes de combustion du fait que l'on arrive à cerner l'un des nombreux phénomènes physiques à prendre en compte (dynamique des fluides, cinétique chimique).

2 Solutions méthodologiques

La grande difficulté qui se pose lorsque l'on doit modéliser les transferts radiatifs s'explique par la nécessité de prendre en compte simultanément les dépendances spectrale, spatiale et optico-géométrique. La complexité des spectres de raies des

gaz dans l'infra-rouge (H₂O, CO₂,...) associée à la prise en compte de géométries tri-dimensionnelles ne permet pas l'utilisation de méthodes de référence, dès lors que l'on veut calculer un champ de termes sources radiatifs dans un temps raisonnable. Le calcul de ces champs par des méthodes approchées, associé à un calcul de contrôle en différents points sondes du champ permet à la fois de satisfaire l'exigence de rapidité tout en vérifiant le niveau de précision et donc la validité du modèle choisi.

La méthode approchée choisie est la méthode aux ordonnées discrètes (DOM) qui calcule le transfert radiatif selon un nombre de directions données choisies de façon optimale (quadrature angulaire). Le nombre de directions considérées, la quadrature numérique associée, ainsi que les modèles de propriétés spectrales peuvent être ajustés afin de jouer sur le temps de calcul. La résolution spatiale des équations se basant sur une approche de type Volumes Finis, elle fait intervenir un schéma de dérivation spatial efficace retenu à l'issue d'une étude comparative sérieuse [2,6]. Les résultats obtenus par DOM sont confrontés en différents points à ceux d'une méthode de Monte Carlo (MCM) associée à un modèle statistique à bandes étroites pour la description des propriétés spectrales des gaz. La méthode de Monte Carlo, parce qu'elle donne la barre d'erreur associée à une solution obtenue, est souvent employée pour donner des calculs de référence [1,3,4]. L'utilisation des DOM associées à la MCM permet donc d'obtenir des calculs de transferts radiatifs rapides et dont on connaît la fiabilité.

3 Exemples

Les exemples qui suivent sont obtenus en utilisant le même degré de précision sur le modèle spectral pour les DOM et la MCM (modèle SNB - ck). Il est à noter que des concessions effectuées sur la précision du modèle spectral utilisé par les DOM permettent de réduire considérablement les temps de calculs.

Le premier exemple présenté ici est un cas de validation du moteur de calcul DOM basé sur un maillage non-structuré par comparaison avec une solution obtenue par la méthode Monte Carlo. On considère ici une enceinte cylindrique aux parois noires (émissivité=1.) contenant un mélange de dioxyde de carbone (CO₂) et de vapeur d'eau (H₂O). Les profils de température et concentrations d'espèces radiatives sont définis par des fonctions analytiques :

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

avec $R = 0.3$ m.

La température des parois est de 800K sauf à la sortie en $x = 1.2$ m où elle est fixée à 300K.

Le calcul par DOM à été effectué avec une quadrature LC11 (96 directions discrètes

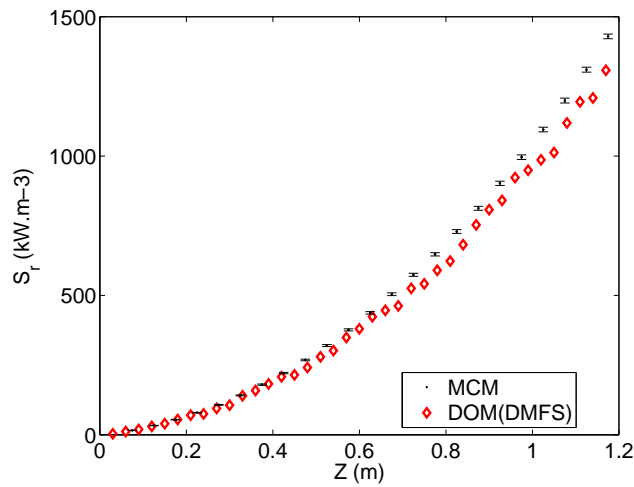


FIG. 1. Terme source radiatif le long de l'axe central du cylindre.

