RESUME

Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans des systèmes en combustion

L'objectif de ce travail a été d'apporter des éléments nouveaux à la compréhension des émissions polluantes. En effet, en matière d'environnement, la maîtrise des produits polluants de la combustion est l'une des préoccupations actuelles. Les cinétiques chimiques de ces polluants sont fortement dépendantes de la température et donc des transferts d'énergie qui sont dominés à grandes échelles par les échanges radiatifs. Or, ces derniers sont eux-mêmes influencés par la température et la composition chimique du mélange de suies et de gaz. La modélisation de ces systèmes est donc celle d'un couplage sensible entre cinétique chimique et rayonnement thermique. Dans la pratique, c'est avec des mécanismes chimiques de plusieurs centaines de réactions et avec des spectres infra-rouges décrits par près d'un million de raies qu'il est nécessaire de travailler. L'originalité de ce travail exploratoire est de faire reposer la méthodologie de couplage radiatif sur la méthode de Monte-Carlo. Mais cela n'est possible qu'à la suite de choix pertinents concernant la manière de formuler les transferts radiatifs. Dans ce cadre, notre travail de thèse vise au développement d'un modèle radiatif de référence, de sa réduction et de son couplage avec un modèle détaillé de combustion.

Nos solutions radiatives de références sont produites sur la base d'une formulation intégrale en échanges nets de l'équation de tranfert radiatif et d'un modèle statistique à bandes étroites (Malkmus) formulé en k-distributions pour la représentation spectrale des propriétés radiatives des gaz. Les données spectroscopiques nous ont été fournies par le laboratoire EM2C. La résolution numérique conduisant à l'estimation des termes sources volumiques est alors assurée par la méthode de Monte-Carlo. Diverses démarches de réduction de variance sont proposées qui pour la plupart s'appuient sur une exploration détaillée des relations entre les dimensions spectrales (spectre de raies) et optico-géométriques (intégrations géométriques et angulaires). Pour le couplage, toujours autour de la méthode de Monte Carlo, nous montrons comment les matrices de sensibilités des termes sources aux concentrations et températures peuvent, à faible coût numérique, être estimées en parallèle de

l'algorithme initial, ce qui nous permet d'aborder le couplage avec la combustion sur la base d'un développement de Taylor au premier ordre. Ce modèle ne peut-être utilisé que dans un domaine linéaire. Ceci est systématiquement vérifié par un calcul complet des termes sources radiatifs avec la méthode de Monte-Carlo à l'issue de chaque simulation couplée.

Au stade actuel de cette recherche, notre méthodologie de couplage a pu être mise en oeuvre pour une flamme plane de diffusion méthane-air à jets opposés (code OPPDIFF et collaboration avec le CERFACS), produite sur la base d'un mécanisme de cinétique détaillée du méthane (GRImech). Les résultats coincident avec ceux découlant de l'utilisation d'un modèle radiatif mince pour des configurations à fort taux d'étirement, et ils sont conformes à la littérature pour les très faibles taux d'étirement où la flamme s'élargit et devient optiquement plus épaisse. Les potentialités de la méthode de Monte-Carlo nous permettent de conclure sur une ébauche de ce que pourrait être le couplage du rayonnement détaillé avec la combustion dans les géométries complexes.