

THESE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE*
Discipline ou spécialité : *Energétique et transferts*

Présentée et soutenue par *Guillaume Albouze*
Le *12 mai 2009*

Titre :
Simulation aux grandes échelles
des écoulements réactifs non prémélangés

JURY

Denis Veynante	*Directeur de recherche*	*ECP, Châtenay-Malabry*	*Rapporteur*
Pascal Bruel	*Chargé de recherche*	*UPPA, Pau*	*Rapporteur*
Nasser Darabiha	*Professeur*	*ECP, Châtenay-Malabry*	*Examinateur*
Pierre Comte	*Professeur*	*LEA-CEAT, Poitiers*	*Examinateur*
Olivier Colin	*Chargé de recherche*	*IFP, Rueil-Malmaison*	*Examinateur*
Jean-François Rideau	*Ingénieur*	*MICROTURBO, Toulouse*	*Examinateur*
Thierry Poinsot	*Directeur de recherche*	*IMFT, Toulouse*	*Directeur de Thèse*
Membres invités			
Laurent Gicquel	*Chercheur sénior*	*CERFACS, Toulouse*	*Co-directeur de thèse*
Emmanuel Dufour	*Docteur*	*MBDA, Le Plessis-Robinson*	*Membre invité*

Ecole doctorale : *Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés*
Unité de recherche : *CERFACS*
Directeur(s) de Thèse : *Thierry Poinsot*

Résumé

La Simulation aux Grandes échelles (LES) est de plus en plus présentée comme un outil à part entière dans le développement des chambres de combustion des turbomachines. Dans ce contexte, les écoulements réactifs considérés sont complexes et, dans un souci de validation, la LES doit montrer ses capacités sur des configurations modèles. Le but de cette thèse est de démontrer le potentiel de la LES pour la prédiction des écoulements vrillés réactifs non prémélangés de chambres de combustion modèles.

- La LES est tout d'abord appliquée sur une configuration turbulente avec une hypothèse de prémélange parfait, afin d'étudier l'influence de la modélisation de la cinétique chimique, des modèles de combustion turbulente et de leur paramètres internes. Dans ces conditions, chacun de ces modèles montre ses avantages et désavantages.
- L'hypothèse de prémélange parfait est ensuite retirée et l'étude réalisée permet d'évaluer l'influence de la prise en compte du mélange air/carburant dans un injecteur vrillé, des pertes thermiques et des conditions limites acoustiques.
- Enfin, une chambre de combustion non prémélangée est simulée afin de démontrer les capacités du modèle de flamme épaissie sur ce type de flamme, pour lequel il n'a pas été initialement développé. Les résultats obtenus sont encourageants et démontrent, entre autres, la bonne représentation du positionnement de la flamme.

Mots clefs : Combustion partiellement prémélangée, combustion non prémélangée, écoulements vrillés, simulation aux grandes échelles, modélisation de la cinétique chimique, modélisation des interactions flamme/turbulence.

Abstract

Large Eddy Simulation (LES) is considered as the next generation tool for the development of turbomachinery combustion chambers. In this specific context, reactive flows are of very complex nature and, as a validation goal, LES needs to prove its capabilities on academic configurations. This dissertation aims at demonstrating LES capabilities for the simulation of non-premixed reactive flows that can be found in swirled academic combustion chambers.

- LES is first applied to a turbulent reacting configuration with a perfect premixing assumption. Chemical kinetics, turbulent combustion models and their internal parameters are studied. For this flow condition, each model shows his advantages and disadvantages.
- Then, the perfect premixed hypothesis is removed, allowing the evaluation of mixing, thermal losses and acoustic boundary conditions for this swirled injector.
- Finally, a non premixed combustion chamber is simulated with the dynamically thickened flame model, which was not developped for this kind of reactive flow. However, results are encouraging and demonstrate that the flame localisation is well represented by LES.

Keywords : Partially premixed combustion, non-premixed combustion, swirled flows, large-eddy simulation, chemical kinetics model, turbulent combustion model.

Table des matières

Liste des symboles **9**

1 Introduction **13**

1.1 La combustion turbulente 13

1.2 La simulation numérique de la combustion turbulente 16

1.3 Objectifs de la thèse 19

1.4 Organisation du document 27

I Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs **29**

2 Equations de conservation pour les fluides réactifs **33**

2.1 Equations et variables conservatives 33

2.2 Variables thermodynamiques 34

2.3 Equation d'état des gaz parfaits 35

2.4 Conservation de la masse en multi-espèces 36

2.5 Coefficients de transport 36

2.6 Flux de chaleur 37

2.7 Cinétique chimique 38

2.8 Modélisation des pertes radiatives 39

3 Equations pour la LES **41**

3.1 La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES) . . . 41
3.2 Equations LES . . . 42
3.3 Les modèles de sous-maille disponibles dans AVBP . . . 45

4 Modèles cinétiques et modèles d'interaction flamme/turbulence en LES 49
4.1 Le modèle de flamme épaissie . . . 49
4.2 Le modèle à PDF présumées PCM . . . 55
4.3 Réduction de cinétique chimique . . . 59
4.4 La méthode tabulée FPI . . . 67
4.5 Comparaison des schémas à 2 étapes et de FPI sur des flammes de prémélange laminaires 70

5 Approche numérique 75
5.1 Discrétisation *Cell-Vertex* . . . 75
5.2 Schémas numériques . . . 77
5.3 Modèles de viscosité artificielle . . . 77
5.4 Maillages . . . 79
5.5 Parallélisation et « speedup » . . . 80

II Flamme turbulente partiellement prémélangée 81

6 Présentation de la configuration PRECCINSTA 85
6.1 Un projet européen . . . 85
6.2 Un injecteur Turboméca . . . 85
6.3 Géométrie . . . 86
6.4 Les campagnes de mesures effectuées par le DLR . . . 89
6.5 Présentation des calculs LES . . . 91

7 LES de la chambre de combustion PRECCINSTA parfaitement prémélangée : comparaisons PCM-FPI, PCM-2 étapes et TFLES-2 étapes 93

7.1 Le maillage utilisé pour la LES de la chambre avec hypothèse de prémélange parfait . . . 93

7.2 Cas calculés . . . 98

7.3 Comparaison TFLES-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de vitesse . . . 98

7.4 Comparaison TFLES-2 étapes vs PCM-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de température et de fractions massiques . . . 102

7.5 Influence des paramètres de la méthode PCM-FPI . . . 111

7.6 Influence des paramètres du modèle de combustion turbulente TFLES . . . 122

7.7 Conclusions . . . 130

8 LES couplée mélange/combustion de la chambre de combustion partiellement prémélangée PRECCINSTA 131

8.1 Résumé . . . 131

8.2 Introduction . . . 131

8.3 LES methodology for reacting flows . . . 133

8.4 Results . . . 136

8.5 Conclusion . . . 160

III Flamme turbulente non prémélangée 161

9 LES de la chambre de combustion TECFLAM 165

9.1 The Tecflam combustion chamber . . . 165

9.2 LES methodology for non-premixed reacting flows . . . 170

9.3 Mesh, wall modelling and boundary conditions . . . 170

9.4 Results . . . 171

9.5 Conclusions . . . 183

10 Conclusion 189

Annexes **205**

A Quelques enjeux de la recherche en combustion **205**

A.1 Aspect économique 206

A.2 Aspect écologique 207

A.3 Aspect géopolitique 212

B Conditions aux limites **215**

B.1 Généralités 215

B.2 Conditions aux limites caractéristiques 216

B.3 Lois de paroi 220

C Images en couleur **223**

Liste des symboles

Lettres romaines

$\mathcal{M}_{kj}$	réactif et produit
$\mathcal{Q}_j$	variable d'avancement
$\mathcal{R}$	constante universelle des gaz parfaits
$\mathcal{S}$	Contraintes de la structure
$\triangle$	taille du maillage et du filtre LES
A	constante pré-exponentielle
$a_{p,k}$	coefficient d'absorption moyen de Planck
a_T	taux d'étirement
c	vitesse du son
C_p	capacité calorifique à pression constante
C_{S_F}	constante du modèle de Smagorinsky filtré
C_S	constante du modèle de Smagorinsky
C_v	capacité calorifique à volume constant
C_w	constante du modèle WALE
d_w	épaisseur de la paroi de la chambre
D_{ij}	coefficient binaire
D_k	diffusivité dans le mélange
D_{th}	diffusivité thermique
E	fonction d'efficacité
E	énergie par unité de masse
E_a	énergie d'activation
e_s	énergie sensible
F	épaississement
g	gravité
g_{ij}	gradient de vitesse résolu
H	enthalpie
h_{CPU}	heure de calcul d'un processeur
h_s	enthalpie sensible
$J_{i,j}$	flux diffusif
K_{eq}	constante de la réaction inverse
$K_{f,j}$	constante de la réaction directe
$K_{f,j}$	constante de la réaction inverse
K_X	coefficient de relaxation pour X
M	nombre de réactions
$m_{\dot{X}}$	débit de X
N	nombre d'espèces
N_c	nombre de cellules dans le front de flamme
$N_{F,O}$	index de Takeno
P	pression
P_0	pression de référence
Q	taux de réaction global
Q_r	pertes thermiques par rayonnement
Q_w	pertes thermiques par convection
Q_{Total}	pertes thermiques totales
Q_{HR}	chaleur massique de réaction
q_i	flux de chaleur
R	résistance thermique
S	entropie
s	entropie sensible

S_F	surface débitante de fuel
$S_{i,j}$	tenseur des vitesses de déformation
S_L	vitesse de flamme laminaire
S_T	vitesse de flamme turbulente
T	température
T_0	température de référence
T_{AD}	T adiabatique de fin de combustion
t_b	temps de combustion complète
u	2ère composante de vitesse
V	vecteur vitesse
v	2ème composante de vitesse
V^c	vitesse de diffusion corrective
V^k	vitesse de diffusion
V_{cell}	volume de la cellule
W	masse molaire
w	3ème composante de vitesse
X	fraction molaire
Y	fraction massique
Z	fraction de mélange
Z_{ST}	fraction de mélange stoechiométrique
$\mathbf{F}$	tenseur des flux
$\mathbf{f}$	2ère composante du tenseur des flux
$\mathbf{g}$	2ème composante du tenseur des flux
$\mathbf{h}$	3ème composante du tenseur des flux
$\mathbf{s}$	vecteur des termes sources
$\mathbf{w}$	vecteur des variables conservatives

Lettres grecques

α	constante de la fonction d'efficacité
β	constante de la fonction d'efficacité
Δ_e	taille du filtre
$\delta_{i,j}$	indice de Kronecker
δ_l	épaisseur du front de flamme
δ_{Th}	épaisseur thermique de la flamme
$\dot{\omega}_k$	taux de réaction
$\dot{\omega}_T$	dégagement de chaleur
Γ	étirement de sous-maille
γ	exposant polytropique
κ	constante de Kármán
λ	conductivité thermique
μ	viscosité dynamique
ν''_{kj}	coefficient stoechiométrique des produits
ν'_{kj}	coefficient stoechiométrique des réactifs
ν_{kj}	coefficient stoechiométrique global
ν_t	viscosité turbulente de sous-maille
Ω	fonction de présence
$\overline{\Sigma}$	densité de surface de flamme
ϕ	richesse
ϕ'_X	contribution aux fluctuations de richesse
ρ	densité
σ	constante de Stefan-Boltzman
$\tau_{i,j}$	tenseur des contraintes
Ξ	facteur de plissement

Nombres sans dimension

D_a	nombre de Damköler
L_e	nombre de Lewis
N_u	nombre de Nusselt
P_r	nombre de Prandtl
R_e	nombre de Reynolds
S	nombre de Swirl
S_t	nombre de Strouhal

S_c nombre de Schmidt

Opérateurs de moyenne

$\langle\cdot\rangle$ grandeur filtrée

$\langle\cdot\rangle_s$ grandeur de sous-maille

$\overline{f}$ moyenne de Reynolds

$\widetilde{f}$ moyenne de Favre

Indices

F relatif au carburant

i composante dans la direction i

j relatif à la réaction j

k relatif à l'espèce k

O relatif à l'oxydant

w grandeur au mur

Exposants

$'$ relatif à la fluctuation

$+$ unité au mur

0 état de référence

I *Inviscid*, partie non visqueuse

m valeur molaire

t contribution de sous-maille

V partie visqueuse

~ valeur tabulée

Abréviations

BC Boundary Condition

CFD Computational Fluid Dynamics

CSD Computational Solid Dynamics

DNS Direct Numerical Simulation

DTF Dynamically Thickened Flame

FPI Flame Prolongation of ILDM

ILDM Intrinsic Low Dimensional Manifold

LDV Laser Doppler Velocimetry

LES Large Eddy Simulation

LW Lax-Wendroff

MPI Message Passing Interface

NSCBC Navier-Stokes Characteristic B.C.

PCM Presumed Conditional Moments

PDF Probability Density Function

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

SGE Simulation aux Grandes Echelles

SGS Sub-Grid Scale

SND Simulation Numérique Directe

TF Thickened Flame

TFLES Thickened Flame model for LES

THI Turbulence Homogène Isotrope

TTGC Two-step Taylor-Galerkin Colin

Chapitre 1

Introduction

Ce travail de thèse concerne **la simulation aux grandes échelles** des **écoulements réactifs non prémélangés**.

Les écoulements réactifs non prémélangés, et plus généralement la combustion turbulente, sont décrits dans un premier temps en section 1.1. La simulation numérique de la combustion turbulente, dont la simulation aux grandes échelles est un des outils, est décrite par la suite en section 1.2. Puis, les objectifs de la thèse sont listés en section 1.3. Enfin, l'organisation du document est présentée en section 1.4.

1.1 La combustion turbulente

1.1.1 Modes de combustion élémentaires

Il existe un nombre important de techniques menant à la combustion d'un carburant par un oxydant. En se limitant à la combustion gazeuse, deux modes de combustion élémentaires peuvent être identifiés : la combustion prémélangée et la combustion non prémélangée. Entre ces deux modes de combustion élémentaires se trouvent différents modes de combustion intermédiaires, comme le prémélange partiel ou la combustion stratifiée.

- **La combustion prémélangée** est un mode de combustion où carburant et oxydant sont prémélangés avant d'atteindre le front de flamme. Ce mode est souvent utilisé en régime pauvre (le carburant est en quantité inférieure aux conditions stœchiométriques), permettant ainsi d'augmenter le rendement du système de combustion et de réduire la production d'oxydes d'azote, polluant très nocif dont on veut limiter la production. En contrepartie, les flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser, nécessitant l'utilisation de dispositifs complexes d'accrochage de flamme. De même, la question du stockage d'un mélange air/carburant dans la gamme de flammabilité est prépondérante et n'est pas envisageable dans un contexte industriel.
- **La combustion non prémélangée** est un mode de combustion où carburant et oxydant sont injectés par deux courants différents, le front de flamme se positionnant à la rencontre des deux lignes de

courant. Ce mode de combustion, qui est donc plus facile à maîtriser, a le désavantage de former plus de polluants, du fait des hautes températures atteintes dans le front de flamme.

– **La combustion partiellement prémélangée** est un mode de combustion intermédiaire retrouvé fréquemment dans les applications industrielles. Pour des raisons de sécurité, l'oxydant et le carburant sont stockés séparément (l'oxydant est par ailleurs bien souvent pris dans l'environnement extérieur et n'est pas stocké par le système de combustion). L'oxydant et le carburant sont donc injectés par deux courants différents, en amont du front de flamme, et sont supposés se mélanger avant d'atteindre le front de flamme. Mais il arrive très fréquemment que le mélange ne soit pas parfait et que des hétérogénéités de mélange atteignent le front de flamme.
Dans un autre sens, il est envisageable que les deux courants d'un système non prémélangé se mélangent avant d'atteindre le front de flamme. Ainsi le mode de combustion n'est plus non prémélangé mais partiellement prémélangé.

TAB. 1.1 - *Résumé des avantages et inconvénients principaux des trois modes de combustions présentés.*

Mode de combustion	Avantages	Inconvénients
Prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre)	Instabilités de combustion, stockage du mélange
Non prémélangé	Stabilité de la flamme, stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Production d'oxydes d'azote
Partiellement prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre), stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Instabilités de combustion, hétérogénités de mélange

1.1.2 Applications académiques expérimentales de la combustion turbulente : exemple du TNF workshop

Le TNF workshop (Turbulent Non-premixed Flames) a pour objectif de développer l'interaction entre expérimentateurs et numériciens dans le domaine de la combustion turbulente. Plusieurs flammes académiques, mesurées expérimentalement, servent de base au développement de modèles numériques. La figure 1.1 cartographie simplement les différentes flammes étudiées expérimentalement en fonction du mode de combustion et du nombre de Damköhler. La table 1.2 détaille toutes les flammes cartographiées dans la figure 1.1.

Malgré leur grand intérêt, les flammes TNF ne couvrent pas tous les problèmes rencontrés en combustion : les flammes TNF ne sont pas confinées, ni soumises à des instabilités de combustion. Dans cette thèse, on étudiera deux flammes : une venant du TNF workshop (référence o dans la table 1.2, [8, 11–14, 62, 69–71, 87]) et une autre plus proche d'une flamme de chambre swirlée réelle, soumise à des instabilités, issue des travaux du programme européen Preccinsta [47, 88, 93, 129].

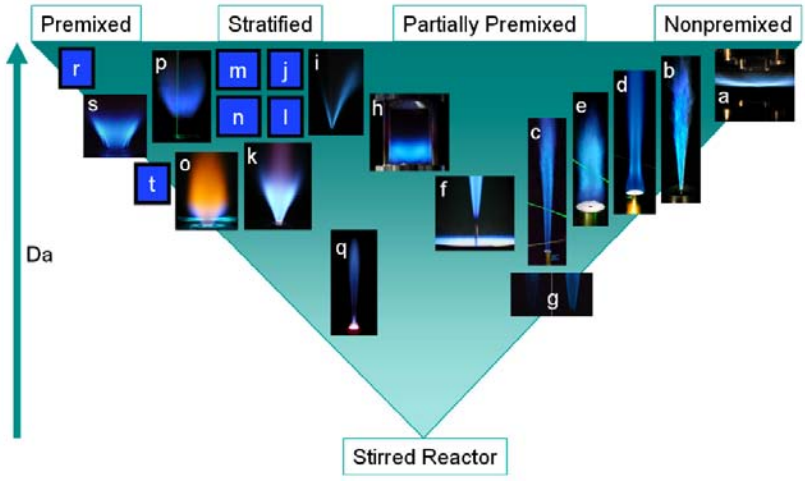


FIG. 1.1 - *Carte simplifiée des modes et régimes de combustion de différentes flames académiques, mesurées dans le cadre du TNF workshop [58, 59, 79, 103, 123, 148]. Les lettres font référence à la table 1.2.*

TAB. 1.2 - *Liste des flammes expérimentales cartographiées sur la Fig. 1.1.*

a	TUD turbulent opposed jet burner.
b	DLR simple jet flames of CH4/H2/N2 in air
c	Sandia piloted CH4/air air jet flames
d	Sydney bluff-body flames of CH4/H2
e	Sydney swirl/bluff-body flames
f	Berkeley/Sydney nonpremixed lifted jet flames in vitiated H2/air coflow
g	Adelaide nonpremixed jet flames in vitiated coflow (low O2 levels)
h	DLR model gas turbine combustor (steady and unsteady cases)
i	Cambridge stratified slot burner, CH4/air V-flame
j	CORIA-INSA stratified V-flame
k	TUD piloted annular stratified burner
l	ORACLES burner
m	Cambridge stratified swirl burner
n	Twente stratified swirl combustor (steady and oscillating cases)
o	TECFLAM premixed swirl burner
p	TUD premixed low-swirl burner
q	Sydney piloted premixed jet in vitiated coflow
r	Place holder for various premixed flames with low u'/SL
s	Sandia premixed swirling dump combustor
t	Place holder for premixed flames, higher u'/SL

1.1.3 Applications industrielles de la combustion turbulente

- Dans le cas des **turbines aéronautiques**, le carburant est, la plupart du temps, injecté sous forme liquide (spray). Ceci mène inévitablement à un mode de combustion de type prémélange partiel. L'utilisation de jets de dilution peut aussi mener à des flammes non prémélangées.
- Dans le cas des **turbines de production d'énergie**, la combustion est souvent prémélangée. A ce titre, de faibles hétérogénéités de mélange peuvent influencer fortement la performance des turbines, mettant en lumière l'importance d'un bon prémélange.
- Dans le cas des **moteurs à combustion interne** de type "Diesel", le combustible est souvent injecté sous forme de spray, menant à des régimes de combustion de type prémélange partiel ou combustion stratifiée. A l'inverse, dans le cas des moteurs de type HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), le mélange air-carburant est mélangé de la manière la plus homogène possible (comme dans les moteurs à essence) et est comprimé assez fortement pour atteindre le point d'auto-allumage. De simples hétérogénéités de mélange influencent alors très fortement les performances du moteur.

1.2 La simulation numérique de la combustion turbulente

Pendant de nombreuses années, les études expérimentales ont servi à développer et valider les méthodes de simulation numérique. De nos jours, la simulation numérique est devenue suffisamment développée pour être utilisé en parallèle des essais expérimentaux, et devient ainsi un outil prédictif.

Mais la simulation numérique n'apporte pas toujours les réponses aux problèmes des constructeurs. Lorsqu'on s'intéresse aux écoulement turbulents et réactifs dont la complexité mène aux instabilités qui ont été évoquées, il faut considérer un large spectre d'échelles à la fois en espace et en temps et autoriser de nombreux phénomènes physiques [110, 160].

Il existe trois principales approches de résolution numérique des phénomènes physiques.

1.2.1 RANS

Historiquement la plus ancienne, la résolution des équations moyennées (RANS pour Reynolds Average Navier-Stokes [38, 99, 111]) se contente de décrire le comportement moyen de l'écoulement mais nécessite la modélisation de tous les effets instationnaires. Bien adaptée au dimensionnement des moteurs, elle a toujours été en peine lorsqu'il a été question d'aborder les instabilités de combustion.