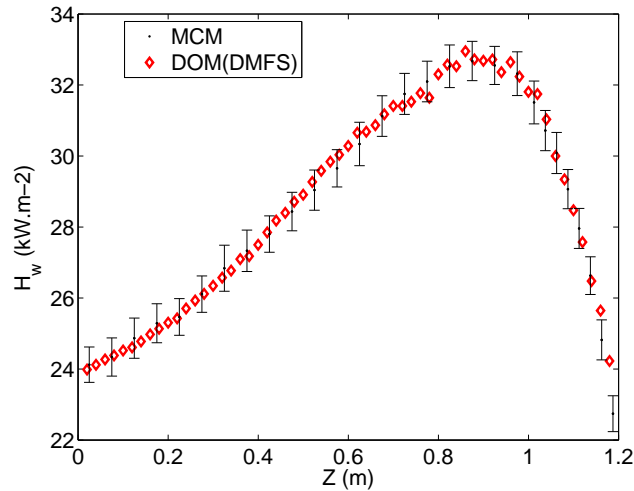


FIG. 2. Flux radiatif incident le long de la paroi (symétrie cylindrique).

pour représenter l'espace des angles solides). La comparaison des résultats avec la solution de référence (MCM) montre une bonne estimation des flux radiatifs aux parois et une mauvaise représentation du terme source radiatif vers la droite du cylindre (Fig.3, Fig.2). Dans le cas présent, cet écart est dû à un trop fort gradient de température entre le champs et la condition limite fixée en $x = 1.2m$.

L'exemple ci-après montre une application dans une géométrie complexe (chambre de combustion) à partir de profils de température et concentrations réalistes fournis par un code combustion (Fig.5, Fig.4). On obtient facilement une représentation des champs par DOM. Si il n'apparaît pas de réelle différence sur une représentation des champs de terme source radiatif obtenus en utilisant deux quadratures angulaires différentes, une comparaison à un profil de référence obtenu à partir de solutions de contrôle effectué le long d'un axe permet d'observer la correction obtenue en quadruplant le nombre de directions (temps de calcul multiplié par 4).

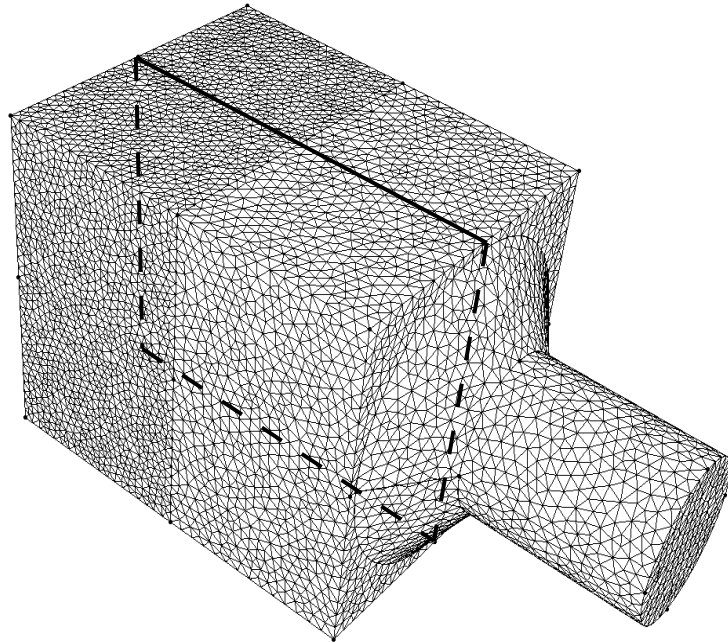


FIG. 3. Maillage de la chambre de combustion.

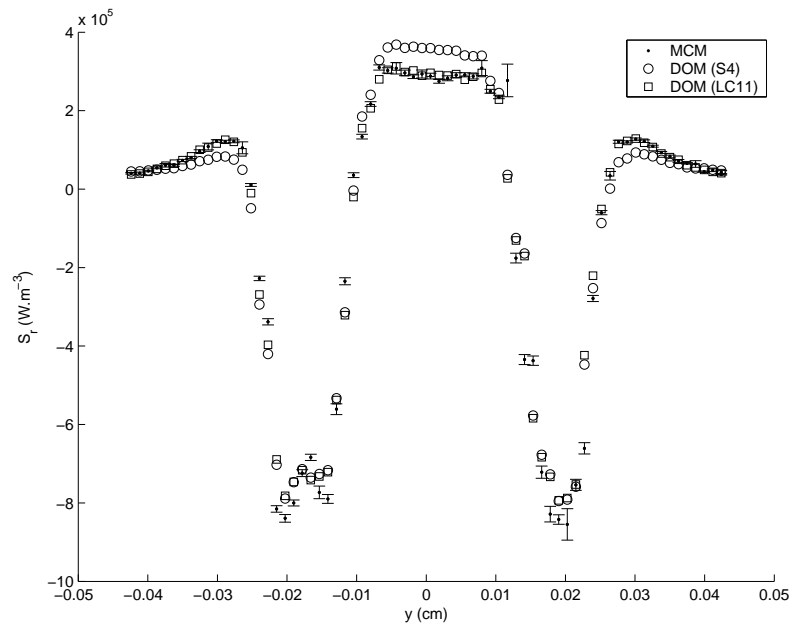
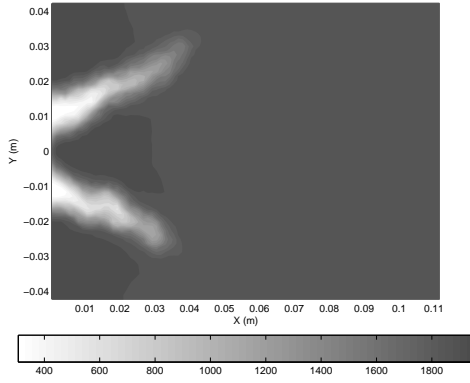
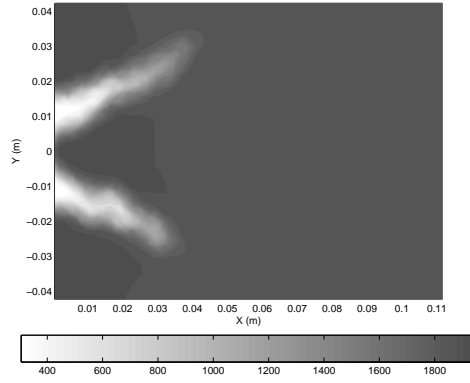


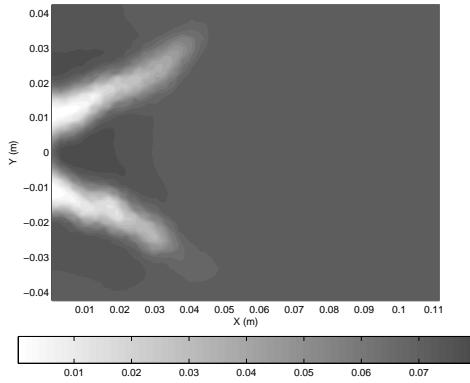
FIG. 4. Profils obtenus à partir des calculs de contrôle selon un axe situé en $x = 0.02m$