1.2.2 DNS

Au contraire, la simulation numérique directe (DNS pour Direct Numerical Simulation) consiste à calculer toutes les structures de l'écoulement sans modélisation autre que le choix d'un schéma cinétique

et la description du transport moléculaire [91,109,158]. Malheureusement, cette approche est numériquement extrêmement coûteuse (la qualité des résultats ne doit pas être oblitérée par la diffusion numérique du code de calcul) et limitée à de faibles nombres de Reynolds (qui contrôlent la gamme des tailles de structures présentes dans l'écoulement). Cette approche est donc restreinte à des situations académiques simples, malgré la puissance des machines de calcul disponibles aujourd'hui, mais constitue un outil irremplaçable pour étudier précisément certains phénomènes fondamentaux [104, 106, 112, 158] et aider au développement de modèles [4, 25, 34, 55, 92, 130, 153, 154]. Il est hors de question de simuler un foyer aéronautique ou industriel avec une telle méthode.

1.2.3 LES

Relativement récente, la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) apparaît comme intermédiaire entre la RANS et la DNS [76,89,101,131]. Il s'agit cette fois de calculer complètement les plus grandes structures turbulentes présentes dans l'écoulement comme en DNS tandis que seul l'effet des plus petites structures est modélisé comme en RANS. Nettement plus coûteuse que la RANS (il faut calculer un écoulement instationnaire, tri-dimensionnel, et renoncer aux simplifications usuelles de la RANS telles que la symétrie, la bidimensionnalité, etc), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe et donne accès à une précision jamais égalée avec la RANS [18, 49, 119, 120, 138]. L'échelle de coupure est en principe choisie dans la zone inertielle du spectre de turbulence en raison des hypothèses faites pour développer les modèles. L'impact des modèles sur le résultat final est logiquement moindre qu'en RANS. Enfin, il faut surtout retenir que couplée à des études acoustiques, la LES apparaît comme un outil adapté à l'études des phénomènes d'instabilités de combustion [129, 133, 137, 139, 155].

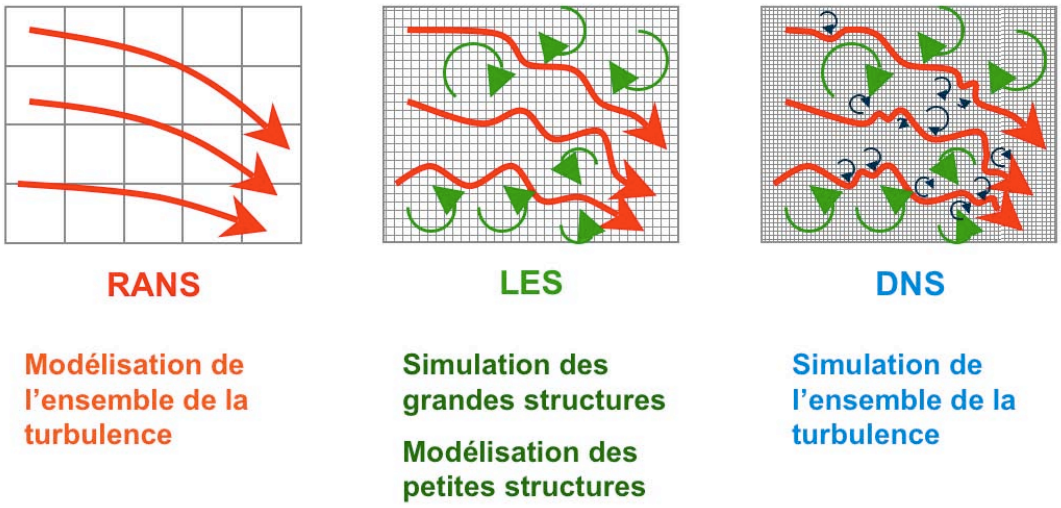


FIG. 1.2 - *Comparaison entre simulation numérique directe (DNS), résolution des équations moyennées (RANS) et simulations aux grandes échelles (LES).*

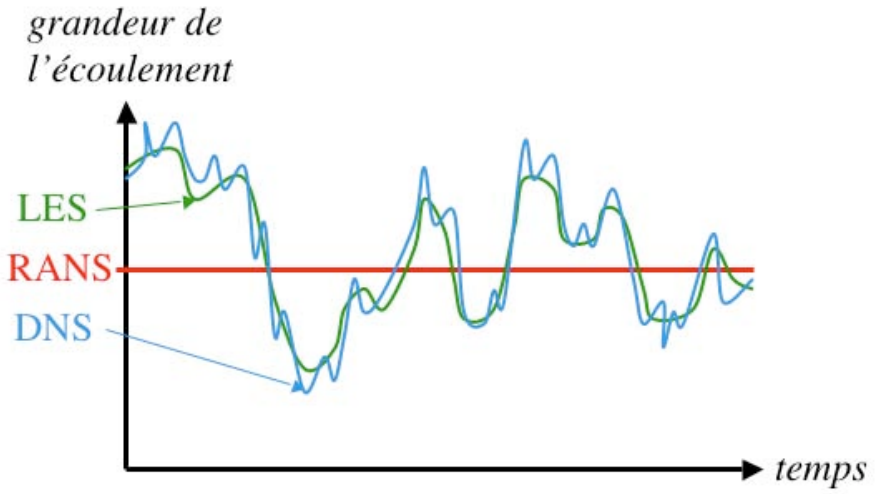


FIG. 1.3 - *Représentation temporelle du degré de détail des différentes méthodes de simulation*

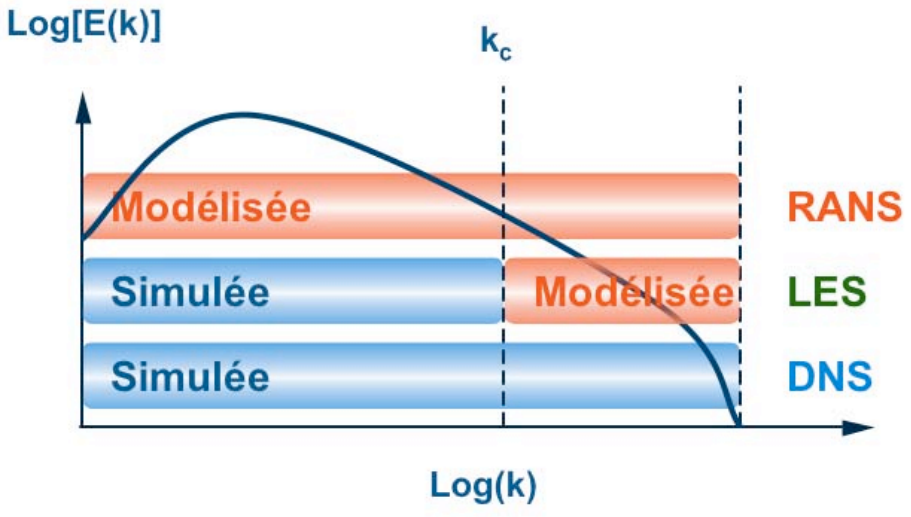


FIG. 1.4 - *Représentation spectrale où kc est le nombre d'onde de coupure de la LES.*

1.3 Objectifs de la thèse

Le cadre général de cette étude est l'étude des capacités de la simulation aux grandes échelles sur deux configurations turbulentes réactives : PRECCINSTA et TECFLAM.

1.3.1 Configurations turbulentes

PRECCINSTA est la première configuration turbulente réactive étudiée (Fig. 1.5 et 1.6). Il s'agit d'une flamme confinée dans une chambre de combustion de section carrée. L'injecteur utilisé est manufacturé par la société TURBOMECA et représentatif de ceux utilisés dans les chambres de combustion d'hélicoptère. Cette configuration, prévue pour comprendre, prédire et contrôler les causes des instabilités de combustion dans les chambres prémélangées a été étudiée expérimentalement à différents régimes et de nombreuses données expérimentales sont disponibles. Celles-ci permettent par exemple, de comparer des modèles de combustion.

TECFLAM est la seconde configuration turbulente réactive étudiée (Fig. 1.7 et 1.8). Il s'agit d'une flamme extraite du TNF workshop. La chambre de combustion, de grandes dimensions, est peu soumise aux instabilités de combustion. Dans cette configuration, le méthane et l'air sont injectés séparément, permettant d'étudier des régimes de prémélange partiel, voire de diffusion. Comme PRECCINSTA, cette configuration est très détaillée expérimentalement.

Ces deux chambres ont plusieurs points communs :
- la carburant utilisé est du méthane
- l'écoulement d'air passe par un plenum, puis est mis en rotation par des vrilles (swirler) avant d'être injecté dans la chambre de combustion

Mais ces deux chambres ont aussi plusieurs différences :
- PRECCINSTA est une chambre théoriquement prémélangée, tandis que TECFLAM est théoriquement en diffusion. Nous montrerons au cours de cette thèse que l'on peut parler de prémélange partiel pour chacune.
- TECFLAM est environ 5 fois plus puissante que PRECCINSTA (table 1.3). Il est intéressant de noter que ces deux configurations académiques sont des flammes relativement puissantes. A titre d'exemple, la moins puissante des deux, PRECCINSTA, délivre la puissance nécessaire au chauffage d'une quinzaine d'appartements en haute-Garonne.
- TECFLAM est environ 10 fois plus longue et 5 fois plus large que PRECCINSTA

Les comparaisons LES / mesures expérimentales ne se limitent pas aux champs de vitesses, mais comprennent aussi les profils de température et de fractions massiques des espèces principales ainsi que des nuages de points (représentatifs de chacune des mesures laser) et les fonctions de densité de probabilité associées.

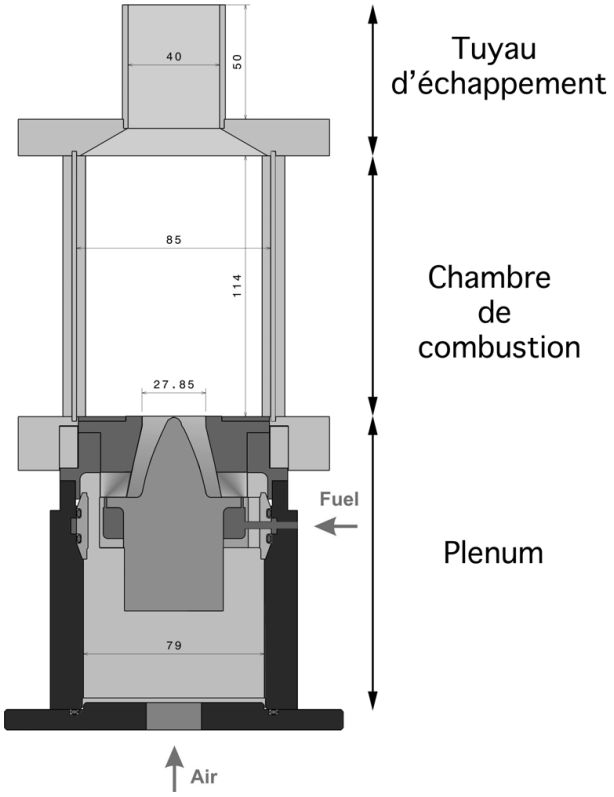


FIG. 1.5 - *Configuration PRECCINSTA : dessin du plénum, de l'injecteur, de la chambre de combustion et du tuyau d'échappement (côtes en millimètres).*

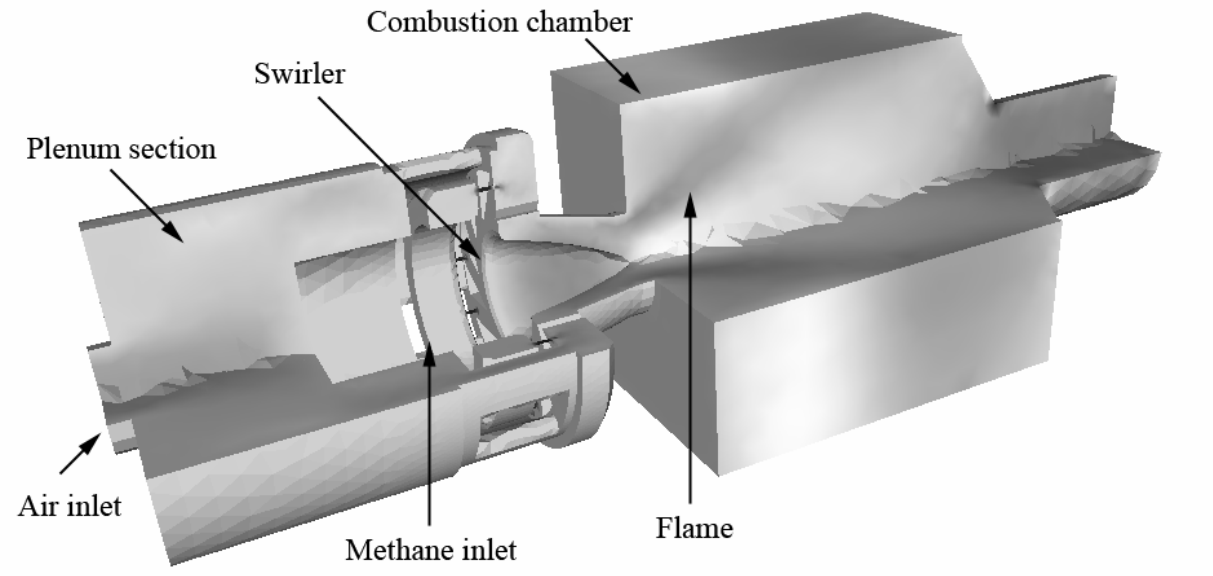


FIG. 1.6 - *Vue générale de la chambre de combustion PRECCINSTA.*

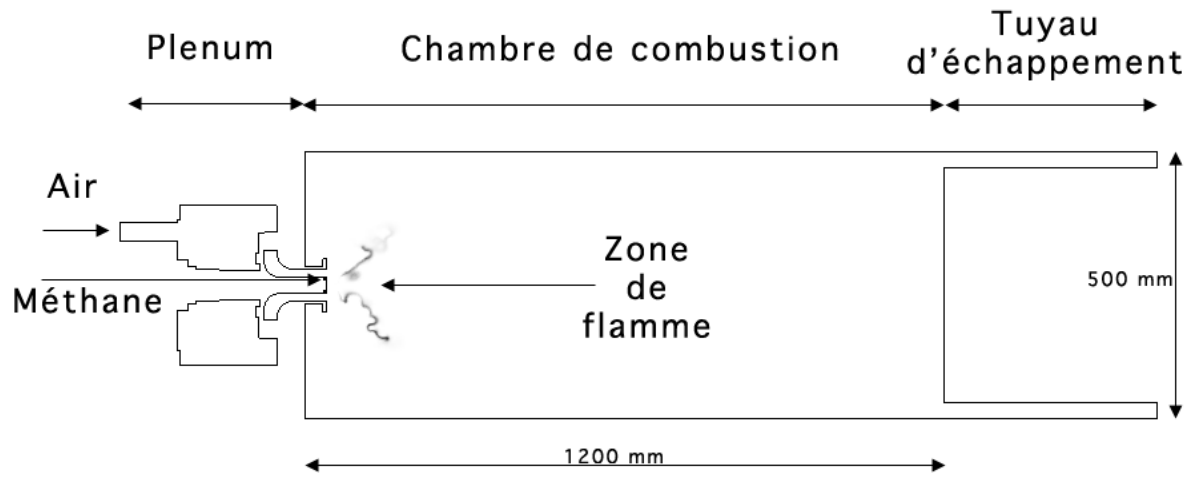


FIG. 1.7 - *Vue générale de la chambre de combustion TECFLAM.*

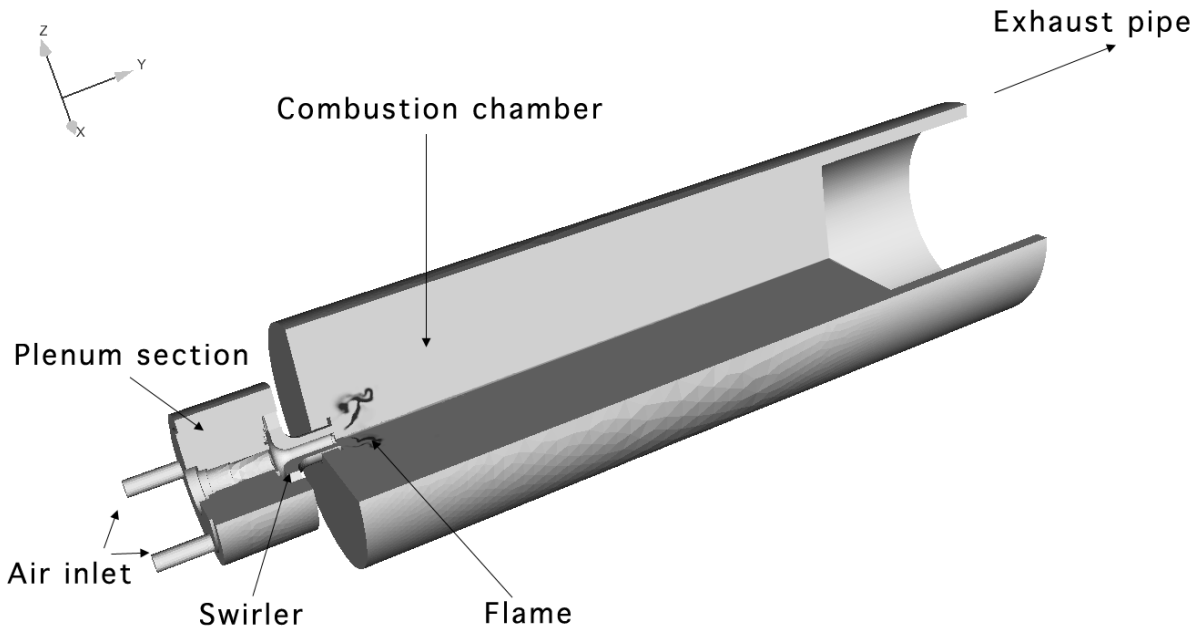


FIG. 1.8 - *Vue générale de la chambre de combustion TECFLAM.*

Configuration	Puissance approximative [kW]	Richesse globale [-]	Débit de méthane [kg/sec]	Débit d'air [kg/sec]	Grandeurs mesurées
PRECCINSTA	27	0.75	$5.383.10^{-4}$	0.012237	Vitesses
PRECCINSTA	30	0.83	$5.983.10^{-4}$	0.012237	Température et fractions massiques
TECFLAM	150	0.808	$2.833.10^{-3}$	0.0602	Vitesses, température et fractions massiques

TAB. 1.3 - *Caractéristiques principales des différentes flammes calculées.*

1.3.2 Modélisation de la combustion turbulente

La modélisation de la combustion turbulente reste la difficulté centrale dans les codes de LES : avec l'arrivée des machines massivement parallèles [147] et de méthodes numériques d'ordre élevé sur maillage non structuré [82, 92, 135], la limitation principale des codes LES en combustion n'est plus le temps CPU ou la capacité à prendre en compte des géométries complexes, mais la qualité des modèles de combustion turbulente qui doivent répondre à plusieurs critères :

- Prévoir le rendement des chambres de combustion : il s'agit bien sûr d'un critère de base mais la plupart des codes, même RANS, en sont capables puisqu'il suffit de prévoir que toute la combustion est terminée avant de quitter la chambre pour la plupart des régimes.
- Pouvoir incorporer la prévision des espèces minoritaires polluantes comme CO ou NO : il s'agit là d'un défi scientifique beaucoup plus complexe. Prévoir NO, par exemple, nécessite de connaître la distribution du champ de température et d'espèces dans la chambre, ainsi que ses fluctuations. La LES est ici beaucoup plus prometteuse que le RANS même si son potentiel reste à démontrer dans des cas réels.
- Rester économiques en terme de temps CPU par rapport au reste du calcul LES : les méthodes pdf Monte Carlo [114, 116], par exemple, restent encore trop onéreuses, même en LES. De même, utiliser une méthode de type CMC (Conditional Moment Closure) [9, 65, 66, 94] est difficile en LES.
- Rester économiques en terme de mémoire : sur machines massivement parallèles et mémoire distribuée, les méthodes de tabulation de la chimie se heurtent à ce problème depuis longtemps [39, 40, 50]. Non seulement le temps CPU peut être un problème quand la chimie doit être tabulée (par exemple avec ILDM (Intrinsic Low-Dimension Manifolds) [81] ou ISAT [81, 117, 142]) mais la mémoire nécessaire au stockage des tables sur chaque processeur du calculateur parallèle est aussi un problème. Une solution peut alors être de chercher des similarités dans les tables afin de réduire leur dimension [43, 125, 159].
- Pouvoir être compatibles avec des codes compressibles et avec le calcul d'ondes acoustiques, nécessaires au calcul des instabilités de combustion [21, 111, 133]. De nombreux modèles de combustion (G-equation par exemple [99, 102]) sont parfaitement adaptées au calcul à faible nombre de Mach mais s'étendent difficilement au calcul compressible.
- Etre compatibles avec des modèles de rayonnement ou de pertes thermiques à la paroi. Les méthodes de tabulation comme FPI (Flame Prolongation of ILDM) nécessitent d'ajouter une variable (l'enthalpie totale) pour prendre en compte des pertes thermiques mais la façon de construire la table dans de tels cas reste un sujet controversé (réacteurs homogènes avec pertes thermiques, flammes monodimensionnelles non adiabatiaques ?).
- Pouvoir incorporer des modèles pour le diphasique.