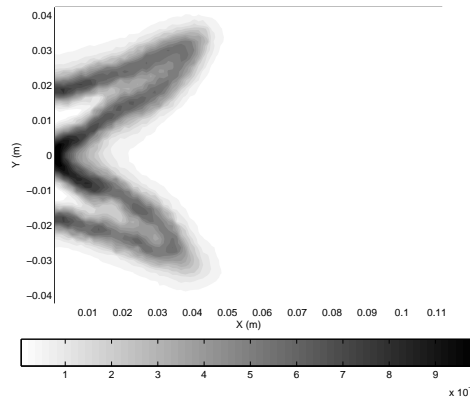
(a) Profil de température



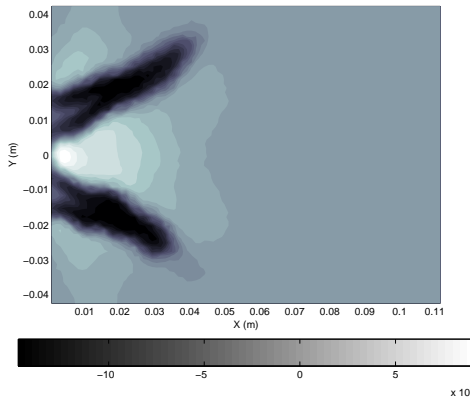
(b) Profil de concentration en H_2O



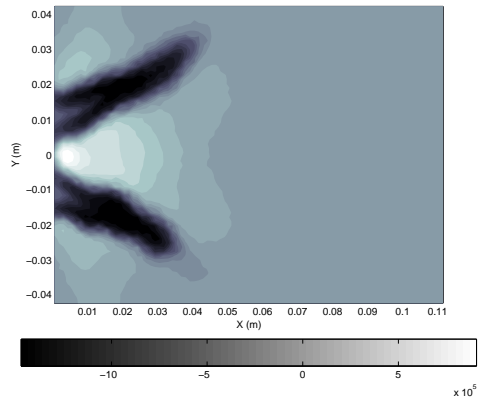
(c) Profil de concentration en CO_2



(d) Profil de concentration en CO



(e) Profil de S_r par quadrature S_4 (24 directions de calcul)



(f) Profil de S_r par quadrature LC_{11} (96 directions de calcul)

FIG. 5. Exemple de profils du terme source radiatif S_r calculés par DOM (e) et (f) à partir d'une solution instantanée provenant d'un code de combustion ((a) à (d)).

Il apparaît sur ces deux exemples que les simulations faites par DOM peuvent être très précises. Cependant, on ne les utilise à leur maximum de compromis précision-rapidité que si une solution de référence permet de valider les options du nombre de directions, de la quadrature et du modèle spectral.

Références

- [1] Coelho P.J., Perez P., El Hafi M., Radiative accurate numerical solutions in two-dimensional axisymmetric enclosures for a gas-particles mixture with varying soot volumetric fraction, in : Lybaert P., Feldheim V., Lemonnier D., Selçuk N. (Eds), Proceedings of Eurotherm73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media, Eurotherm Series 11, Elsevier, Paris, France, 2003, 161–170.
- [2] Joseph D., Coelho P.J., Cuenot B., El Hafi M., Application of the discrete ordinates method to grey media in complex geometries using unstructured meshes, in : Lybaert P., Feldheim V., Lemonnier D., Selçuk N. (Eds), Proceedings of Eurotherm73 on Computational Thermal Radiation in Participating Media, Eurotherm Series 11, Elsevier, Paris, France, 2003, 97–106.
- [3] Coelho P.J., Perez P., El Hafi M., Benchmark numerical solutions for radiative heat transfer in two-dimensional nongray sooting media, Numer. Heat Transfer B-Fund 43 (2003) 425–444.
- [4] Perez, P., El Hafi, M. Coelho, P.J. & Fournier R., Accurate solutions for radiative heat transfer in two-dimensional axisymmetric enclosures with gas radiation and reflective surfaces, Numer. Heat Transfer B-Fund 46 (2005) 39–63.
- [5] Jensen K.A., Ripoll J.F., Wray A. A., Joseph D. & El Hafi M., Radiative transfer modeling of a large pool fire by discrete ordinates, discrete transfer, ray tracing, Monte Carlo, and moment methods, Proceedings of the summer program 2004, Center for Turbulence Research, Stanford.
- [6] Joseph D., El Hafi M., Fournier R., Cuenot B., Comparison of three spatial differencing schemes in Discrete Ordinates Method using three-dimensional unstructured meshes, Int. J. Thermal Sci. 44 (9) (2005) 851–864.
- [7] Perez P., 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 hautes températures, PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- [8] Joseph D., 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.