Au cours de cette thèse, nous avons abordé la plupart de ces questions (sauf le diphasique) à travers les deux méthodes de base que sont les modèles TFLES et PCM-FPI (PCM : Presumed Conditional Moments), décrits dans le chapitre 4. Ces deux techniques ont été éprouvées depuis longtemps : elles combinent toutes deux une approche pour la cinétique chimique (schéma réduit pour TFLES, tabulation pour FPI) et un modèle pour l'interaction flamme turbulence (le modèle de flamme épaissie inspiré des travaux initiaux de O'Rourke [98], un modèle de pdf présumé à deux variables pour PCM) :

- TFLES a été employé dans de très nombreuses configurations de brûleurs industriels : prémélangé parfaitement [27, 138], partiellement prémélangé [74, 75, 144], diffusion [17, 19, 133, 140, 141], flammes diphasiques [16], flammes avec pertes de chaleur par rayonnement et convection [133, 140], flammes supercritiques (thèses en cours de T. Schmitt au CERFACS et L. Pons à EM2C) et flammes dans des écoulements rapides comme les statoréacteurs [127]. On notera que les flammes de diffusion étudiées jusqu'ici avec TFLES correspondent à des écoulements swirlés de type turbine à gaz où un prémélange important est produit avant la flamme et où la combustion n'est pas faite dans un régime de diffusion pure. Il ne s'agit donc pas de véritable validation pour un modèle qui n'est d'ailleurs pas construit pour les flammes de diffusion pures, même si sa version dynamique devrait être capable de calculer des flammes de diffusion avec une précision raisonnable. Le CERFACS développe actuellement un ensemble de tests académiques sur des applications de TFLES en flamme de diffusion pure en calculant, en particulier, des flammes laminaires de diffusion avec épaississement. Ces recherches de type test 'a priori' n'ont pas encore abouti et dans cette thèse, on se limitera à des tests a posteriori, c'est à dire à appliquer le modèle dynamique existant à des configurations de flamme de diffusion et à confronter les résultats aux données expérimentales. Pour ce faire, il a fallu choisir une flamme de diffusion académique et comme TFLES n'avait pas encore été testé sur des flammes du workshop TNF (http ://www.ca.sandia.gov/TNF/abstract.html) [6, 15, 64, 103, 126, 148], c'est la configuration TECFLAM qui est devenue un des objectifs de cette thèse.
- PCM FPI a déjà été, lui aussi, appliqué à de nombreuses configurations et a montré son potentiel [31, 41, 47]. La capacité de FPI à prédire les espèces polluantes en fait une méthode attractive. Le fait que PCM soit une méthode qui peut s'appliquer à tout régime de combustion (comme TFLES) est aussi un atout évident de cette approche : dans la plupart des applications, le régime réel de combustion est inconnu et fait partie de la question à résoudre. On montrera par exemple que même sur une configuration comme PRECCINSTA qui était supposée parfaitement prémélangée, la réalité était toute autre et qu'un modèle partiellement prémélangé était indispensable. Enfin, la tabulation des taux de réaction assure naturellement à PCM FPI une stabilité numérique intéressante : les taux de réaction ne peuvent pas prendre de valeurs aberrantes (comme ce peut être le cas en TFLES), même si les valeurs des espèces ou de la température sortent de la gamme possible puisque les taux sont lus dans une table et restent donc toujours physiques.

Le monde de la combustion turbulente est ainsi fait que la plupart des groupes travaillant dans le domaine utilisent une approche et la développent avec comme objectif principal de démontrer que cette méthode est la meilleure. Au cours de cette thèse, un chemin différent a été choisi. Au lieu de développer une nouvelle méthode, on a pris les deux modèles existants les plus aboutis dans AVBP (TFLES et PCM FPI) et on a les a comparés et appliqués à des configurations de flammes laminaires et turbulentes afin de les comparer objectivement. Il s'agit d'un travail complexe dans le cas précis de TFLES et PCM FPI puisque nous savions depuis le début que les deux méthodes étaient efficaces et que la conclusion de l'étude ne serait probablement pas qu'une des deux méthodes pouvait être éliminée facilement. Le fait d'employer aussi deux configurations comme PRECCINSTA et TECFLAM a multiplié les configurations et les cas de calcul. Nous essaierons au cours de cette thèse, d'extraire les messages essentiels obtenus au cours de cette comparaison.

Au delà de la comparaison TFLES / PCM FPI, c'est aussi deux approches de la cinétique chimique qui seront testées : utiliser des schémas réduits (comme dans TFLES) ou tabuler des schémas complets (comme dans FPI ou autres méthodes du même type comme FGM [30, 156]). On sait depuis longtemps que des schémas de 1 à 4 étapes ont la capacité de prévoir la vitesse de flamme laminaire, la température de fin de combustion et quelques espèces majoritaires dans une flamme. Les schémas de *Westbrook and Dryer* [161] ou *Jones and Lindstedt* [61] sont utilisés depuis vingt ans par de nombreux groupes travaillant en combustion turbulente. Ces approches ont été complétées par de nombreuses techniques d'ajustement des schémas réduits permettant, par exemple, de prédire non seulement les vitesses de flamme et températures de fin de combustion mais aussi les niveaux de NOx ou de CO dans une flamme turbulente [7, 36, 133]. Tous les schémas réduits ont les mêmes caractéristiques : ils sont très faciles à coder, parfois caractériels à employer (le schéma de *Jones et Linstedt*, par exemple, a des exposants négatifs pour la dépendance des taux de réaction en fonction des fractions massiques) et toujours limités en termes de gamme de pression ou de température. Un avantage de ces schémas est qu'ils restent a priori compatibles avec l'addition d'autres mécanismes physiques : évaporation, pertes de chaleur par rayonnement, pertes de chaleur et extinction de flamme aux parois, injection secondaire de carburant. A l'autre extrémité, les méthodes de tabulation cherchent à garder toute la complexité de la chimie mais pour y parvenir, doivent dès le début de leur construction utiliser des hypothèses simplificatrices :

- le taux de réaction est le même dans la flamme turbulente et dans la flamme élémentaire (réacteurs 0D ou flammes laminaires) qui sert à tabuler,
- une fraction de mélange peut être définie (il ne peut y avoir que deux entrées de réactifs dans le foyer),
- certaines espèces peuvent être négligées dans la tabulation,
- l'ensemble de l'effet de la turbulence peut être décrit avec deux variables seulement : z (fraction de mélange) et c (variable d'avancement).

On comparera les deux méthodes dans le cas académique des flammes laminaires de prémélange puis dans le cas turbulent de PRECCINSTA.

La complexité de ces comparaisons dans les cas turbulent vient du fait que la méthode employée pour traiter la cinétique chimique est souvent associée à une vision du modèle de combustion turbulente : typiquement, les schémas réduits dans AVBP étaient traditionnellement traités avec le modèle de flamme épaissi car les deux approches s'accordent bien. De même, FPI a été pensé pour un modèle de pdf présumé à deux variables z et c. Pendant cette thèse, nous avons tenté de les mélanger en effectuant un calcul PCM avec un schéma réduit afin de tester l'influence de la modélisation cinétique à iso-modèle d'interaction flamme turbulence (dans ce cas précis, ce sera PCM).

Toutes les comparaisons de modèles de combustion turbulente et de cinétique chimique réalisées dans cette étude sont résumées dans la table 1.4.

1.3.3 Prédiction d'instabilités de combustion par la simulation aux grandes échelles

Les instabilités de combustion sont un problème crucial et fréquent dans le développement des moteurs fusée, des turbines aéronautiques et terrestres et dans de nombreux systèmes industriels. Ces instabilités se manifestent par des oscillations intenses des différents paramètres de l'écoulement qui peuvent

	Preccinsta		Tecflam
Prise en compte du mélange	SANS	AVEC	AVEC
FPI vs 2 steps	Chapitre 7	-	-
PCM vs TFLES	Chapitre 7	-	-
PCM-FPI vs TFLES-2 steps	Chapitre 7	-	-
Evaluation PCM-FPI	Chapitre 7	-	-
Evaluation TFLES-2 steps	Chapitre 7	Chapitre 8	Chapitre 9

TAB. 1.4 - *Comparaisons de modèles de combustion turbulente et de cinétique chimique réalisées.*

considérablement perturber le fonctionnement du système pour les raisons suivantes :

- le régime de fonctionnement moyen est affecté
- des vibrations sont induites dans la structure du système, pouvant entre en résonance avec elle
- une fatigue cyclique peut être occasionnée
- le bruit produit peut devenir important
- les flux de chaleur associés peuvent être élevés et entraîner une surchauffe de certaines pièces
- une extinction partielle ou totale de la combustion peut subvenir

Il est possible de prédire les instabilités de combustion par la simulation aux grandes échelles. Les phénomènes à capturer par le solveur Navier-Stokes 3D réactif sont les suivants :

- la dynamique globale de l'écoulement dans le brûleur et les instabilités hydrodynamiques associées
- la propagation des ondes acoustiques et l'installation des modes propres
- les phénomènes de mélange et de transport
- la cinétique chimique dans une gamme de richesse pour la carburant considéré
- les transferts de chaleur, tant au sein du fluide qu'avec l'extérieur
- l'atomisation et la vaporisation pour les foyers à carburant liquide

Le solveur AVBP utilisé dans cette étude a montré ses capacités à prédire des instabilités de combustion à plusieurs reprises [86, 127, 129, 137].

L'objectif initial de cette thèse ne comprenait pas d'étude sur les instabilités de combustion mais il est difficile d'étudier la configuration PRECCINSTA sans les prendre en compte. Plusieurs régimes ont été testés expérimentalement et la chambre de combustion n'était pas systématiquement stable :

- Le régime $\Phi = 0.75$ est instable expérimentalement, ce que la LES a pu retrouver avec l'hypothèse de prémélange parfait [129].
- Le régime $\Phi = 0.70$ est instable expérimentalement, ce que la LES n'a pas pu retrouver avec l'hypothèse de prémélange parfait.
- Le régime $\Phi = 0.83$ est stable expérimentalement, mais des hétérogénéités de mélange importantes ont été mesurées [88].

La dernière constatation permet de se demander si les hétérogénéités de mélange ne seraient pas une cause d'instablilité de combustion de la chambre PRECCINSTA. L'objectif premier est donc de vérifier si la LES est capable de retrouver ces hétérogénéités de mélange sur le cas stable ($\Phi = 0.83$) avant de passer au régime instable ($\Phi = 0.70$ (étude future).

Le calcul LES à $\Phi = 0.83$ n'a pas été systématiquement stable, ce qui a permis de réaliser une étude supplémentaire (Section 8.4.2) sur le lien entre les conditions limites acoustiques et la stabilité d'une chambre de combustion prémélangée confinée.

1.4 Organisation du document

Ce document est organisé de la façon suivante :

PARTIE I : La première partie expose l'outil utilisé dans cette étude, à savoir la simulation aux grandes échelles (SGE) des écoulements réactifs, méthode pour laquelle est développé le code de calcul AVBP.

Le chapitre 2 introduit les équations de conservation pour les fluides réactifs .

Le chapitre 3 présente les équations de la simulation des grandes échelles et l'ensemble des modèles physiques implémentés dans le code AVBP.

Le chapitre 4 expose les méthodes disponibles dans AVBP pour la partie réactive de la simulation des grandes échelles. Les cinétiques chimiques et les modèles d'interaction flamme/turbulence y sont détaillées et les schémas à 2 étapes y sont comparés à la méthodologie FPI pour la combustion CH_4/air.

Le chapitre 5 s'intéresse à l'approche numérique utilisée dans AVBP.

PARTIE II : La seconde partie concerne l'application de la simulation des grandes échelles à des écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés. Ces écoulements sont complexes et représentatifs de ceux que l'on peut trouver dans les turbines aéronautiques.

Le chapitre 6 présente la configuration turbulente partiellement prémélangée PRECCINSTA. Il s'agit d'une chambre de combustion représentative d'un moteur d'hélicoptère.

Le chapitre 7 permet d'évaluer si les méthodologies de modélisation de la cinétique chimique et des interactions flamme-turbulence dans le cadre de la LES sont adaptées à la prédiction de la production des polluants de la configuration précédente.

Le chapitre 8 est l'occasion d'évaluer les capacités de la LES à calculer efficacement le mélange air-carburant d'un injecteur vrillé et la flamme qui en découle.

PARTIE III : La troisième partie concerne l'application de la simulation des grandes échelles à l'écoulement turbulent réactif non prémélangé TECFLAM.

Le chapitre 9 permet de statuer sur la capabilité de la LES de prédire les champs de vitesse, de température et de fraction massique d'une flamme non prémélangée vrillée.

Première partie

Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs

Table des matières

2 Equations de conservation pour les fluides réactifs 33

2.1 Equations et variables conservatives . . . 33
2.2 Variables thermodynamiques . . . 34
2.3 Equation d'état des gaz parfaits . . . 35
2.4 Conservation de la masse en multi-espèces . . . 36
2.5 Coefficients de transport . . . 36
2.6 Flux de chaleur . . . 37
2.7 Cinétique chimique . . . 38
2.8 Modélisation des pertes radiatives . . . 39

3 Equations pour la LES 41

3.1 La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES) . . . 41
3.2 Equations LES . . . 42
3.2.1 Termes non visqueux . . . 43
3.2.2 Termes visqueux en non réactif . . . 43
3.2.3 Termes de sous-maille . . . 44
3.3 Les modèles de sous-maille disponibles dans AVBP . . . 45
3.3.1 Le modèle de Smagorinsky . . . 46
3.3.2 Le modèle WALE . . . 46
3.3.3 Le modèle de Smagorinsky filtré . . . 46

4 Modèles cinétiques et modèles d'interaction flamme/turbulence en LES 49

4.1 Le modèle de flamme épaissie . . . 49
4.1.1 Le modèle de flamme épaissie en DNS . . . 49
4.1.2 Le modèle de flamme épaissie en LES . . . 50
4.1.2.1 La fonction d'efficacité E . . . 51
4.1.2.2 Estimation de la constante α . . . 53
4.1.2.3 Implémentation . . . 53

4.1.3 Le modèle de flamme épaissie Dynamique . . . 54
4.1.3.1 Principe de fonctionnement . . . 54
4.1.3.2 Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale . . . 55
4.2 Le modèle à PDF présumées PCM . . . 55
4.2.1 Fermeture des taux de réaction par une approche statistique . . . 55
4.2.2 Détermination de la PDF $\widetilde{P}(Z^*)$ . . . 56
4.2.3 Détermination de la PDF $\overline{P}(c^*)$ . . . 57
4.2.4 Fermeture des dissipations scalaires $\overline{\chi_{Y_c}}$ et $\overline{\chi_Z}$ par relaxation linéaire . . . 58
4.3 Réduction de cinétique chimique . . . 59
4.3.1 Objectifs . . . 59
4.3.2 Avantages des cinétiques chimiques réduites . . . 59
4.3.2.1 Schéma méthane/air à une étape (MP1) . . . 62
4.3.2.2 Schéma méthane/air à deux étapes (CM2) . . . 62
4.3.3 Méthodes alternatives . . . 63
4.3.3.1 Méthode à une étape avec ajustements . . . 63
4.3.3.2 Méthode PEA . . . 63
4.4 La méthode tabulée FPI . . . 67
4.4.1 Tabulation des taux de réaction . . . 68
4.4.2 Tabulation des fractions massiques . . . 69
4.5 Comparaison des schémas à 2 étapes et de FPI sur des flammes de prémélange laminaires 70

5 Approche numérique 75
5.1 Discrétisation *Cell-Vertex* . . . 75
5.1.1 Approche des résidus pondérés . . . 75
5.1.2 Calcul des gradients . . . 77
5.2 Schémas numériques . . . 77
5.3 Modèles de viscosité artificielle . . . 77
5.3.1 Introduction . . . 77
5.3.2 Senseurs . . . 78
5.3.2.1 Senseur de Jameson . . . 78
5.3.2.2 Senseur de Colin . . . 78
5.3.3 Opérateurs . . . 79
5.4 Maillages . . . 79
5.5 Parallélisation et « speedup » . . . 80

Chapitre 2

Equations de conservation pour les fluides réactifs

2.1 Equations et variables conservatives

Les équations de conservation d'un écoulement multi espèces réactif s'écrivent :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \; = \; \mathbf{s} \tag{2.1}$$

où $\mathbf{w} = (\, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables conservatives avec respectivement ρ, u, v, w, E, ρ_k la densité, les trois composantes du vecteur vitesse $\vec{V} = (u, v, w)^T$, l'énergie totale et $\rho_k = \rho Y_k$ avec Y_k la fraction massique de l'espèce k, k variant de 1 à N, N étant le nombre d'espèces. Une décomposition classique en parties visqueuse et non visqueuse est utilisé pour le tenseur des flux :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{w})^I + \mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V \tag{2.2}$$

Les trois composantes du tenseur non visqueux $\mathbf{F}(\mathbf{w})^I$ sont :
Termes non visqueux :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + P)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \; \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ (\rho E + P)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \; \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

où la pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 2.15).

Termes visqueux : Les trois composantes du tenseur visqueux $\mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla\mathbf{w})^V$ sont :

$$\mathbf{f}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{g}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

$$\mathbf{h}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix}$$

Le tenseur des contraintes τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}), \qquad i,j = 1,3 \tag{2.5}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}), \qquad i,j = 1,3 \tag{2.6}$$

avec μ la viscosité dynamique explicitée en section 2.5. $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k suivant i défini en section 2.4 (Eq. 2.26) et q_i est le flux de chaleur défini en section 2.6 (Eq. 2.32).

2.2 Variables thermodynamiques

L'état de référence est pris à la pression P_0 = 1 bar et à la température T_0 = 0 K. Les enthalpies $\tilde{h}_{s,k}$ et entropies $\tilde{s}_k$ sensibles de chaque espèce sont tabulées tous les 200 K de 0 à 5000 K et sont définies par les Eq. 2.7 et 2.8. Le symbole ~ correspond aux valeurs tabulées et l'exposant m correspond aux valeurs molaires. $\tilde{h}^m_{s,k}$, $\tilde{s}^m_k$ et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de la table JANAF [150]. L'énergie sensible de chaque espèce est également définie à l'aide de l'Eq. 2.9.

$$\tilde{h}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k}dT = \frac{\tilde{h}^m_{s,k}(T_i) - \tilde{h}^m_{s,k}(T_0)}{W_k}, \qquad i = 1,51 \tag{2.7}$$

$$\tilde{s}_k(T_i) = \frac{\tilde{s}^m_k(T_i) - \tilde{s}^m_k(T_0)}{W_k}, \qquad i = 1,51 \tag{2.8}$$

$$\tilde{e}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k}dT = \tilde{h}_{s,k}(T_i) - r_kT_i \qquad i = 1,51 \tag{2.9}$$

Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et volume constant $C_{v,k}$ sont supposés constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100$. Elles sont respectivement déterminées par les Eq. 2.10 et 2.11. L'énergie sensible est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. 2.12). L'énergie sensible et l'enthalpie sensible du mélange sont respectivement définies par les Eq. 2.13 et 2.14.

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \tag{2.10}$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \tag{2.11}$$

$$e_{s,k}(T) = \tilde{e}_{s,k}(T_i) + (T - T_i)\frac{\tilde{e}_{s,k}(T_{i+1}) - \tilde{e}_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \tag{2.12}$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^{N} \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k e_{s,k} \tag{2.13}$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^{N} \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k h_{s,k} \tag{2.14}$$

2.3 Equation d'état des gaz parfaits

L'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits s'écrit :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}} T \tag{2.15}$$

$$\frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \tag{2.16}$$

où $\overline{W}$ est la masse molaire du mélange. La constante du mélange variable en temps et en espace $\overline{r}$ et les capacités calorifiques dépendent des fractions massiques :

$$\overline{r} = \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^{N} Y_k r_k \tag{2.17}$$

$$\overline{C_p} = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{p,k} \tag{2.18}$$

$$\overline{C_v} = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{v,k} \tag{2.19}$$

où $\mathcal{R} = 8.3143$ J/mol.K est la constante universelle des gaz parfaits. L'exposant polytropique du mélange est donné par $\overline{\gamma} = \overline{C_p}/\overline{C_v}$. Donc, la constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition local du mélange définie par les fractions massiques locales $Y_k(x,t)$:

$$\overline{r} = \overline{r}(x,t), \qquad \overline{C_p} = \overline{C_p}(x,t), \qquad \overline{C_v} = \overline{C_v}(x,t), \qquad \text{et} \qquad \gamma = \gamma(x,t) \tag{2.20}$$

A partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 2.12 et 2.13. Enfin, les conditions limites font intervenir la vitesse du son du mélange c définie par l'Eq. 2.21.

$$c^2 = \gamma \overline{r} T \tag{2.21}$$

2.4 Conservation de la masse en multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation totale de la masse implique que l'Eq. 2.22 soit satisfaite. V_i^k représente la composante dans la direction i (i=1,2,3) de la vitesse de diffusion de l'espèce k (k=1,...,N). Afin d'exprimer cette vitesse de diffusion, l'approximation d'Hirschfelder-Curtis est utilisée. Cette fonction, définie par l'Eq. 2.23, utilise les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k \overline{W}/W_k$. En terme de fraction massique, l'Eq. 2.23 devient l'Eq. 2.24.

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k V_i^k = 0 \tag{2.22}$$

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{2.23}$$

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{2.24}$$

En sommant les k Eq. 2.24, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.22 n'est pas nécessairement respectée. Pour assurer la conservation globale de la masse, une vitesse de diffusion corrective $\vec{V}^c$ est ajoutée. Cette vitesse est définie par l'Eq. 2.25 [111]. Le flux de diffusion des espèces $J_{i,k}$ est alors défini par l'Eq. 2.26.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N} D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{2.25}$$

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right), \qquad i = 1,2,3 \tag{2.26}$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange (voir section 2.5).

2.5 Coefficients de transport

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air[1]. La loi puissance, définie par l'Eq. 2.27, est utilisée pour déterminer la viscosité dynamique.

$$\mu = c_1 (\frac{T}{T_{ref}})^b \tag{2.27}$$

[1]Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles par rapport aux propriétés thermodynamiques

où b est typiquement dans la plage 0.5-1.0 (air : b = 0.76). La conductivité thermique du mélange est définie, en utilisant un nombre de Prandtl P_r supposée constant en temps et en espace, par l'Eq. 2.28.

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{P_r} \tag{2.28}$$

La diffusivité moléculaire D_k est exprimée à l'aide des coefficients binaires D_{ij} obtenus à l'aide de la théorie cinétique des gaz [57]. La diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 2.29 [10].

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^{N} X_j / D_{jk}} \tag{2.29}$$

Les coefficients binaires D_{ij} sont des fonctions complexes dépendant des intégrales de collision et des variables thermodynamiques. Dans un code DNS utilisant une chimie complexe, utiliser l'Eq. 2.29 a un sens. Cependant, dans la plupart des codes DNS, un schéma simplifié est utilisé et la modélisation de la diffusivité n'a pas besoin d'être aussi précise. En conséquence, une approche plus simplifiée est utilisée. En faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce $S_{c,k}$ sont constants, la diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 2.30.

$$D_k = \frac{\mu}{\rho \, S_{c,k}} \tag{2.30}$$

où $S_{c,k}$ est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant en temps et en espace. P_r et $S_{c,k}$ modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Les valeurs sont obtenues à l'aide du logiciel PREMIX, inclus dans le package CHEMKIN [63] en calculant leur valeur dans les gaz brûlés pour une flamme de prémélange laminaire monodimensionnelle.

2.6 Flux de chaleur

Dans le cas d'écoulements multi-espèces, le flux de chaleur total q_i est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces. Ces deux termes sont détaillées dans l'Eq. 2.32.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} J_{i,k} h_{s,k}, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{2.31}$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} \quad \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^{N} \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \tag{2.32}$$

où λ est la conductivité thermique du mélange (voir section 2.5).

2.7 Cinétique chimique

Le terme source $\mathbf{s}$ de l'Eq. 2.1 est défini par : $\mathbf{s} = (\,\dot{\omega}_u, \dot{\omega}_v, \dot{\omega}_w, \dot{\omega}_T, -\dot{\omega}_k)^T$ avec $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k. Les termes sources $\dot{\omega}_u$, $\dot{\omega}_v$, $\dot{\omega}_w$ sont utilisés pour imposer des contraintes sur les composantes de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Par exemple, un gradient de pression est imposé dans le cas d'un écoulement avec périodicité. Cependant, dans la plupart des cas, $\dot{\omega}_u = \dot{\omega}_v = \dot{\omega}_w = 0$. Le modèle de combustion implémenté dans AVBP est une loi d'Arrhénius écrite pour N réactifs $\mathcal{M}_{kj}$ et M réactions. Les réactions se mettent sous la forme définie par l'Eq. 2.33. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$, défini par l'Eq. 2.34, est la somme des taux de réaction de l'espèce k durant la réaction j $\dot{\omega}_{kj}$ pour j variant de 1 à M. Les coefficients stoechiométriques des réactifs ν'_{kj} et des produits ν''_{kj} permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$. $\mathcal{Q}_j$ est la variable d'avancement de la réaction j définie par l'Eq. 2.35. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions *"forward"* et *"reverse"* respectivement définis par les équations 2.36 et 2.37. $A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ se déduit de l'hypothèse d'équilibre.

$$\sum_{k=1}^{N} \nu'_{kj}\mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N} \nu''_{kj}\mathcal{M}_{kj}, \qquad j = 1, M \tag{2.33}$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{M} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{M} \nu_{kj}\mathcal{Q}_j \tag{2.34}$$

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^{N} (\frac{\rho Y_k}{W_k})^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^{N} (\frac{\rho Y_k}{W_k})^{\nu''_{kj}} \tag{2.35}$$

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}) \tag{2.36}$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \tag{2.37}$$

K_{eq} est la constante d'équilibre [68] définie par l'Eq. 2.38. La pression de référence est égale à $p_0 = 1$ bar. ΔH^0_j est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 2.39 et ΔS^0_j la variation d'entropie pour la réaction j définie par l'Eq. 2.40. $\Delta h^0_{f,k}$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0$ K. Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est défini par l'Eq. 2.41.

$$K_{eq} = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S^0_j}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H^0_j}{\mathcal{R}T}\right) \tag{2.38}$$

$$\Delta H^0_j = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h^0_{f,k}) \tag{2.39}$$

$$\Delta S^0_j = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} W_k s_k(T) \tag{2.40}$$

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N} \dot{\omega}_k \Delta h^0_{f,k} \tag{2.41}$$

2.8 Modélisation des pertes radiatives

Lorsque les transferts radiatifs jouent un rôle dans la physique des écoulements réactifs, le terme source de chaleur s'écrit :

$$S = \dot{\omega}_T + Q_r \tag{2.42}$$

où Q_r est la perte de chaleur par radiations et $\dot{\omega}_T$ est le terme source de chaleur des réactions chimiques exposées dans la section 2.7.

Considérant que les gaz sont optiquement fins et que l'environnement froid a une température constante T_s, la perte de chaleur radiative par unité de volume Q_r est calculée [5] :

$$Q_r = 4\sigma(T^4 - T_s^4) \sum_i (p_i \, a_{p,i}) \tag{2.43}$$

où $\sigma = 5.669 \cdot 10^{-8}$ W/m^{2}K^4 est la constante de Stefan-Boltzmann, T est la température locale du gaz, p_i est la pression partielle de l'espèce i, et $a_{p,i}$ est le coefficient d'absorption moyen de Planck de l'espèce i. Les coefficients d'absorption moyen de Planck sont calculées par une formule polynomiale :

$$a_{p,i} = \exp\left(C_0 + C_1 \ln(T) + C_2 [\ln(T)]^2 + C_3 [\ln(T)]^3 + C_4 [\ln(T)]^4\right) \tag{2.44}$$

Les coefficients de l'Eq. 2.44 sont donnés dans [52]. Ils correspondent aux valeurs données par le programme RADCAL [53]. Notons que cette approche n'est valable que pour des gaz fins et un environnement froid de température constante T_s.

Chapitre 3

Equations pour la LES

3.1 La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES)

La Simulation aux Grandes Echelles [118, 131] est reconnue comme une approche complémentaire de la traditionnelle approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Bien que conceptuellement très différentes, ces deux approches ont pour but de produire de nouveaux systèmes d'équations de conservation permettant de reproduire et comprendre les écoulements turbulents.

En appliquant des opérateurs au système d'équations de conservation d'un écoulement turbulent compressible, de nouvelles équations de conservation sont obtenues. Les termes non modélisés apparaissent et nécessitent la création de modèles spécifiques pour pouvoir assurer la fermeture des équations. Les principales différences entre les deux approches proviennent du choix de l'opérateur employé :

Approche RANS L'opérateur est une moyenne temporelle ou une moyenne d'ensemble sur un certain nombre de réalisations du champ fluide [24, 118].
Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour toutes les échelles de la turbulence.

Approche LES L'opérateur est un filtre local, de taille fixée $\triangle$, indépendant du temps, appliqué à une seule réalisation du champ fluide. De ce *moyennage spatial* résulte une séparation entre les grandes et les petites échelles de la turbulence.
Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour les échelles de la turbulence plus petites qu'une échelle de coupure. Cette échelle de coupure entre les grandes échelles résolues et les petites échelles modélisées est liée à la taille du filtre.

La différence fondamentale entre ces deux approches réside dans la plage d'échelles résolues qui représente toutes les échelles dans le cas du RANS et seulement les grandes échelles dans le cas de la Simulation aux Grandes Echelles. Le concept LES avec sa fréquence de coupure est illustré sur le spectre d'énergie d'une Turbulence Homogène Isotrope (THI) sur la figure 3.1.

Grâce à l'utilisation du filtre pour séparer petites et grandes échelles, la LES permet une représentation dynamique des tourbillons de plus grande taille dont les contributions sont critiques en géométrie complexe. Les prédictions sur la physique des écoulements turbulents sont améliorées avec l'utilisation de la LES puisque des phénomènes à grande échelle, comme la propagation des ondes acoustiques, sont

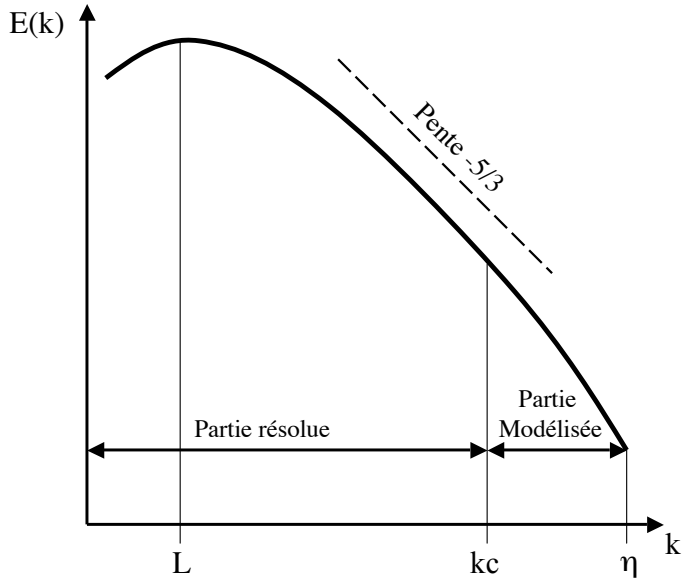


FIG. 3.1 - *Spectre d'énergie d'une THI : concept LES*

intrinsèquement présents dans les équations de conservation [111].

Pour toutes ces raisons, la LES a un potentiel évident pour la prédiction des écoulements turbulents réactifs rencontrés dans les applications industrielles. Cependant, cette utilisation est limitée par les hypothèses introduites pour construire les modèles de la LES.

Les équations de conservation LES sont décrites en section 3.2, les modèles de sous-maille en section 3.3 et le modèle d'interaction combustion/turbulence TF en contexte LES en section 4.1.2.

3.2 Equations LES

La quantité filtrée $\overline{f}$ est la quantité résolue par la simulation numérique. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \overline{f}$. Dans le cas d'un écoulement à densité variable, une moyenne de Favre est définie par l'Eq. 3.1.

$$\overline{\rho}\widetilde{f} = \overline{\rho f} \tag{3.1}$$

Les équations de conservation d'un écoulement turbulent réactif en approche LES (Eq. 3.2) sont obtenues par filtrage des équations DNS (Eq. 2.1).

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}} \; = \; \overline{\mathbf{s}} \tag{3.2}$$

Le tenseur des flux est défini par $\overline{\mathbf{F}} = (\overline{\mathbf{f}}, \overline{\mathbf{g}}, \overline{\mathbf{h}})^T$. Le terme source est défini par $\overline{\mathbf{s}}$. Les flux $\overline{\mathbf{f}}$, $\overline{\mathbf{g}}$ et $\overline{\mathbf{h}}$ sont divisés en trois contributions :

$$\overline{\mathbf{f}}^I, \overline{\mathbf{g}}^I, \overline{\mathbf{h}}^I \qquad \text{contribution non visqueuse} \tag{3.3}$$

$$\overline{\mathbf{f}}^V, \overline{\mathbf{g}}^V, \overline{\mathbf{h}}^V \quad \text{contribution visqueuse} \tag{3.4}$$

$$\overline{\mathbf{f}}^t, \overline{\mathbf{g}}^t, \overline{\mathbf{h}}^t \quad \text{contribution de sous-maille} \tag{3.5}$$

et peuvent s'écrire :

$$\overline{\mathbf{f}} = \overline{\mathbf{f}}^I + \overline{\mathbf{f}}^V + \overline{\mathbf{f}}^t \tag{3.6}$$

$$\overline{\mathbf{g}} = \overline{\mathbf{g}}^I + \overline{\mathbf{g}}^V + \overline{\mathbf{g}}^t \tag{3.7}$$

$$\overline{\mathbf{h}} = \overline{\mathbf{h}}^I + \overline{\mathbf{h}}^V + \overline{\mathbf{h}}^t \tag{3.8}$$

Dans le code AVBP, l'échelle de coupure entre petites et grandes échelles correspond à la taille de la maille. De plus, on utilise l'hypothèse de commutation entre l'opérateur de filtrage et la dérivée partielle.

3.2.1 Termes non visqueux

Les trois composantes du tenseur non visqueux sont définies par l'Eq. 3.9.

$$\overline{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{u} + \overline{P\,u} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{u} \end{pmatrix}, \ \overline{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{v} + \overline{P\,v} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{v} \end{pmatrix}, \ \overline{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{w}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{w} + \overline{P\,w} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{w} \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

3.2.2 Termes visqueux en non réactif

Les trois composantes du tenseur visqueux sont définies par l'Eq. 3.10.

$$\overline{\mathbf{f}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xx}} + \overline{v\,\tau_{xy}} + \overline{w\,\tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix}$$

$$\overline{\mathbf{g}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xy}} + \overline{v\,\tau_{yy}} + \overline{w\,\tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

$$\overline{\mathbf{h}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xz}} + \overline{v\,\tau_{yz}} + \overline{w\,\tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}$$

D'après Poinsot et Veynante [111] Chap. 4, les termes de diffusion en LES s'écrivent :

le tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}$

$$\overline{\tau_{ij}} = \overline{2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll})}, \tag{3.11}$$

$$\textit{approximation :} \quad \overline{\tau_{ij}} \approx 2\overline{\mu}(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}), \qquad i,j = 1,3 \tag{3.12}$$

$$\text{avec :} \quad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}), \qquad i,j = 1,3 \tag{3.13}$$

le tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}$

$$\text{en non réactif :} \quad \overline{J_{i,k}} = -\overline{\rho\left(D_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c\right)} \tag{3.14}$$

$$\textit{approximation :} \quad \overline{J_{i,k}} \approx -\overline{\rho}\left(\overline{D}_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i}^c\right), \qquad i = 1,2,3 \tag{3.15}$$

le flux de chaleur $\overline{q_i}$

$$\overline{q_i} = -\overline{\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}} + \sum_{k=1}^{N}\overline{J_{i,k}h_{s,k}} \tag{3.16}$$

$$\textit{approximation :} \quad \overline{q_i} \approx -\overline{\lambda}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}\overline{J_{i,k}}\,\widetilde{h}_{s,k}, \qquad i = 1,2,3 \tag{3.17}$$

Les variations spatiales des flux de diffusion moléculaire sont négligeables et un modèle de gradient suffit pour les modéliser. Les équations de conservation font apparaître des termes de sous-maille dont les modélisations sont présentées dans la section 3.2.3.

3.2.3 Termes de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille sont définies par l'Eq. 3.18.

$$\overline{\mathbf{f}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \ \overline{\mathbf{g}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \ \overline{\mathbf{h}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix} \tag{3.18}$$

Les différents termes s'écrivent :

le tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j), \qquad i,j = 1,3 \tag{3.19}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{\tau_{ij}}^t = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}), \qquad i,j = 1,3 \tag{3.20}$$

La modélisation de ν_t est détaillée en section 3.3.

le tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}^t$

$$\overline{J_{i,k}}^t = \overline{\rho}\,(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k), \qquad i = 1,2,3 \tag{3.21}$$

$$\textit{modèle :} \qquad \overline{J_{i,k}}^t = -\overline{\rho}\left({D_k}^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i}^{c,t} \right), \qquad i = 1,2,3 \tag{3.22}$$

$$\text{avec :} \qquad D_k^t = \frac{\nu_t}{S_{c,k}^t} \tag{3.23}$$

Le nombre de Schmidt turbulent $S_{c,k}^t = 1$ est le même pour toutes les espèces.

le flux de chaleur $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \overline{\rho}(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u}_i \widetilde{E}), \qquad i = 1,2,3 \tag{3.24}$$

$$\textit{modèle :} \qquad \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_{i,k}}^t \, \widetilde{h}_{s,k}, \qquad i = 1,2,3 \tag{3.25}$$

$$\text{avec :} \qquad \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{P_r^t} \qquad \text{et} \qquad P_r^t = 0.9 \tag{3.26}$$

Les vitesses de correction sont obtenues à partir de l'Eq. 3.27.

$$\widetilde{V}_i^c + \widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho} S_{c,k}} + \frac{\mu_t}{\overline{\rho} S_{c,k}^t} \right) \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{3.27}$$

3.3 Les modèles de sous-maille disponibles dans AVBP

Les trois modèles de sous-maille disponibles dans AVBP sont :

section 3.3.1 le modèle de Smagorinsky

section 3.3.2 le modèle Wall Adapting Linear Eddy (WALE)

section 3.3.3 le modèle de Smagorinsky filtré

Ces trois modèles de sous-maille s'appuient sur la même hypothèse théorique d'invariance spatiale et temporelle du filtre LES. Des variations dans la taille du filtre dues à un maillage non uniforme ou à un maillage mobile ne sont pas directement prises en compte. Le changement de topologie de la cellule n'est pris en compte que dans le calcul local du volume de la cellule : $\triangle = V_{cell}^{1/3}$. En théorie et sauf dans les modèles comme MILES [45] qui utilisent la dissipation du schéma comme modèle LES, l'utilisation de viscosité artificielle en LES (voir section 5.3) est prohibée. Dans la pratique, son utilisation doit se faire avec la plus grande attention et ne doit pas dépasser la contribution du modèle de sous-maille. Les équations de conservation d'un écoulement compressible turbulent filtrées font apparaître des tenseurs et des vecteurs de sous-maille (notée SGS[1]) qui décrivent l'interaction entre petites échelles modélisées et grandes échelles résolues. L'influence de la sous-maille sur les échelles résolues est prise en compte au travers d'un modèle SGS utilisant une viscosité turbulente ν_t défini par l'Eq. 3.28. Une telle approche

[1] SGS : Sub-Grid Scale

suppose l'effet de la sous-maille uniquement d'ordre dissipatif. Cette hypothèse n'est valide qu'en appliquant la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov [67].

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho}\,(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j) \tag{3.28}$$

modèle :
$$\overline{\tau_{ij}}^t = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t\,\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\,\overline{\tau_{ll}}^t\,\delta_{ij}, \qquad i,j=1,3 \tag{3.29}$$

avec :
$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\,\frac{\partial\widetilde{u}_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij}, \qquad i,j=1,3. \tag{3.30}$$

Dans ces équations, $\overline{\tau_{ij}}^t$ est le tenseur des contraintes à modéliser, ν_t est la viscosité turbulente de sous-maille, $\widetilde{u}_i$ est le vecteur vitesse filtré et $\widetilde{S}_{ij}$ est le tenseur des déformations résolu. Les trois modèles diffèrent par la définition de la viscosité turbulente de sous-maille ν_t.

3.3.1 Le modèle de Smagorinsky

La viscosité turbulente est écrite :

$$\nu_t = (C_S\triangle)^2\sqrt{2\,\widetilde{S}_{ij}\,\widetilde{S}_{ij}}, \qquad i,j=1,3 \tag{3.31}$$

avec :
$$C_S = (0.1-0.18) \qquad \text{suivant l'écoulement} \tag{3.32}$$

Le modèle de Smagorinsky [143], développé dans les années 1960, fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur de multiples types d'écoulement. Il est très utilisé du fait de sa simplicité. Cette fermeture a la particularité, dans le cas d'une THI, de fournir le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Ce modèle est connu pour être trop dissipatif, spécialement près des murs et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée [131].

3.3.2 Le modèle WALE

Le tenseur s_{ij} est écrit :

$$s^d_{ij} = \frac{1}{2}\,(\widetilde{g}^2_{ij} + \widetilde{g}^2_{ji}) - \frac{1}{3}\,\widetilde{g}^2_{kk}\,\delta_{ij}, \qquad i,j=1,3 \tag{3.33}$$

$$\nu_t = (C_w\triangle)^2\frac{(s^d_{ij}s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2}+(s^d_{ij}s^d_{ij})^{5/4}}, \qquad i,j=1,3 \tag{3.34}$$

avec :
$$C_w = 0.4929 \tag{3.35}$$

Dans l'Eq. 3.33, $\widetilde{g}_{ij}$ est le gradient de vitesse résolu. Le modèle WALE [95] fut développé pour les écoulements en proche paroi.

3.3.3 Le modèle de Smagorinsky filtré

Dans le modèle filtré [33], la viscosité turbulente est :

$$\nu_t = (C_{S_F}\triangle)^2\sqrt{2\,HP(\widetilde{S}_{ij})\,HP(\widetilde{S}_{ij})}, \qquad i,j=1,3 \tag{3.36}$$

$$\text{avec :} \qquad C_{S_F} \;=\; 0.37 \tag{3.37}$$

Dans l'Eq. 3.36, $HP(\widetilde{S}_{ij})$ est le tenseur des déformations résolu obtenu à partir d'un champ de vitesse filtré au travers d'un filtre passe-haut. Ce modèle fut développé afin d'améliorer la représentation de phénomènes locaux typiques des écoulements turbulents [33]. Avec le modèle de Smagorinsky filtré, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

Chapitre 4

Modèles cinétiques et modèles d'interaction flamme/turbulence en LES

Deux modèles de combustion turbulente ont été développés et testés dans cette thèse : le modèle de flamme épaissie et le modèle à PDF présumées PCM, présentés respectivement dans les sections 4.1 et 4.2.

De même, deux méthodes de cinétique chimique peuvent être utilisées : la réduction des cinétiques chimiques et la méthode FPI, présentées respectivement dans les sections 4.3 et 4.4.

4.1 Le modèle de flamme épaissie

4.1.1 Le modèle de flamme épaissie en DNS

Pour le calcul d'un front de flamme en DNS, il peut être utile de simuler la propagation du front sans résoudre exactement sa structure. Deux méthodes sont alors envisagées :

- La flamme est traitée comme une interface d'épaisseur nulle : modèle *G-equation* [99]
- La flamme est épaissie de façon à pouvoir la résoudre : modèle *Thickened Flame (TF)*

Dans le code AVBP utilisé dans cette thèse et pour certaines des simulations réalisées, le modèle TF [2, 3, 20, 29, 73, 74, 111, 136, 138] est utilisé pour résoudre la zone de réaction d'une flamme laminaire en utilisant une loi d'Arrhénius. En utilisant les Eq. 2.25 et 2.26, l'équation de conservation de la fraction massique Y_k de l'espèce k est définie par :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\rho(u_i + V_i^c)Y_k\Big) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D_k \frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial X_k}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k \tag{4.1}$$

où $\dot{\omega}_k$ est le taux de réaction de l'espèce k.

Dans le cas d'une flamme laminaire, les termes diffusifs ∇J^k compensent les termes réactifs $\dot{\omega}_k$. Une analyse dimensionnelle classique [162] montre que la vitesse du front de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de la flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par la diffusivité thermique D_{th} et la constante pré-exponentielle A (voir section 2.7).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \tag{4.2}$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \tag{4.3}$$

Dans le cas d'une flamme laminaire épaissie, les diffusivités thermique D_{th} et moléculaire D_k sont multipliées par F et le taux de réaction $\dot{\omega}_F$ est divisé par F, F étant le facteur d'épaississement :

$$D_{th} \overset{\text{épaississement}}{\Rightarrow} FD_{th} \tag{4.4}$$

$$D_k \Rightarrow FD_k \tag{4.5}$$

$$\dot{\omega}_F \Rightarrow \frac{\dot{\omega}_F}{F} \tag{4.6}$$

L'Eq. 4.1 s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\rho(u_i + V_i^c)Y_k\Big) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho F D_k \frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial X_k}{\partial x_i}\right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \tag{4.7}$$

$$\text{avec} \quad V_i^c = \sum_{k=1}^{n} F D_k \frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{4.8}$$

La vitesse du front de flamme est inchangée (voir l'Eq. 4.2) mais l'épaisseur du front de flamme est multipliée par F (voir l'Eq. 4.3). Ce facteur F est déterminé de manière à pouvoir résoudre le front de flamme sur un maillage DNS. L'extension du modèle TF à l'étude LES d'écoulements turbulents réactifs est discuté en section 4.1.2.

4.1.2 Le modèle de flamme épaissie en LES

Un point délicat de la Simulation aux Grandes Echelles des flammes est lié à l'épaisseur très fine du front de flamme, typiquement de l'ordre de $0.1\ mm$, qui est bien plus petite que la taille standard Δ_x des maillages utilisés en LES. Afin de contourner cette difficulté, le modèle de flamme épaissie TF a été développé pour résoudre le front de flamme sur un maillage typique d'un calcul LES. La section 4.1.1 a présenté comment le front d'une flamme laminaire a pu être épaissi d'un facteur F : $\delta_l^0 \Rightarrow \delta_l^1 = F\delta_l^0$.

Dans le cas d'une flamme turbulente, l'interaction entre turbulence et chimie est altérée. En effet, les tourbillons plus petits que $F\delta_l^0$ n'interagissent que peu avec la flamme dans le cas épaissi alors qu'ils jouent sur la flamme réelle. En conclusion, épaissir la flamme équivaut à réduire l'influence des petits tourbillons sur le plissement de la flamme : la surface de flamme est réduite et le taux de réaction estimé est trop faible. Afin de résoudre ce problème, une fonction d'efficacité E fut développée par Colin [29] à partir de résultats DNS (voir figure 4.1).

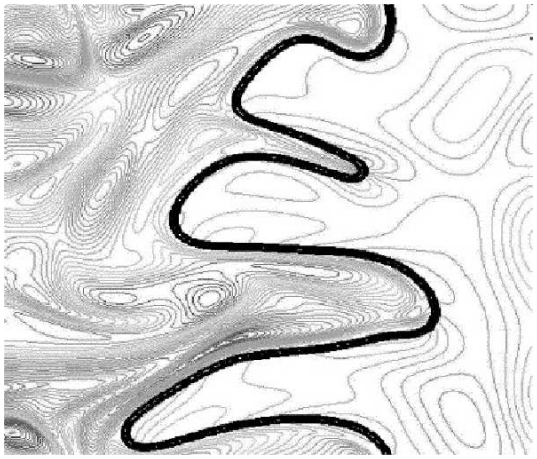
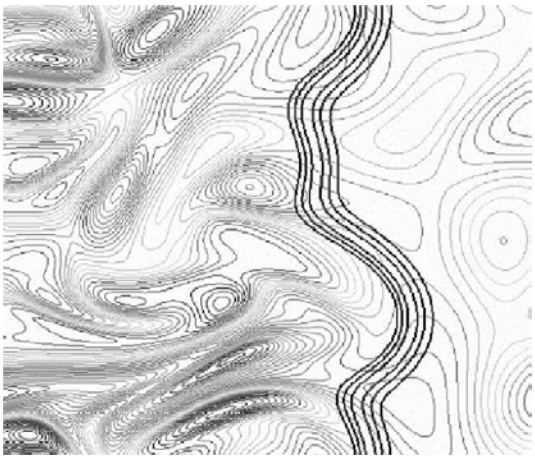
a)  b) 

FIG. 4.1 - *DNS d'interactions flamme/turbulence [3, 111]. a) flamme non épaissie, b) flamme épaissie d'un facteur* $F = 5$

L'ensemble des équations résolues pour réaliser la simulation aux grandes échelles d'un écoulement réactif avec le modèle de flamme épaissie est donc le suivant :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\,\widetilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\,\widetilde{u_i}\,\widetilde{u_j}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{P}\,\delta_{ij} - 2\,(\overline{\mu}+\mu_t)\,(\widetilde{S}_{ij} - 1/3\,\widetilde{S}_{ll}\,\delta_{ij})\right], \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho}\,\widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\,\widetilde{E}\,\widetilde{u_j}) &= -\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\widetilde{u_i}\,\overline{P}\,\delta_{ij} - 2\,\overline{\mu}\,\widetilde{u_i}\,(\widetilde{S}_{ij} - 1/3\,\widetilde{S}_{ll}\,\delta_{ij})\right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[C_p\,\mathcal{E}\,\mathcal{F}\,\frac{\overline{\mu}}{P_r}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_j}\right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\sum_{k=1}^{N}\left(\mathcal{E}\,\mathcal{F}\,\frac{\overline{\mu}}{S_{c,k}}\,\frac{W_k}{W}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_j} - \overline{\rho}\,\widetilde{Y}_k\,(\widetilde{V}_j^c + \widetilde{V}_j^{c,t})\right)\widetilde{h}_{s,k}\right] \\ &\quad + \frac{\mathcal{E}\,\dot{\omega}_T}{\mathcal{F}},\end{aligned} \tag{4.10}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho}\,\widetilde{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\,\widetilde{Y_k}\,\widetilde{u_j}) &= \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mathcal{E}\,\mathcal{F}\,\frac{\overline{\mu}}{S_{c,k}}\,\frac{W_k}{W}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_j} - \overline{\rho}\,\widetilde{Y}_k\,(\widetilde{V}_j^c + \widetilde{V}_j^{c,t})\right] \\ &\quad + \frac{\mathcal{E}\,\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}},\end{aligned} \tag{4.11}$$

4.1.2.1 La fonction d'efficacité E

Une description complète de la fonction d'efficacité E est disponible dans l'article de Colin *et al.* [29]. La méthodologie de ce modèle peut se décomposer en trois étapes principales :

1. Le facteur de plissement de la surface de flamme Ξ est estimé à partir de la densité de surface de

flamme $\overline{\Sigma}$, en supposant l'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous-maille :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{s_l^0} \langle a_T \rangle_s \tag{4.12}$$

où $\langle a_T \rangle_s$ est le taux d'étirement de sous-maille, Δ_e est la taille du filtre et α est la constante du modèle.

2. Le taux d'étirement de sous-maille $\langle a_T \rangle_s$ est défini, à partir de la taille du filtre Δ_e et de la fluctuation de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e}, par l'Eq. 4.13. La fonction Γ, définie par l'Eq. 4.14, correspond à la prise en compte du taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, c'est-à-dire toutes les échelles comprises entre l'échelle de Kolmogorov et la taille du filtre Δ_e [90]. Finalement, la fonction d'efficacité E est définie par l'Eq. 4.15 comme le rapport entre le plissement de la flamme non épaissie et le plissement de la flamme épaissie.

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma \, u'_{\Delta_e} / \Delta_e \tag{4.13}$$

$$\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}\right) = 0.75 \exp\left[-\frac{1.2}{\left(u'_{\Delta_e}/s_l^0\right)^{0.3}}\right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{4.14}$$

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}\right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}}{1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}\right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}} \tag{4.15}$$

s_l^0 est la vitesse de propagation du front de la flamme non épaissie et δ_l^0 son épaisseur. L'épaisseur de la flamme épaissie est définie par : $\delta_l^1 = F\delta_l^0$.

On peut montrer que E varie entre 1 (faible niveau de turbulence) et $E_{max} \simeq F^{2/3}$ (plissement important à l'échelle de la sous-maille). Dans le cas de flammes turbulentes prémélangées, la fonction d'efficacité est telle que la vitesse turbulente de propagation soit correctement prédite : $E\, S_L^0 = S_T$. En fait, spécifier une vitesse turbulente de sous maille S_T est exactement équivalent à spécifier une efficacité E.

Une longueur de coupure δ_l^c est définie par l'équation 31 dans Colin *et al.* [29] de telle façon que les tourbillons plus petits que cette taille n'affectent pas le plissement de la flamme. Donc la fonction d'efficacité est utilisée si la taille caractéristique d'un tourbillon r est telle que :

dans le cas d'une flamme non épaissie $\delta_l^0 > r > \delta_l^c$

dans le cas d'une flamme épaissie $\delta_l^1 = \beta F \delta_l^0 > r > \delta_l^c$

β est une constante de la fonction d'efficacité de l'ordre de grandeur de 2.

3. La taille du filtre Δ_e correspond à la plus grande échelle influencée par l'épaississement δ_l^1. En pratique, $\Delta_e = 10\Delta_x$ avec $\Delta_x = \sqrt[3]{V_{cell}}$.
Les fluctuations de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} sont estimées en utilisant l'opérateur OP_2 basé sur le rotationnel du champ de vitesse pour supprimer la contribution en dilatation qui n'est pas considéré comme de la *turbulence*.
Un opérateur Laplacien, défini par l'Eq. 4.16, est directement appliqué au champ de vitesse.

$$u'_{\Delta_e} = c_2 \Delta_x^3 |\nabla^2(\nabla \times \overline{u})|, \qquad c_2 \approx 2 \tag{4.16}$$

4.1.2.2 Estimation de la constante α

La constante α est estimée de façon à retrouver le comportement asymptotique du facteur de plissement Ξ en fonction des fluctuations de vitesse u' dans le cas de flammes fines telles que Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t. Dans ce cas, le plissement Ξ tend vers un plissement maximum Ξ_{max} défini par l'Eq. 4.17. l'Eq. 4.18 qui définit α se déduit de l'Eq. 4.17.

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u'/s_l^0 \tag{4.17}$$

$$\alpha = \beta \frac{2\ln(2)}{3c_{ms}[Re_t^{1/2} - 1]} \tag{4.18}$$

$$\text{avec :} \qquad Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \qquad \text{et} \qquad c_{ms} = 0.28 \tag{4.19}$$

Il existe plusieurs méthodes pour calculer les constantes α et β, notamment celles proposées par Colin *et al.* [29] ou Charlette *et al.* [23].

4.1.2.3 Implémentation

Dans le cas d'écoulements réactifs, les équations pour la conservation des fractions massiques et la conservation de l'énergie sont modifiées. Les termes visqueux modifiés sont le tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}$ (Eq. 4.20) et le flux de chaleur $\overline{q_i}$ (Eq. 4.22). Le nouveau terme source est défini par l'Eq. 4.23.

On a donc le tenseur de diffusion des espèces :

$$\overline{J_{i,k}} = -EF \frac{\overline{\mu}}{S_{c,k}} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \overline{\rho}_k \widetilde{V}_i^c, \qquad i = 1,2,3 \tag{4.20}$$

avec

$$\widetilde{V}_i^c = EF \sum_{k=1}^{N} \frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho} S_{c,k}} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{4.21}$$

Le flux de chaleur :

$$\overline{q_i} = -EF \frac{\overline{\mu}\overline{C_p}}{P_r} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_{i,k}}\, \widetilde{h}_{s,k}, \qquad i = 1,2,3 \tag{4.22}$$

Et le terme source de l'Eq. 3.2 :

$$\overline{\mathbf{s}} = (\,0, 0, 0, \frac{E\overline{\dot{\omega}}_T}{F}, \frac{-E\overline{\dot{\omega}}_k}{F})^T \tag{4.23}$$

4.1.3 Le modèle de flamme épaissie Dynamique

4.1.3.1 Principe de fonctionnement

Le modèle de flamme épaissie est approprié pour le calcul de flammes parfaitement prémélangées mais pour des flammes partiellement prémélangées, ce modèle doit être ajusté pour deux principales raisons :

1. Dans le cas d'écoulements non réactifs où seul le mélange se produit, les diffusions thermiques et moléculaires sont surestimées d'un facteur F. Dans ces zones, le facteur d'épaississement doit donc valoir $F = 1$.
2. Dans la flamme, l'épaississement permet de résoudre les termes diffusifs et les termes sources. Ainsi, les termes de sous-maille doivent être annulés dans la flamme.

En d'autres termes, le modèle TF peut demeurer inchangé dans la zone de la flamme mais doit être adapté hors de cette région. Le modèle Dynamically Thickened Flame (DTF) a été développé pour prendre en compte ces deux points importants [74]. Dans ce modèle schématisé sur la Fig. 4.2, l'épaississement F n'est plus une constante mais vaut F_{max} dans la zone de réaction et $F = 1$ ailleurs.

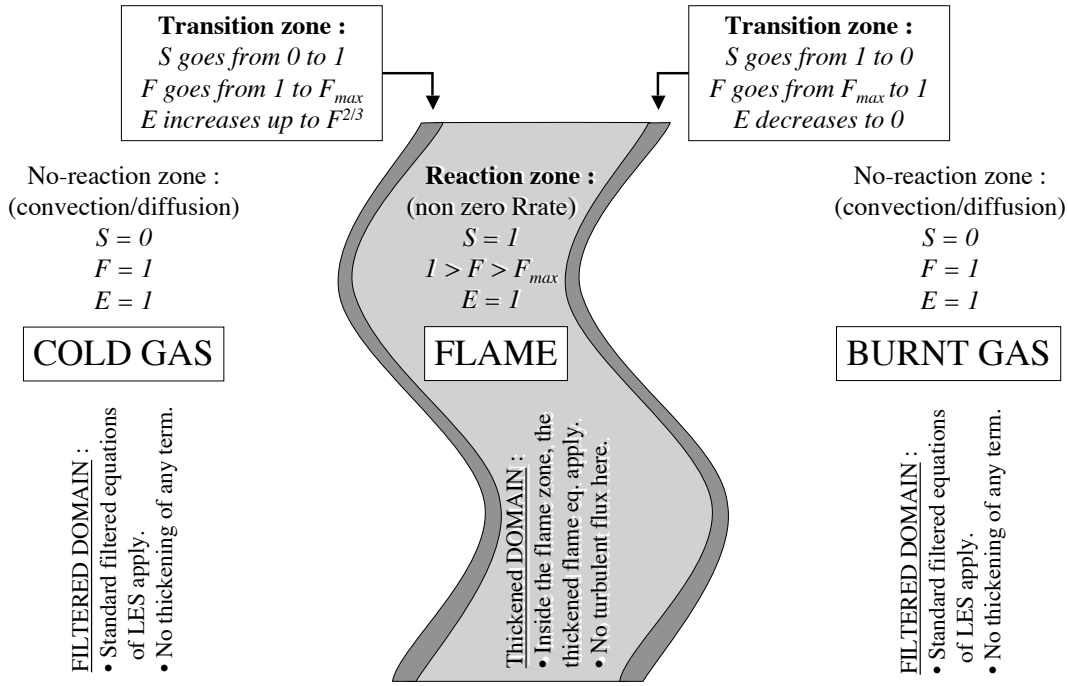


FIG. 4.2 - *Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF*

L'épaississement dynamique F est défini par l'Eq. 4.24. Le senseur S, défini par l'Eq. 4.25, dépend localement des fractions massiques et de la température. Ce senseur évalue si la zone est réactive ou pas à

l'aide de la fonction de présence Ω. Cette fonction utilise des paramètres similaires à ceux de la cinétique chimique.

$$F = 1 + (F_{max} - 1)S \tag{4.24}$$

$$S = tanh(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}), \qquad \beta' = 500 \tag{4.25}$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp(-\Gamma \frac{E_a}{RT}) \tag{4.26}$$

Le paramètre Γ est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut typiquement : $\Gamma = 0.68$. Le senseur S varie entre 0 dans les zones non réactives et 1 dans la flamme. Ω_0 est déterminé en calculant le maximum de Ω dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique 1D non épaissie.

4.1.3.2 Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale

Il est aussi possible d'adapter optimalement le facteur d'épaississement au maillage local. Pour cela, on évalue F_{max} selon l'expression suivante :

$$F_{max} = n \frac{\delta_L^0}{\Delta} \tag{4.27}$$

avec Δ la taille locale de la maille. Afin d'avoir un front de flamme épaissi correctement résolu, et ainsi éviter toute erreur numérique due a la raideur du front, nous prendrons n de l'ordre de 5 en général.

4.2 Le modèle à PDF présumées PCM

4.2.1 Fermeture des taux de réaction par une approche statistique

Le modèle à PDF présumées PCM est un filtrage des taux de réaction des espèces [31, 32, 42, 124, 157]. Le taux de réaction filtré d'une espèce k s'écrit comme l'intégrale du produit du taux de réaction laminaire par la fonction de densité de probabilité (PDF) jointe [111] :

$$\widetilde{\dot{\omega}_k}\left(Y_1, ..., Y_{n_{spec}}, T\right) = \int ... \int \dot{\omega}_k \left(Y_1^*, ..., Y_{n_{spec}}^*, T^*\right) \widetilde{P}\left(Y_1^*, ..., Y_{n_{spec}}^*, T^*\right) dY_1^* ... dY_{n_{spec}}^* dT^* \tag{4.28}$$

La PDF définit pour chaque $Y_1, ..., Y_{n_{spec}}, T$ la probabilité que simultanément $Y_1, ..., Y_{n_{spec}}, T$ soient respectivement égales à $Y_1^*, ..., Y_{n_{spec}}^*, T^*$. La détermination d'une telle fonction est un défi. C'est la raison pour laquelle on suppose que le taux de réaction laminaire $\dot{\omega}$ dépend de deux paramètres :

– Une variable de progrès c, décrivant l'avancement des réactions chimiques et variant de 0 dans les gaz frais à 1 dans les gaz brûlés à l'équilibre.
– La fraction de mélange Z, définie comme une richesse normalisée, évoluant de 0 en présence de comburant pur à 1 en présence de carburant pur.

Plusieurs suppositions sont faites tour à tour :
– L'hypothèse de flammelette, impliquant la représentation de la structure spatiale de sous-maille de la flamme turbulente par une flamme élémentaire.
– La PDF conditionnée $\overline{P}\left(C^*|Z^*\right)$ peut être approximée par $\overline{P}\left(c^*\right)$, c'est-à-dire que la fraction de mélange est indépendante de la variable d'avancement,

Ainsi, l'équation 4.28 devient :

$$\widetilde{\dot{\omega}_k} = \int_{Z^*}\int_{c^*} \dot{\omega}_k\left(c^*, Z^*\right)\widetilde{P}\left(Z^*\right)\overline{P}\left(c^*\right).dc^*.dZ^* \tag{4.29}$$

4.2.2 Détermination de la PDF $\widetilde{P}\left(Z^*\right)$

La PDF $\widetilde{P}\left(Z^*\right)$ est modélisée par β-PDF déterminée à partir de la fraction de mélange filtrée $\widetilde{Z}$ et de $S\left(\widetilde{Z}\right)$, la fluctuation de sous-maille normalisée aussi appelée facteur de ségrégation [160].

Trois formes caractéristiques de β-PDF peuvent être distingués :
– $S\left(\widetilde{Z}\right) \simeq 0$: la β-PDF est un pic centré sur la valeur moyenne $\widetilde{Z}$. Ce cas correspond à un écoulement laminaire ou un écoulement turbulent dont toutes les échelles de l'écoulement sont résolues (DNS).
– $S\left(\widetilde{Z}\right) \simeq 1$: la PDF a deux pics centrés en 0 et en 1 et traduit l'intermittence en sous-maille entre carburant et oxydant.
– $0 \leq S\left(\widetilde{Z}\right) \leq 1$: la PDF a une forme de gaussienne centrée sur la valeur moyenne $\widetilde{Z}$.

La fraction de mélange filtrée et sa fluctuation normalisée, nécessaires pour présumer la $\widetilde{P}\left(Z^*\right)$ sont estimées à l'aide d'équations de transport de scalaires passifs. L'équation de transport de la fraction de mélange filtrée s'écrit :

$$\frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{Z}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{Z}\right) = \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D + D_t\right)\nabla\widetilde{Z}\right] + \overline{\rho}\widetilde{\omega_Z} \tag{4.30}$$

Le terme $\widetilde{\omega_Z}$ est un terme source dû à l'évaporation du liquide. Il est donc nul dans le cadre de ce manuscit.

La fluctuation normalisé de sous-maille de la fraction de mélange, aussi appelée facteur de ségrégation, est définie comme le rapport entre la variance de sous-maille réelle Z_v et son maximum :

$$S\left(\tilde{Z}\right) = \frac{Z_v}{\tilde{Z}\left(1-\tilde{Z}\right)} \tag{4.31}$$

La variance de sous-maille Z_v, dans l'équation précédente, quantifie l'énergie du scalaire en sous-maille et est définie par $Z_v = \widetilde{Z^2} - \widetilde{Z}\widetilde{Z}$. L'équation de transport de Z_v s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho} Z_v}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{u} Z_v\right) &= \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D + D_t\right)\nabla Z_v\right] \\ &+ 2\overline{\rho}\left(D + D_t\right)|\nabla\widetilde{Z}|^2 \\ &- 2\overline{\rho D|\nabla Z|^2} \\ &+ 2\rho\left(\widetilde{Z\dot{\omega}_Z} - \widetilde{Z}\widetilde{\dot{\omega}_Z}\right) - \overline{\rho}\left(\widetilde{Z^2\dot{\omega}_Z} - \widetilde{Z^2}\widetilde{\dot{\omega}_Z}\right)\end{aligned} \tag{4.32}$$

4.2.3 Détermination de la PDF $\overline{P}\left(c^*\right)$

$\overline{P}\left(c^*\right)$ est également modélisée à l'aide d'une β-PDF présumée à partir de la variable de progrès normalisée $\overline{c}$ et de son facteur de ségrégation $S\left(\overline{c}\right)$. L'avancement normalisé $\overline{c}$ est calculé à partir de la variable d'avancement $\widetilde{Y_c}$ selon la relation suivante :

$$\overline{c} = \frac{\widetilde{Y_c}}{\widetilde{Y_c^{eq}}} \tag{4.33}$$

La variable d'avancement $\widetilde{Y_c}$ est une somme de fractions massiques d'espèces majoritaires. La variable $\widetilde{Y_c^{eq}}$ est la valeur de l'avancement $\widetilde{Y_c}$ à l'équilibre.

La variable d'avancement $\widetilde{Y_c}$ est déterminée par une équation de transport :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y_c}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{Y_c}\right) = \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D + D_t\right)\nabla\widetilde{Y_c}\right] + \overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}} \tag{4.34}$$

où $\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}}$ est un terme source dû à la chimie.

Le facteur de ségrégation $S\left(\overline{c}\right)$ est le rapport entre la variance de sous maille réelle et son maximum, qui est obtenu lorsqu'il y a une intermittence entre gaz frais et brûlés :

$$S\left(\overline{c}\right) = \frac{c_v}{\overline{c}\left(1 - \overline{c}\right)} \tag{4.35}$$

Dans l'équation précédente, la variance c_v, définie par $c_v = \overline{c^2} - \left(\overline{c}\right)^2$, s'écrit à partir des variables non-normalisées :

$$c_v = \frac{Y_{cv}}{\widetilde{Y_c^{eq^2}}} + \widetilde{Y_c}^2\left(\frac{1}{\widetilde{Y_c^{eq^2}}} - \frac{1}{\widetilde{Y_c^{eq}}^2}\right) \tag{4.36}$$

avec $\widetilde{Y_c^{eq^2}}$ obtenu par intégration à travers $\widetilde{P}(Z^*)$:

$$\widetilde{Y_c^{eq^2}} = \int_{Z^*} Y_c^{eq}(Z^*)\, Y_c^{eq}(Z^*)\, \widetilde{P}(Z^*)\, .dZ^* \tag{4.37}$$

La variance de sous maille Y_{cv} est calculée à l'aide d'une équation de transport :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho} Y_{cv}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{u} Y_{cv}\right) &= \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D + D_t\right)\nabla Y_{cv}\right] \\ &+ 2\overline{\rho}\left(D + D_t\right)|\nabla\widetilde{Y_c}|^2 \\ &- 2\overline{\rho D|\nabla Y_c|^2} \\ &+ 2\rho\left(\widetilde{Y_c\dot{\omega}_{Y_c}} - \widetilde{Y_c}\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}}\right) \end{aligned} \tag{4.38}$$

Le terme $2\overline{\rho}\left(\widetilde{Y_c\dot{\omega}_{Y_c}} - \widetilde{Y_c}\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}}\right)$ est une contribution chimique et $\overline{\chi_{Y_c}} = 2\overline{\rho D|\nabla Y_c|^2}$ est la dissipation scalaire.

Le facteur de ségrégation $S(\overline{c})$, défini par l'équation 4.35, s'écrit en fonction des variables transportées :

$$S(\overline{c}) = \frac{c_v}{\overline{c}\left(1-\overline{c}\right)} \tag{4.39}$$

$$= \frac{\left(Y_{cv}\dfrac{\widetilde{Y_c^{eq}}^2}{\widetilde{Y_c^{eq^2}}} + \widetilde{Y_c}^2\left(\dfrac{\widetilde{Y_c^{eq}}^2}{\widetilde{Y_c^{eq^2}}} - 1\right)\right)}{\left(\widetilde{Y_c}\left(\widetilde{Y_c^{eq}} - \widetilde{Y_c}\right)\right)} \tag{4.40}$$

4.2.4 Fermeture des dissipations scalaires $\overline{\chi_{Y_c}}$ et $\overline{\chi_Z}$ par relaxation linéaire

Dans les équattions de transport des variances Z_v (4.32) et Y_{cv} (4.38), les dissipations scalaires $\overline{\chi_Z} = 2\overline{\rho D|\nabla Z|^2}$ et $\overline{\chi_{Y_c}} = 2\overline{\rho D|\nabla Y_c|^2}$ sont à fermer. Le modèle utilisé est celui de Domingo et al. [31], et s'écrit :

$$\overline{\chi_Z} = \overline{\rho} D|\nabla\widetilde{Z}|^2 + \overline{\rho} C_d^{Z_v}\frac{D_t}{\Delta^2}Z_v \text{ et } \overline{\chi_{Y_c}} = \overline{\rho} D|\nabla\widetilde{Y_c}|^2 + \overline{\rho} C_d^{Y_{cv}}\frac{D_t}{\Delta^2}Y_{cv} \tag{4.41}$$

Le modèle de Domingo et al. repose sur une hypothèse de relaxation linéaire vers une variance nulle. Le temps de relaxation caractéristique est un temps turbulent de sous-maille, $\tau_{sgs} = \frac{\Delta^2}{C_d D_t}$. L'intérêt de cette approche est sa simplicité et la possibilité d'utiliser un modèle dynamique pour déterminer la constante $C_d^{Z_v}$.

En introduisant les modèles 4.41 dans les équations de transport de Z_v (4.32) et Y_{cv} (4.38), elles se simplifient :

$$\frac{\partial \overline{\rho} Z_v}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{u} Z_v\right) = \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D + D_t\right)\nabla Z_v\right] + 2\overline{\rho} D_t |\nabla \widetilde{Z}|^2 - 2\overline{\rho} C_d^{Z_v} \frac{D_t}{\Delta^2} Z_v \tag{4.42}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho} Y_{cv}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{u} Y_{cv}\right) &= \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D + D_t\right)\nabla Y_{cv}\right] + 2\overline{\rho} D_t |\nabla \widetilde{Y_c}|^2 - 2\overline{\rho} C_d^{Y_{cv}} \frac{D_t}{\Delta^2} Y_{cv} \\ &+ 2\rho\left(\widetilde{Y_c \dot{\omega}_{Y_c}} - \widetilde{Y_c}\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}}\right) \end{aligned} \tag{4.43}$$

La constante C_d contrôle le temps caractéristique τ_{sgs}. Si C_d augmente, τ_{sgs} diminue et la dissipation augmente.

4.3 Réduction de cinétique chimique

4.3.1 Objectifs

La simulation en combustion de configurations industrielles nous conduit à traiter de l'oxydation de nombreux hydrocarbures tels que méthane, propane, heptane, JP10 ou mélanges comme le kérosène et gaz naturel. L'utilisation de modèle de flamme de type TFLES induit la nécessité de reproduire correctement une structure de flamme laminaire. Il est donc de première importance de pouvoir modéliser les réactions chimiques au sein d'une flamme laminaire de prémélange. Le modèle de flamme laminaire doit être en mesure de reproduire les principales grandeurs globales qui caractérisent une flamme laminaire :

- La vitesse de flamme laminaire S_L, car elle est directement reliée au taux de consommation de carburant.
- La température de fin de combustion T_{ad}
- L'épaisseur thermique de flamme δ_L.
- La composition des gaz brûlés à l'équilibre Y_k^{eq}.

4.3.2 Avantages des cinétiques chimiques réduites

Alors que l'oxydation des carburants implique plusieurs centaines [44] voire plusieurs milliers de réactions élémentaires pour les carburants les plus lourds, l'utilisation de cinétiques réduites limite le nombre de réactions entre 1 à 4 [78, 161]. Cela a deux principaux effets :

- Limiter le coût de calcul en évitant de transporter des intermédiaires réactionnels inutilement.
- Améliorer la stabilité numérique lors de l'intégration des équations de transport des espèces.

L'approche présentée est basée sur l'utilisation de schémas cinétiques à plusieurs étapes. Chacune est décrite par une réaction avec dégagement de chaleur q :

$$A + B \Leftrightarrow C + D + q$$

Le taux de réaction global est donné par la loi d'Arrhénius. Deux taux de réaction sont possibles, selon que la réaction est irréversible ou non, et la cas échéant, que l'on considère le sens direct (forward) ou indirect (backward) :

$$\text{Pour la réaction "forward" : } \omega = Be^{-T_a/T} C_{C_A}^{\nu_A} C_B^{\nu_B}$$
$$\text{Pour la réaction "backward" : } \omega = B'e^{-T_a/T} C_C^{\nu_C} C_D^{\nu_D}$$

Le choix fait dans AVBP de calculer de manière explicite les taux de réactions et le taux de dégagement de chaleur avec des lois d'Arrhenius, est motivé par la volonté de conserver une certaine simplicité, mais plus encore un maximum d'universalité, afin de pouvoir traiter des applications les plus complexes. Cette capacité à pouvoir traiter simultanément des phénomènes tels que l'allumage, extinction globale ou locale ou encore l'interaction flamme paroi a un certain coût qu'il faut savoir payer. Dans la pratique, un bon compromis limitera notre choix à des schémas de 1 à 2 étapes, voir 3 à 4 pour des cas spécifiques avec peu de restrictions.

L'utilisation de cinétiques à une étape a longtemps été dans AVBP l'unique modèle utilisé. Premièrement pour des raisons de coût de calcul, et deuxièmement par l'absence d'outil apte à construire des schémas à 2 voir 3 étapes. Cette étape a été facilitée par l'outil EPORCK [84, 85] qui permet la création et l'optimisation de cinétiques chimiques par algorithme génétique. La principale limitation des schémas mono étape est la surestimation de la température adiabatique de combustion T_{ad} lorsque l'on s'approche de la stoechiométrie et au-delà, à la fois de T_{ad} et de la vitesse de flamme (Fig. 4.3 et 4.4). L'absence de prise en compte des réactions de dissociation à haute température en est la principale cause. La possibilité qu'offre une deuxième réaction de prendre en compte la dissociation de CO_2 a été testée positivement (Fig. 4.3 et 4.4). On peut noter aussi que la vitesse laminaire de flamme n'est prédite correctement que sur une plage de richesses pauvres. L'adoption, par exemple de cinétique à deux étapes, ne balaye pas tous ces défauts, mais permet d'améliorer sensiblement les performances des schémas en particulier pour la combustion partiellement prémélangée pauvre, où la variation de richesse due au mélange imparfait doit être prise en compte. On échoue toujours à voir la courbe $S_L(\phi)$ décroître sur la portion riche.

À notre connaissance, les seuls schémas réduits mettant en oeuvre plus de deux étapes, et qui reproduisent correctement $S_L(\phi)$ tant pour les mélanges pauvres que riches sont les schémas quatre étapes destinés aux alcanes légers de Jones et Linstedt (J&L) [61] et par Peters *et al.* pour le méthane [100]. La série de schémas de J&L met intelligemment en oeuvre deux réactions pour l'oxydation partielle de l'alcane. Chacune de ces deux réactions ayant un poids prépondérant dans l'une des branches, soit pauvre soit riche. Ces schémas sont produits à l'aide d'une méthode de réduction systématique et permettent de reproduire la courbe en cloche $S_L(\phi)$ des cinétiques complexes. La bonne précision obtenue (avec le jeu de paramètres issus de la réduction) pour des mélanges proches de la stœchiométrie se dégrade assez vite à mesure que l'on s'éloigne de ces conditions [1].

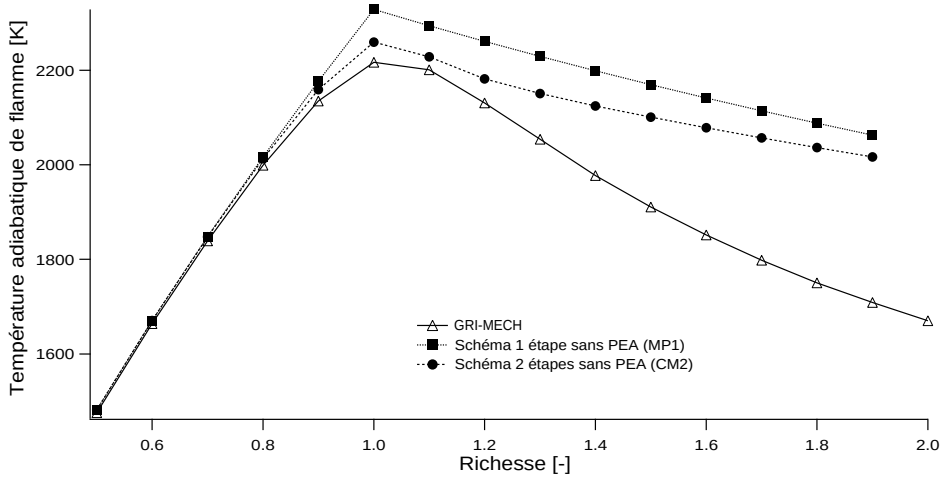


FIG. 4.3 - *Comparaison des températures adiabatiques de fin de combustion CH_4-air obtenues avec des schémas 1 et 2 étapes et GRI-Mech 3.0. $P = 1$ bar, $T = 300$ K.*

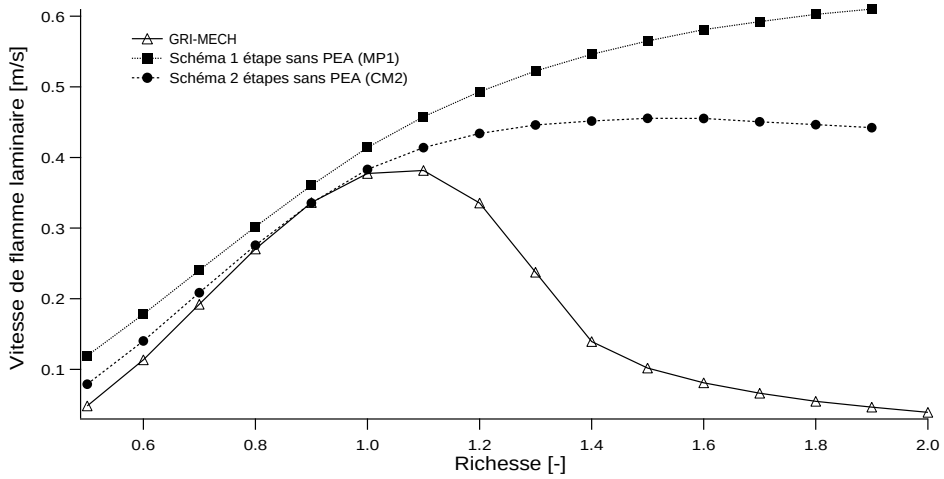


FIG. 4.4 - *Comparaison des vitesses de flamme CH_4-air obtenues avec des schémas 1 et 2 étapes et GRI-Mech 3.0. $P = 1$ bar, $T = 300$ K.*

Deux schémas cinétiques réduits pour les flammes CH_4-air sont utilisés dans ce manuscrit, un schéma à une étape (MP1) et un schéma à deux étapes (CM2). Il sont décrits respectivement dans les sections 4.3.2.1 et 4.3.2.2.

4.3.2.1 Schéma méthane/air à une étape (MP1)

Le schéma cinétique chimique réduit à une étape pour la combustion méthane/air prend en compte cinq espèces (CH_4, O_2, CO_2, H_2O et N_2) et une réaction.

$$CH_4 + 2O_2 \quad \longrightarrow \quad CO_2 + 2H_2O \tag{4.44}$$

Cette réaction (4.44) est irréversible. Le taux de réaction (4.45) est donné par :

$$q_1 = A_1 \left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{W_{CH_4}}\right)^{n_{1F}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{1O}} \exp\left(-\frac{E_{a1}}{RT}\right) \tag{4.45}$$

où les paramètres qui apparaissent dans ces expressions sont donnés par la table 4.1.

A_1	n_{1F}	n_{1O}	E_{a1}
2.10^{10}	2.0	0.5	20000

TAB. 4.1 - *Constantes de réaction pour le schéma une étape méthane/air MP1. Les énergies d'activation sont exprimées en cal/mole et les constantes préexponentielles sont en unités cgs.*

4.3.2.2 Schéma méthane/air à deux étapes (CM2)

Le schéma cinétique chimique réduit à deux étapes pour la combustion méthane/air prend en compte six espèces (CH_4, O_2, CO_2, CO, H_2O et N_2) et deux réactions [138].

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \quad \longrightarrow \quad CO + 2H_2O \tag{4.46}$$

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \quad \longleftrightarrow \quad CO_2 \tag{4.47}$$

La première réaction (4.46) est irréversible tandis que la seconde (4.47) est réversible et conduit à un équilibre entre CO and CO_2 dans les gaz brûlés et à une prédiction correcte de la température des produits de combustion et de la vitesse de flamme [138]. Les taux de réaction (4.46) et (4.47) sont donnés respectivement par :

$$q_1 = A_1 \left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{W_{CH_4}}\right)^{n_{1F}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{1O}} \exp\left(-\frac{E_{a1}}{RT}\right) \tag{4.48}$$

$$q_2 = A_2 \left[\left(\frac{\rho Y_{CO}}{W_{CO}}\right)^{n_{2CO}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{2O}} - \left(\frac{\rho Y_{CO_2}}{W_{CO_2}}\right)^{n_{2CO_2}}\right] \exp\left(-\frac{E_{a2}}{RT}\right) \tag{4.49}$$

où les paramètres qui apparaissent dans ces expressions sont donnés par la table 4.2. Grâce à ce schéma cinétique réduit, la vitesse de flamme et la température des gaz brûlés sont en particulier correctement prédits (Fig. 4.3 et 4.4) pour les richesses pauvres qui sont considérées dans les applications de ce manuscrit.

A_1	n_{1F}	n_{1O}	E_{a1}	A_2	n_{2CO}	n_{2O}	n_{2CO_2}	E_{a2}
2.10^{15}	0.9	1.1	35000	2.10^{9}	1	0.5	0	12000

TAB. 4.2 - *Constantes de réaction pour le schéma deux étapes méthane/air CM2. Les énergies d'activation sont exprimées en cal/mole et les constantes préexponentielles sont en unités cgs.*

4.3.3 Méthodes alternatives

La figure 4.4 met en évidence une limite bien connue des schémas à 1 ou 2 étapes : au-delà de $\Phi = 1.2$, ces schémas surestiment fortement la vitesse de flamme. Ceci peut être corrigé comme décrit ci-dessous.

4.3.3.1 Méthode à une étape avec ajustements

Des travaux (*Linan et al.*) ont exploré la possibilité de travailler avec un schéma numérique à une étape et plusieurs paramètres basés sur le dégagement de chaleur, la température d'activation de la loi d'Arrhénius, et le facteur pré-exponentiel de la même loi [37]. Cette méthode n'ayant pas encore été mise à l'épreuve au sein du code AVBP , elle n'a pas été retenue pour le choix des simulations.

4.3.3.2 Méthode PEA

La méthode PEA (Pré-Exponential Ajusted) peut être vue comme une simplification de la méthode à une étape avec ajustements de *Linan et al.* [37] en se limitant à l'ajustement de la constante pré-exponentielle de la réaction oxydant/fuel.

Quand la constante pré-exponentielle est laissée constante pour toutes les richesses, on retrouve les inconvénients majeurs d'un schéma à une étape : malgré un bon comportement dans la plage de richesses pauvres, la combustion s'emballe pour des régimes riches et surestime à la fois la vitesse de flamme et la température de fin de combustion. Ajuster la constante pré-exponentielle permet de retrouver un comportement correct pour toutes les richesses. On écrit alors un schéma pour le taux de réaction sous la forme :

$$\dot{\omega} = A(\phi) Y_F^{nF} Y_O^{nO} e^{-Ta/T} = A_0 f(\phi) Y_F^{nF} Y_O^{nO} e^{-Ta/T} \tag{4.50}$$

où $f(\phi)$ est la fonction correctrice. Elle vaut 1 en régime pauvre et tend vers 0 en régime riche. Deux fonctions différentes sont tracées sur la figure 4.5.

A partir des résultats du schéma cinétique à deux étapes CM2, c'est-à-dire sans la PEA, et du schéma complexe [22], on peut construire une fonction $f(\phi)$ comme la racine carrée du rapport de la vitesse de flamme réelle et de la vitesse de flamme du schéma à deux étapes CM2 pour une plage de richesses donnée et la multiplier à la constante pré-exponentielle de la loi d'Arrhénius. Ainsi, on obtient un schéma cinétique à deux étapes PEA qui bénéficie du gain CPU d'un schéma à deux étapes et qui respecte le domaine de combustion (selon ϕ) du carburant.

Si la PEA ne donne pas de réponse à la question de la surestimation de la température des gaz brûlés comme le ferait un schéma de Linan (cf. 4.3.3.1) -et qui pour un mélange stoechiométrique avoisine les 100K-, on peut lui accorder que pour une mise en place relativement triviale dans le code de calcul numérique, elle rend possible un gain CPU considérable pour une adéquation acceptable avec la physique. Comme souvent en LES, il faut savoir faire le choix de la rapidité de calcul et du degré de précision que nécessite une simulation. Notons cependant qu'il faut pouvoir calculer la richesse Φ en tout point, ce qui n'est facile que si les nombres de Schmidt de toutes les espèces sont égaux.

4.3.3.2.1 PEA du schéma à 2 étapes CM2 Afin de corriger la surestimation de la température des gaz brûlés, la méthode PEA a été appliquée au schéma méthane/air à deux étapes décrit en section 4.3.2.2. Dans un premier temps, les valeurs des nombres de Schmidt de toutes les espèces ont été fixées à 0.6933, de manière à ce que le nombre de Lewis soit égal à 1. La valeur choisie pour Sc correspond à la valeur du nombre de Prandtl des gaz brûlés d'une flamme stoechiométrique. Les constantes du schéma cinétique sont inchangées (cf. table 4.2). La correction de la constante pré-exponentielle peut s'appliquer de deux manières différentes, sur la première étape uniquement.

4.3.3.2.1.1 Méthode 1 La fonction correctrice $f(\Phi) = A(\Phi)/A_0$ est définie par :

$$f(\Phi) = \begin{cases} 1 \text{ if } \Phi \leq 1 \\ 0.5 * \left(1 + tanh\left(\frac{\Phi_0 - \Phi}{\delta}\right)\right) \\ +B * 0.25 * \left(1 + tanh\left(\frac{\Phi - \Phi_1}{\sigma}\right)\right) * \left(1 + tanh\left(\frac{\Phi_2 - \Phi}{\sigma}\right)\right) \text{ if } \Phi > 1 \end{cases} \tag{4.51}$$

Les coefficients de la fonction correctrice sont regroupés dans la table 4.3.

TAB. 4.3 - *Constantes de la fonction PEA du schéma méthane/air à deux étapes.*

Φ_0	δ	B	Φ_1	Φ_2	σ
0.1	1.8	0.7	0.55	1.3	0.15

Seule les zones riches sont affectées par la PEA, représentée sur la figure 4.5, ceci étant assuré par un test sur la valeur de Φ.

4.3.3.2.1.2 Méthode 2 Cette méthode, contrairement à la précédente, ne nécessite pas de test sur Φ. La fonction correctrice (4.52), représentée sur la figure 4.5, donne d'elle-même des valeurs égales à 1 pour des régimes pauvres. Ses coefficients sont regroupés dans la table 4.4.

$$f(\Phi) = 0.5 * \left(1 + tanh\left(\frac{\Phi_0 - \Phi}{\delta}\right)\right)$$

$$+ \quad B * 0.25 * \left(1 + tanh\left(\frac{\Phi - \Phi_1}{\sigma}\right)\right) * \left(1 + tanh\left(\frac{\Phi_2 - \Phi}{\sigma}\right)\right) \tag{4.52}$$

TAB. 4.4 - *Constantes la fonction PEA du schéma méthane/air à deux étapes.*

Φ_0	δ	B	Φ_1	Φ_2	σ
1.3	0.15	0.15	1.4	2	0.1

Les deux fonctions PEA sont très proches l'une de l'autre (Fig. 4.5). Elles permettent toutes les deux d'obtenir une vitesse de flamme correcte, en régime pauvre comme en régime riche (Fig. 4.6), avec un avantage pour la deuxième méthode. Les températures de fin de combustion obtenues avec les deux méthodes PEA sont identiques (Fig. 4.7 et montrent une légère différence avec le schéma à deux étapes CM2 d'origine, due à l'hypothèse $Le = 1$.

La fonction PEA a d'abord été développée avec la méthode 1. C'est la fonction utilisée dans tous les calculs utilisant une cinétique chimique réduite des parties II et III et nommée CM2-PEA.

La méthode 2 a ensuite été développée, de manière à simplifier l'intégration dans le code de calcul AVBP en évitant de calculer la richesse locale dans chaque cellule à chaque pas de temps. Cette fonction PEA est celle qu'il faudra privilégier à l'avenir.

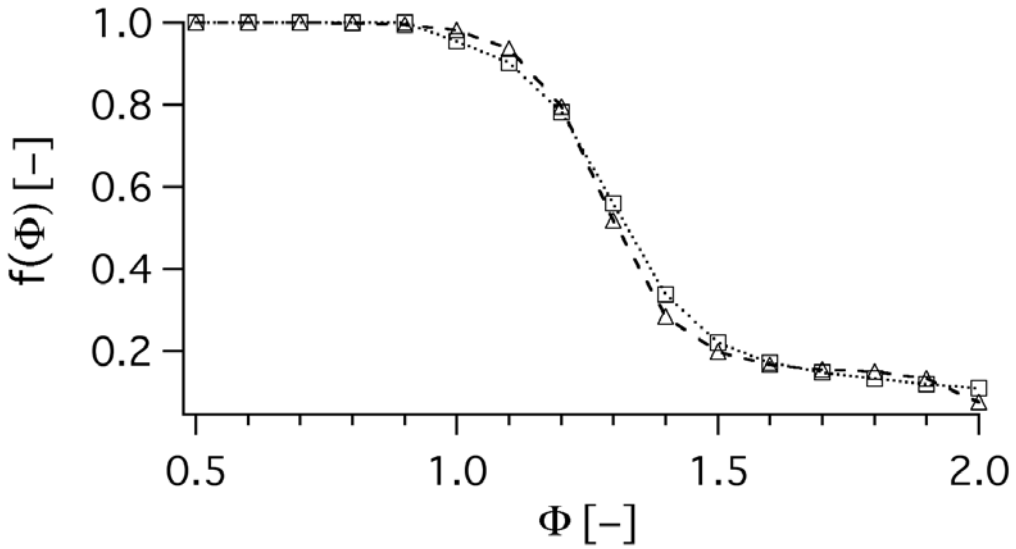


FIG. 4.5 - *Fonction PEA du schéma méthane/air à deux étapes. (⋯⊡⋯) Méthode 1 ; (− − △ − − −) Méthode 2.*

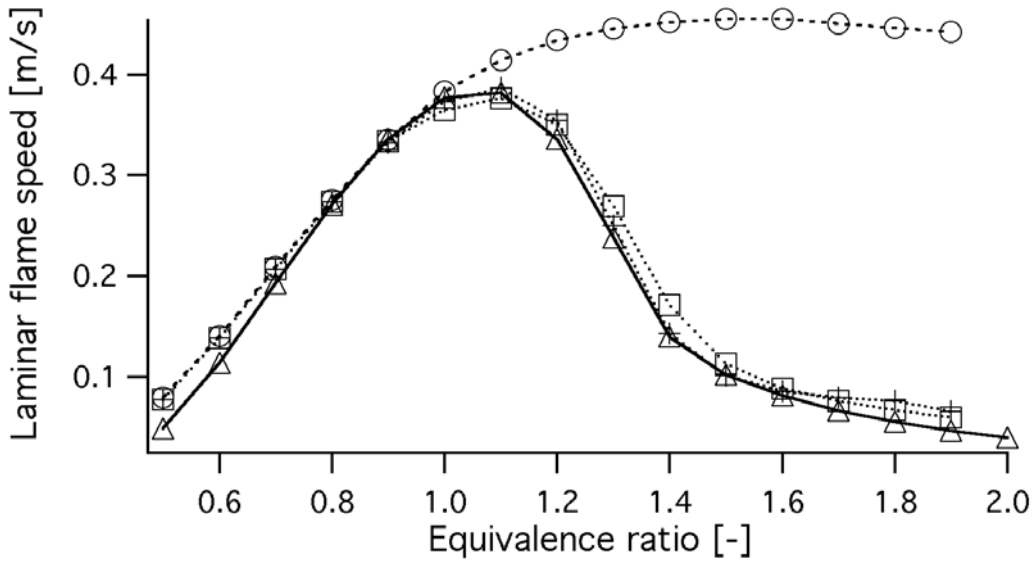


FIG. 4.6 - *Vitesse de flamme en fonction de la richesse. (—△—) GRI-MECH; (– – –○– – –) 2 étapes CM2 (sans PEA); (···⊡···) 2 étapes avec PEA, méthode 1 ; (··+···) 2 étapes avec PEA, méthode 2.*

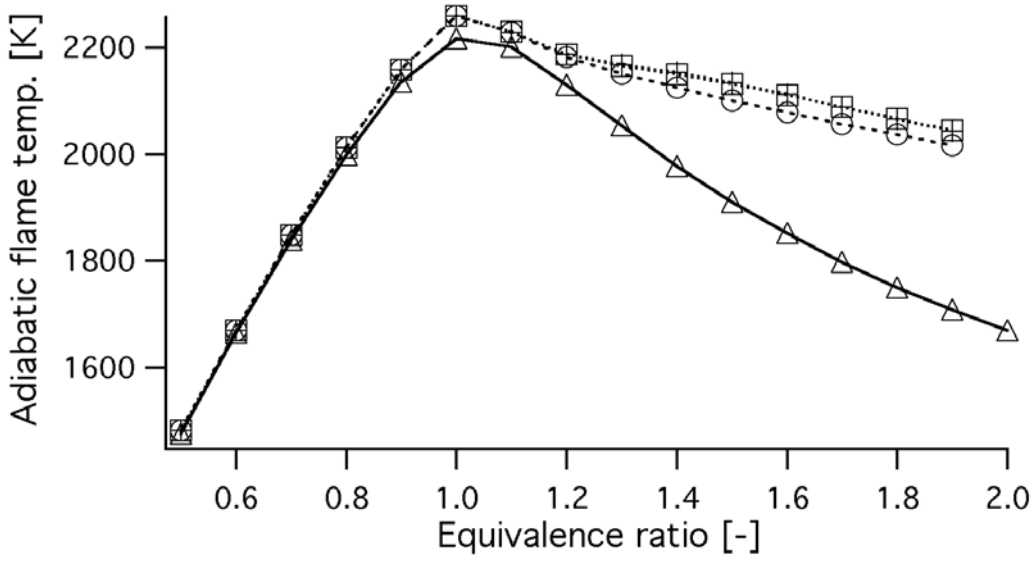


FIG. 4.7 - *Température adiabatique de fin de combustion en fonction de la richesse. (—△—) GRI-MECH; (– – –○– – –) 2 étapes CM2 (sans PEA); (···⊡···) 2 étapes avec PEA, méthode 1 ; (··+···) 2 étapes avec PEA, méthode 2.*

4.4 La méthode tabulée FPI

Il existe d'autres méthodes permettant de calculer les termes sources sur les espèces et l'énergie. Il s'agit, entre autres, de toute une gamme de méthodes qui ne résolvent pas explicitement le transport des espèces ni de l'énergie dans le code LES. Les fractions massiques Y_k, les taux de réaction ω_k et la température T sont calculées à partir de tables ou bibliothèques préétablies. Les entrées sont réduites à une ou deux variables qui sont en général la fraction de mélange z pour les flammes de diffusion (paramétré par le taux de dissipation scalaire ξ suivant les hypothèses simplificatrices) et une variable d'avancement c pour les flammes prémélangées. Les modèles qui veulent prendre en compte la combustion partiellement prémélangée utilisent les deux. Les bibliothèques $Y_k\left(z,c\right), \omega_k\left(z,c\right)$ et $T(z,c)$ sont construites le plus souvent sur des structures de flamme laminaire (diffusion ou prémélange). Le principal avantage de ces méthodes réside dans la précision dont les bibliothèques de flammelettes peuvent bénéficier si elles sont construites à partir de cinétiques complexes. Elles recourent alors à des procédure de réduction de dimensionnalité de la bijection de type ILDM (Intrinsic Low Dimensional Manifold) [81, 115, 163]. Cette technique est basée sur l'analyse des temps caractéristiques chimiques. Un anneau (une hypersurface) de faible dimension peut être obtenue, généralement pour des conditions opératoires données (ϕ, P, T), en calculant les vecteurs et valeurs propres du système chimique. Après avoir calculé l'anneau, on peut le paramétrer à l'aide d'un nombre restreint de coordonnées, i.e. opérer une projection dans un sous-espace de dimension inférieure. Les coordonnées du sous-espace sont en général à choisir arbitrairement parmi les fractions massiques de produits de combustion (Fig. 4.8). Ce nombre peut être encore réduit mais pose des restrictions au niveau de la validité de l'approche. La procédure est très précise pour les zones chaudes de la flamme ou proches de l'équilibre. Par contre la zone de préchauffage est souvent mal modélisée car elle nécessite une dimensionnalité assez importante pour être décrite correctement. Les temps caractéristiques courts associés à cette zone sont par définition négligés dans l'approche ILDM. Cette zone est donc souvent approximée linéairement dans l'espace des phases (Fig. 4.8), induisant par exemple une mauvaise estimation de la vitesse de flamme. L'approche FPI (Flame Prolongation of Ildm [39–41, 50, 124, 125]) propose une modification de l'ILDM afin de pallier ces défauts. FPI conserve l'anneau monodimensionnel ILDM décrivant l'état d'équilibre associé à un mélange donné, puis le complète par un anneau bidimensionnel correspondant à la trajectoire d'une flamme de prémélange stationnaire dans l'espace des phases. Dans FPI, les entrées de la table sont donc réduites à deux variables i.e. z ou/et c, s'apparente donc à un ILDM de dimension deux. La table FPI est construite à l'aide de calcul de flamme laminaire 1D prémélangée. L'approche n'est donc pleinement valide que pour les régimes de combustion prémélangée ou partiellement prémélangée. C'est d'ailleurs cette hypothèse sur la structure de flamme qui permet une telle réduction de dimensionnalité. FPI suppose que toute structure de flamme de prémélange peut être cartographiée dans le sous espace (z, c).

Si l'on s'attache à noter les défauts inhérents à ces méthodes, on peut noter en premier lieu, que l'implémentation des accès aux tables peut nécessiter des techniques logicielles spéciales afin de limiter l'impact des requêtes en termes de performance. Des outils de prétraitement (CHEMKIN par exemple) sont nécessaires afin de générer la table. Alternativement, la table peut être construite au fur et à mesure du calcul. Le gain provient alors de la réutilisation des informations stockées lors des requêtes précédentes [117]. Mais leur limitation principale tient dans les hypothèses posées pour définir z en particulier, puisque cela devient impossible dès lors que le carburant et oxydant sont injectés par plus de deux entrées, à des températures différentes, ce qui est très limitant pour des configurations industrielles.

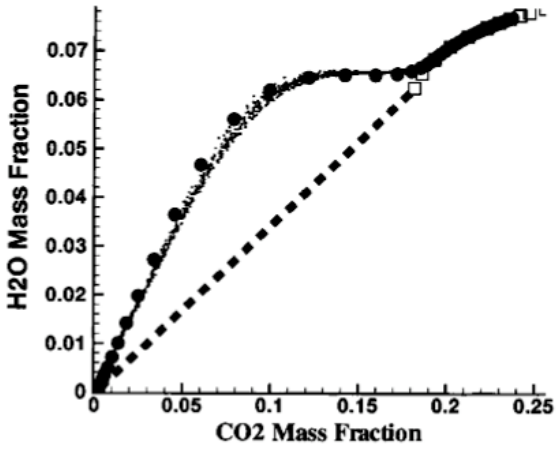


FIG. 4.8 - *Projection d'une flamme prémélangée turbulente (DNS) $CO/H_2/air$ en chimie complexe dans le sous-espace (Y_{CO2}, Y_{H2O}). (○) : état d'équilibre, (●) : Trajectoire Flamme Laminaire 1D dans les mêmes conditions, (–) : approximation linéaire de la zone froide. Source : [50]*

En particulier, le fait d'utiliser des lois du type $Y_k\left(z,c\right)$ fait qu'en pratique, l'ensemble des espèces chimiques ne dépend plus que de deux paramètres, z et c.

Il est clair que la validité de telle méthodes reste limitée à des cas où la topologie de la flamme est connue et correspond aux hypothèses de construction des lois $Y_k\left(z,c\right)$. Traiter dans le même calcul, un allumage, une propagation , ou une extinction, peut alors devenir délicat. Enfin, la résolution du transport de z et c ne dispense pas des problèmes numériques de propagation de front raides sur maillages lâches, ni du traitement de la raideur des termes sources de combustion.

Deux méthodes peuvent être utilisées pour donner les taux de réactions des espèces au code CFD. La première méthode (4.4.1) est de tabuler les taux de réaction des k espèces en fonction de z et c. La seconde méthode (4.4.2) est de tabuler les fractions massiques des espèces et de reconstruire, dans le code de calcul, les taux de réactions des k espèces.

4.4.1 Tabulation des taux de réaction

Il s'agit de la méthode la plus simple : les taux de réaction issus de la chimie détaillée sont directement stockés dans la base de données. Les intérêts de cette approche sont à la fois la simplicité et l'accord du dégagement de chaleur avec celui de la chimie détaillée. En effet, comme les taux de réactions des espèces et les enthalpies de formation sont tabulés, le dégagement de chaleur peut uniquement prendre les valeurs prédites par la table chimique. Le principal point faible de cette approche est que la détermination du taux de réaction d'une espèce ne tient pas compte de la quantité locale de celle-ci, de sort que des fractions massiques négatives peuvent localement apparaître. De la même façon,une dérive numérique à travers la flamme est possible et la composition des espèces transportées obtenue à l'équilibre peut être

différente de celle de la chimie détaillée.

4.4.2 Tabulation des fractions massiques

Cette méthode, proposée par *O. Colin* [28], consiste à reconstruire les taux de réactions des espèces à partir des fractions massiques tabulées. Elle évite les dérives liées à l'utilisation simple des $\dot{\omega}_k$ tabulés dans le code LES observée par *J. Galpin* [47]. La relation entre les deux s'écrit :

$$\widetilde{\dot{\omega}_k} = \frac{\widetilde{Y_k^{tab}}\left(c^{t+\tau}\right) - \widetilde{Y_k}\left(t\right)}{\tau} \tag{4.53}$$

où $\widetilde{Y_k}$ est la fraction massique filtrée de l'espèce k, qui est déterminée par une équation de transport. $\widetilde{Y_k^{tab}}$ est la fraction massique tabulée et évaluée à $c = c^{t+\tau}$. Le paramètre de ralaxation τ quantifie le temps de retour vers la trajectoire FPI. Il est de l'ordre de quelques pas de temps : $\tau = n.\Delta t$ avec $n \simeq 5$.

La variable d'avancement à l'instant $t + \tau$ est déterminée à partir de la variable d'avancement $\overline{c}$ de l'instant t et du taux de réaction $\widetilde{\dot{\omega}_c}\left(\overline{c}\left(t\right)\right)$:

$$c^{t+\tau} = \overline{c}\left(t\right) + \tau\widetilde{\dot{\omega}_c}\left(\overline{c}\left(t\right)\right)t \tag{4.54}$$

Le principal intérêt de cette approche est la possibilité d'assurer la cohérence entre les fractions massiques transportées et celles de la chimie détaillée. Les fractions massiques négatives disparaissent, et la composition des gaz brûlés à l'équilibre est contrôlée. Un autre avantage concerne la taille mémoire des tables. En effet, les fractions massiques nécessitent moins de points en avancement pour être discrétisées par rapport aux taux de réaction, car les gradients des espèces dY_i/dY_c sont moins raides que ceux des taux de réaction $d\dot{\omega}_i/dY_c = d^2Y_i/(dY_c.dt)$, homogènes à une dérivée seconde.Si on s'intéresse uniquement à l'état gaz brûlé, l'approche de tabulation des fractions massiques est efficace même avec très peu de points de discrétisation.

Malgré des avantages évidents, la méthode de reconstruction peut induire localement des comportements non physiques :

- La résolution de forts gradients par les schémas centrés peut induire l'apparition d'oscillations ou *wiggles* en amont et en aval des gradients. Dans une flamme, ces faibles oscillations peuvent alors apparaître dans les gaz frais et brûlés. En conséquence, des fractions massiques peuvent être localement négatives ou dépasser l'équilibre. La méthode induit alors des taux de réaction non nuls dans les zones non-réactives, ce qui n'a pas de sens physique.
- Le taux de dégagement de chaleur résulte de la reconstruction des espèces par relaxation, il n'est donc pas directement contrôlé, ce qui peut se révéler être un désavantage.

Un autre inconvénient de la méthode de tabulation des fractions massiques est la nécessité d'interpoler en avancement deux fois dans la base de donnée : une première fois pour $\widetilde{\omega_{Y_c}}\left(\overline{c}\left(t\right)\right)$ et une seconde pour les fractions massiques $\widetilde{Y_k^{tab}}\left(c^{t+\tau}\right)$. Le coût CPU de cette approche est quasiment le double de celui de

la tabulation directe des taux de réaction.

4.5 Comparaison des schémas à 2 étapes et de FPI sur des flammes de prémélange laminaires

Les chimies réduites et tabulées décrites dans le chapitre 3 sont testées sur des flammes monodimensionnelles en prémélange. Les tests sont réalisés à l'aide de COSILAB (**http ://www.softpredict.com**), CANTERA (**http ://www.cantera.org**) ou AVBP. Le schéma complet GRI-MECH est considéré comme la référence.

La valeur de richesse présentée ($\Phi = 0.83$) correspond à la richesse à laquelle sont réalisés l'essentiel des calculs PRECCINSTA présentés par la suite (chapitres 7 et 8) et s'approche de la valeur du mélange global de la configuration TECFLAM ($\Phi_g = 0.808$, chapitre 9). La température des gaz frais est de 300 K et la pression atmosphérique de 1 atmosphère.

Les valeurs des vitesses de flamme obtenues avec les différentes méthodes de cinétique chimique sont regroupées dans la table 4.5. La valeur obtenue avec le GRI-MECH est prise en référence. La modélisation FPI avec tabulation des fractions massique donne une valeur de vitesse de flamme raisonnable. Les cinétiques chimiques réduites à 2 étapes CM2 et CM2-PEA donnent de bonnes vitesses de flamme. Bien que la fonction PEA ne soit pas active en régime pauvre, la valeur obtenue avec la PEA est légèrement moins bonne que sans PEA, du fait de l'hypothèse $Le = 1$ prise pour réaliser la PEA.

TAB. 4.5 - *Vitesses de flamme des différentes méthodes de cinétique chimique.*

	Vitesse de flamme [m/sec]	Erreur relative [%]
GRI-MECH	0.3003	-
FPI Yi	0.2842	5.36
CM2	0.2956	1.57
CM2 - PEA	0.2938	2.17

Les résultats des températures et fractions massiques à l'équilibre sont disponibles dans les tables 4.6 et 4.7. La température de fin de combustion obtenue à l'aide du schéma complet GRI-MECH est de 2042 K (figs. 4.9 et 4.15). Les températures de fin de combustion obtenues avec les autres méthodes de cinétique chimique sont en adéquation avec le résultat du schéma complet, l'erreur relative restant inférieure à 1,15 %.

Les résultats pour chacune des fractions massiques transportées sont présentés en fonction de la variable de progrès $c = (Y_{CO} + Y_{CO_2})/(Y_{CO} + Y_{CO_2})_{eq}$ dans les figures 4.9 à 4.14, et 4.15 à 4.20. La méthode FPI reste systématiquement très proche des résultats du GRI-MECH, les cinétiques réduites donnant des résultats moins bons.

L'espèce CO est présentée sur les figures 4.14 et 4.20. Les résultats obtenus via la méthode FPI (Fig. 4.14) sont très proches des résultats du schéma complet, même si la valeur à l'équilibre de CO

diffère de 5,7 % par rapport au GRI-MECH (table 4.7) . Les valeurs intermédiaires obtenues avec le schéma à deux étapes sans PEA (CM2) sont éloignées des résultats du schéma complet (Fig. 4.20) : elles sont largement sous-estimées. La valeur à l'équilibre (table 4.7) présente une erreur relative de 12,3 % par rapport au schéma complet.

Les résultats pour la température et les fractions massiques de O_2, $H2O$ et CO sont représentés spatialement sur les figures 4.21 à 4.24 pour deux cinétiques chimiques : FPI avec tabulation des fractions massiques et schéma réduit à deux étapes avec PEA (CM2-PEA). La forme du front de flamme est très proche entre FPI et le schéma complet GRI-MECH. Des différences apparaissent entre le schéma réduit à deux étapes avec PEA et le GRI-MECH, particulièrement sur la fin du front de flamme : le schéma réduit semble arriver trop rapidement à la valeur d'équilibre. Ces différences sont très probablement dues aux effets complexes de la chimie complète tels que les dissociations. Ces effets sont pris en compte dans la méthode FPI, mais ne le sont pas tous dans la cinétique chimique réduite.

En conclusion, la méthode FPI avec tabulation des fractions massiques semble être la meilleure : la vitesse de flamme et la température de fin de combustion sont respectés, tout comme les profils et valeurs à l'équilibre des espèces principales. Mais cette étude permet aussi de noter que, à la richesse concernée ($\Phi = 0.83$), le schéma réduit à 2 étapes avec PEA (CM2-PEA) donne de très bons résultats, pour une implémentation relativement simple dans le code de calcul.

TAB. 4.6 - *Valeurs à l'équilibre et erreurs relatives de température et de fractions massiques des différentes méthodes de cinétique chimique.*

	Temperature		YO2		YCH4	
	Valeur à l'équilibre [K]	Erreur relative [%]	Valeur à l'équilibre [-]	Erreur relative [%]	Valeur à l'équilibre [-]	Erreur relative [%]
GRI-MECH	2042.2	-	$0.3858.10^{-1}$	-	0	-
FPI Yi	2040.9	0.06	$0.3832.10^{-1}$	0.68	0	0
CM2	2059.2	0.83	$0.3831.10^{-1}$	0.70	0	0
CM2 - PEA	2059.2	0.83	$0.3831.10^{-1}$	0.70	0	0

TAB. 4.7 - *Valeurs à l'équilibre et erreurs relatives de fractions massiques des différentes méthodes de cinétique chimique.*

	YCO2		YH2O		YCO	
	Valeur à l'équilibre [-]	Erreur relative [%]	Valeur à l'équilibre [-]	Erreur relative [%]	Valeur à l'équilibre [-]	Erreur relative [%]
GRI-MECH	0.1241	-	0.1034	-	$0.8238.10^{-3}$	-
FPI Yi	0.1252	0.88	0.1026	0.78	$0.7770.10^{-3}$	5.69
CM2	0.1254	1.08	0.1038	0.39	$0.9250.10^{-3}$	12.28
CM2 - PEA	0.1254	1.08	0.1038	0.39	$0.9250.10^{-3}$	12.28

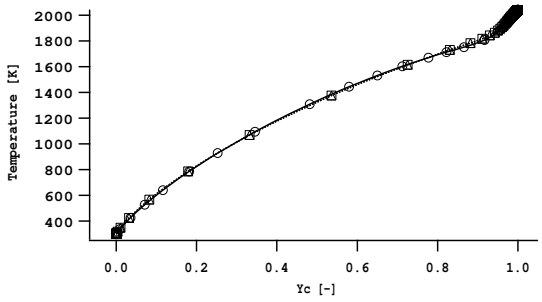


FIG. 4.9 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de température. (—○—) GRI-MECH; (···⊡···) FPI, tabulation des taux de réaction; (····△··) FPI, tabulation des fractions massiques.*

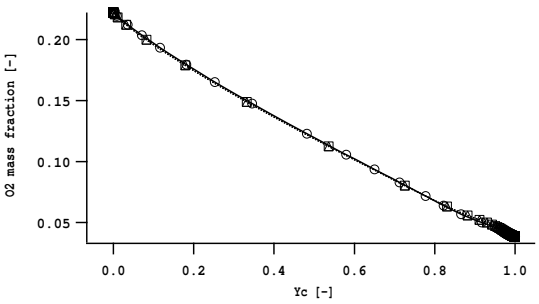


FIG. 4.10 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{O_2}. (—○—) GRI-MECH; (···⊡···) FPI, tabulation des taux de réaction; (····△··) FPI, tabulation des fractions massiques.*

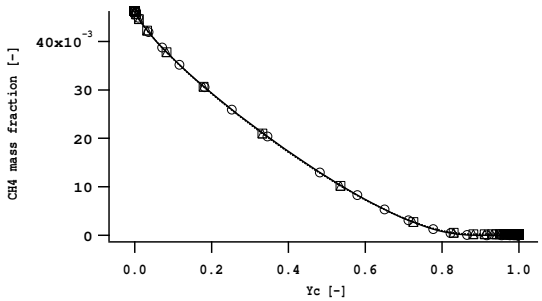


FIG. 4.11 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CH_4}. (—○—) GRI-MECH; (···⊡···) FPI, tabulation des taux de réaction; (····△··) FPI, tabulation des fractions massiques.*

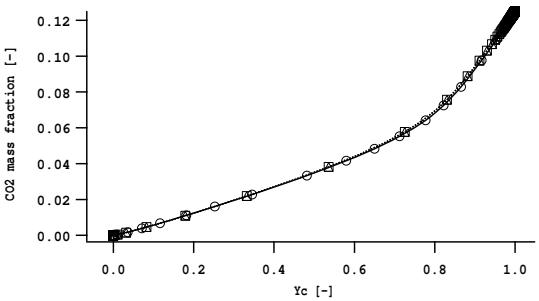


FIG. 4.12 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CO_2}. (—○—) GRI-MECH; (···⊡···) FPI, tabulation des taux de réaction; (····△··) FPI, tabulation des fractions massiques.*

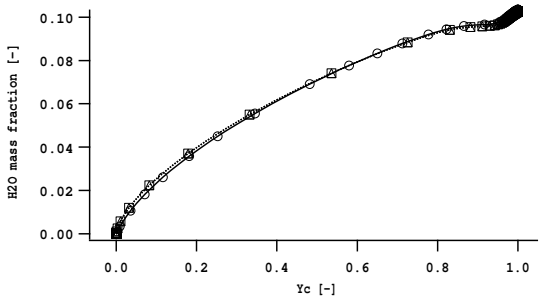


FIG. 4.13 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{H_2O}. (—○—) GRI-MECH; (···⊡···) FPI, tabulation des taux de réaction; (····△··) FPI, tabulation des fractions massiques.*

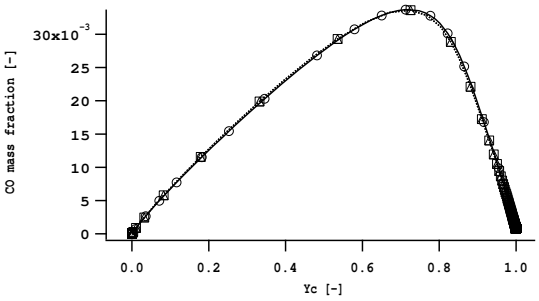


FIG. 4.14 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CO}. (—○—) GRI-MECH; (···⊡···) FPI, tabulation des taux de réaction; (····△··) FPI, tabulation des fractions massiques.*

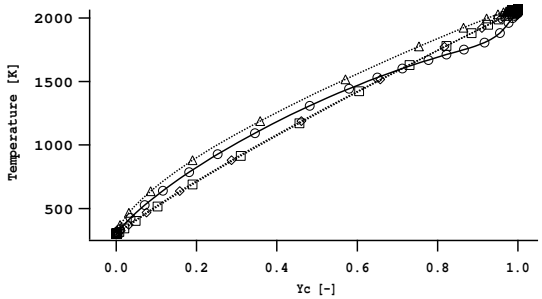


FIG. 4.15 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de température. (—○—) GRI-MECH; (···□···) Schéma 1 étape avec PEA; (···△···) CM2; (···◇···) CM2 - PEA.*

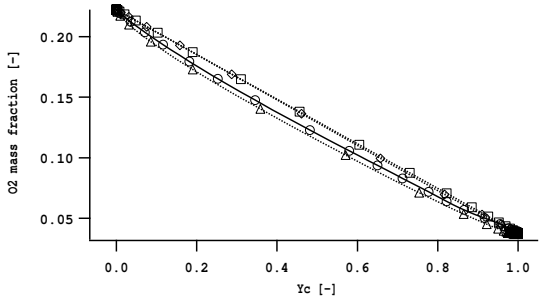


FIG. 4.16 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{O_2}. (—○—) GRI-MECH; (···□···) Schéma 1 étape avec PEA; (···△···) CM2; (···◇···) CM2 - PEA.*

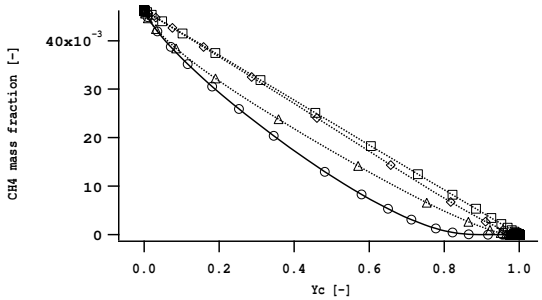


FIG. 4.17 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CH_4}. (—○—) GRI-MECH; (···□···) Schéma 1 étape avec PEA; (···△···) CM2; (···◇···) CM2 - PEA.*

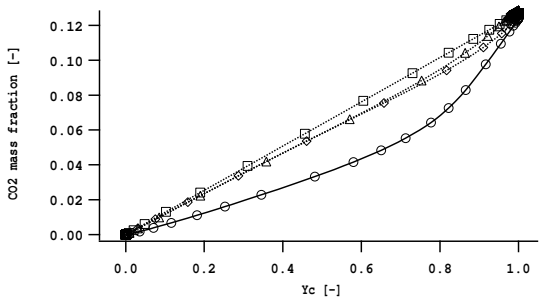


FIG. 4.18 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CO_2}. (—○—) GRI-MECH; (···□···) Schéma 1 étape avec PEA; (···△···) CM2; (···◇···) CM2 - PEA.*

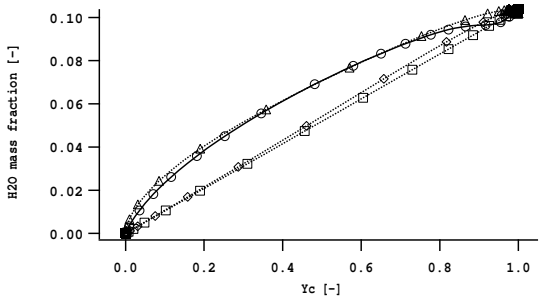


FIG. 4.19 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{H_2O}. (—○—) GRI-MECH; (···□···) Schéma 1 étape avec PEA; (···△···) CM2; (···◇···) CM2 - PEA.*

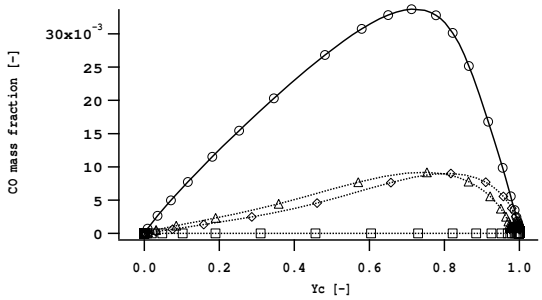


FIG. 4.20 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CO}. (—○—) GRI-MECH; (···□···) Schéma 1 étape avec PEA; (···△···) CM2; (···◇···) CM2 - PEA.*

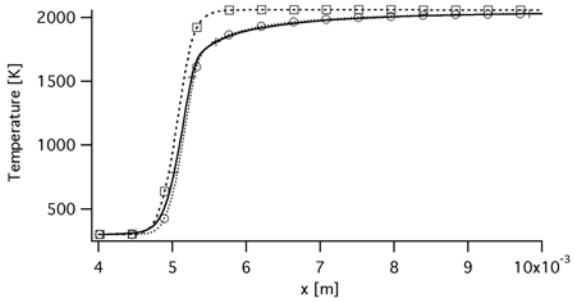


FIG. 4.21 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de température. (—+—) GRI-MECH; (·····o·····) FPI, tabulation des fractions massiques; (– –□– – –) CM2 - PEA.*

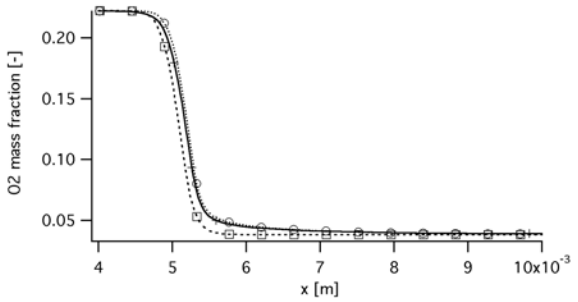


FIG. 4.22 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{O_2}. (—+—) GRI-MECH; (·····o·····) FPI, tabulation des fractions massiques; (– –□– – –) CM2 - PEA.*

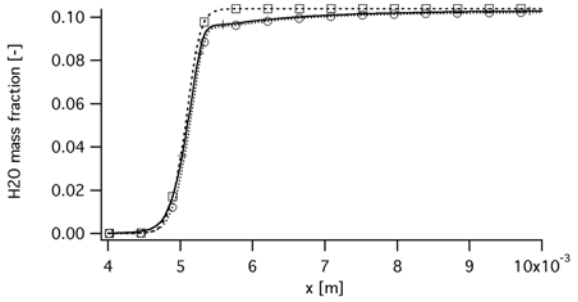


FIG. 4.23 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{H_2O}. (—+—) GRI-MECH; (·····o·····) FPI, tabulation des fractions massiques; (– –□– – –) CM2 - PEA.*

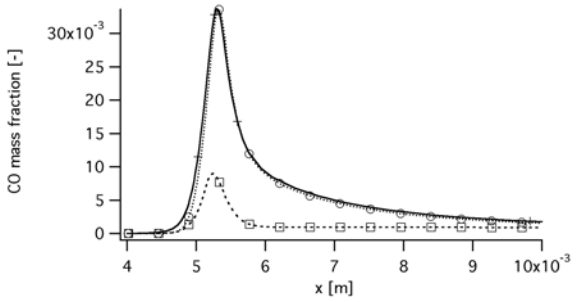


FIG. 4.24 - *Flamme monodimensionnelle prémélangée $\Phi = 0,83$: profil de Y_{CO}. (—+—) GRI-MECH; (·····o·····) FPI, tabulation des fractions massiques; (– –□– – –) CM2 - PEA.*

Chapitre 5

Approche numérique

5.1 Discrétisation *Cell-Vertex*

Le code de mécanique des fluides AVBP utilise un solveur aux volumes finis pour discrétiser les équations de conservation d'un écoulement turbulent diphasique réactif. Deux techniques sont disponibles pour les méthodes volumes finis :

1. la formulation *Cell-Vertex* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées aux noeuds de la cellule considérée et les valeurs moyennes des flux sont obtenues en moyennant le long des arêtes limitant la cellule
2. la formulation *Cell-Centered* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées au centre des volumes de contrôle (les cellules du maillage) et les valeurs des éléments voisins sont moyennées au travers des limites de la cellule pour calculer les flux

La discrétisation *Cell-Vertex* est utilisée dans le code AVBP.

5.1.1 Approche des résidus pondérés

Considérons d'abord les équations de Navier-Stokes d'un écoulement laminaire monophasique non réactif dans leur formulation conservative :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{0} \tag{5.1}$$

où $\mathbf{w}$ est le vecteur des variables conservatives et $\vec{\mathcal{F}}$ est le tenseur de flux correspondant. Ce tenseur est décomposé en une partie visqueuse et une partie non visqueuse au travers de l'équation 5.2. Les termes spatiaux sont approchés dans chaque volume de contrôle pour en déduire le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'équation 5.3.

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^I(\mathbf{w}) + \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{w}, \vec{\nabla}\mathbf{w}) \tag{5.2}$$

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial\Omega_j} \vec{\mathcal{F}} \cdot \vec{n}\, d\mathcal{S} \tag{5.3}$$

où $\partial\Omega_j$ est la projetée de Ω_j le long de la normale $\vec{n}$. L'approche *Cell-Vertex* est applicable à des types de cellules quelconques et apparaît donc très utile pour des maillages hybride. Le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'équation 5.3 est d'abord calculé pour chaque cellule en utilisant une loi d'intégration simple appliquée aux faces. Pour des faces triangulaires, les composantes individuelles du flux sont supposées varier linéairement. Pour des faces quadrilatères, où les noeuds peuvent ne pas être coplanaires, afin d'assurer l'exactitude de l'intégration pour des éléments quelconques, chaque face est divisée en triangles et intégrée sur chaque triangle. La valeur du flux est obtenue après moyennage des quatre triangles (deux divisions le long des deux diagonales). Cette propriété qui permet de conserver la linéarité joue un rôle important car elle assure une bonne précision même sur des maillages irréguliers. Il est utile d'écrire le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'équation 5.3 au travers d'une cellule quelconque. L'équation 5.3 devient alors l'équation 5.4.

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{\mathcal{F}}_i \cdot d\vec{S}_i, \tag{5.4}$$

où $\vec{\mathcal{F}}_i$ est une approximation de $\vec{\mathcal{F}}$ aux nœuds, N_d représente le nombre de dimensions de l'espace et $\{i \in \Omega_j\}$ sont les sommets de la cellule. Dans cette formulation, l'information géométrique a été factorisée en termes $d\vec{S}_i$ qui sont associés aux noeuds individuels de la cellule et non à ses faces. $d\vec{S}_i$ est la moyenne des normales pondérées par les surfaces des faces triangulaires d'un nœud commun i, $i \in \Omega_j$. Pour assurer la consistance, $\sum_{i \in \Omega_j} d\vec{S}_i = \vec{0}$. La linéarité de l'opérateur de divergence est préservée si le volume V_{Ω_j} est défini par l'équation 5.5.

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d^2} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{x}_i \cdot d\vec{S}_i, \qquad \text{avec} \qquad \nabla \cdot \vec{x} = N_d \tag{5.5}$$

Une fois les résidus calculés, le schéma semi-discret est défini par l'équation 5.6.

$$\frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j | k \in \Omega_j} D^k_{\Omega_j} V_{\Omega_j} R_{\Omega_j}, \tag{5.6}$$

où $D^k_{\Omega_j}$ est la matrice de distribution qui fait une projection pondérée du centre Ω_j vers le noeud k (*scatter*) et V_k est le volume de contrôle associé à chaque noeud k. La conservation est garantie si $\sum_{k \in \Omega_j} D^k_{\Omega_j} = I$. Dans le contexte présent, l'équation 5.6) est résolue, en utilisant une méthode explicite Euler ou une méthode Runge-Kutta à plusieurs étapes en temps, afin d'obtenir une solution stationnaire. La matrice de distribution est définie par l'équation 5.7.

$$D^k_{\Omega_j} = \frac{1}{n_n}(I + C \frac{\delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}} \vec{\mathcal{A}}_{\Omega_j} \cdot d\vec{S}_k), \tag{5.7}$$

Le nombre de noeuds de Ω_j est n_n et $\vec{\mathcal{A}}$ est la matrice jacobienne du tenseur des flux. Le schéma classique centré, obtenu en choisissant $C = 0$, est stable combiné avec des pas de temps Runge-Kutta. Un schéma de type Lax-Wendroff est obtenu en choisissant la constante C dépendante du nombre de dimensions du problème et du type de cellule. Une forme simple de C est définie par : $C = n_n^2/2N_d$.

5.1.2 Calcul des gradients

Afin de déterminer les valeurs des gradients $\vec{\nabla}\mathbf{w}$ aux nœuds, une approximation de sa valeur liée à la cellule Ω_j est d'abord calculée puis distribuée aux nœuds k. Le gradient à la cellule, défini par l'équation 5.8, suit une description identique à celle utilisé pour définir la divergence à l'équation 5.4. Une approximation de ce gradient à la cellule est ainsi obtenue et définie par l'équation 5.9. Une approximation de ce gradient au nœud, définie par l'équation 5.10, est obtenue en utilisant une moyenne pondérée par le volume de la cellule.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x}\right)_C \approx \frac{1}{V_C}\int\int_{\partial\Omega_C} \mathbf{w}\cdot\vec{n}\partial S \tag{5.8}$$

$$\left(\vec{\nabla}\mathbf{w}\right)_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}}\sum_{i\in\Omega_j}\overline{\mathbf{w}}_i\overline{\vec{dS}_i} \tag{5.9}$$

$$\left(\vec{\nabla}\mathbf{w}\right)_k = \frac{1}{V_k}\sum_{j|k\in\Omega_j} V_{\Omega_j}(\vec{\nabla}\mathbf{w})_{\Omega_j} \tag{5.10}$$

5.2 Schémas numériques

Les schémas numériques utilisés lors de cette thèse ne sont pas présentés en détail et le lecteur se référera aux publications originelles . Cependant, les points essentiels caractérisant ces trois schémas sont présentés :

schéma Runge-Kutta 3 [56] De type volumes finis, d'ordre 3 en temps avec une intégration Runge-Kutta trois étapes, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC et a peu près aussi rapide.

schéma Lax-Wendroff [72] De type volumes finis, d'ordre 2 en temps avec une intégration Runge-Kutta une étape, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC mais environ deux fois plus rapide

schéma TTGC [29] De type éléments finis, d'ordre 3 en temps, d'ordre 3 en espace, très précis sur des maillages non structurés, approprié à l'étude LES en géométrie complexe

5.3 Modèles de viscosité artificielle

5.3.1 Introduction

Les schémas de discrétisation spatiale disponibles dans AVBP sont des schémas centrés. Ces types de schémas sont connus pour être naturellement sujets à des oscillations hautes fréquences (*wiggles*) dans les régions de forts gradients. Une méthode efficace pour pallier à ce problème est l'utilisation d'un terme de *Viscosité Artificielle* (VA) pour adoucir les fronts trop raides. Cette section décrit les senseurs (section 5.3.2) et les opérateurs (section 5.3.3) de la VA.

5.3.2 Senseurs

Un senseur ζ_{Ω_j} est un paramètre compris entre 0 et 2 défini pour chaque cellule Ω_j. Dans le cas où la solution est bien résolue, le senseur est égal à 0 alors que dans le cas où la solution a de fortes variations locales, le senseur est égal à 2 et la VA est appliquée. Ce senseur est obtenu en comparant différentes évaluations du gradient d'un scalaire comme la pression, l'énergie totale ou la fraction massique. Si les évaluations sont identiques, le senseur est fixé à 0. Par contre, si les deux évaluations donnent des valeurs différentes, le senseur est déclenché. Le point crucial est de trouver une fonction pour le senseur qui soit différente de zéro seulement dans les zones utiles. Deux senseurs différents sont disponibles dans AVBP : le senseur de Jameson $\zeta^J_{\Omega_j}$ [60] et le senseur de Colin $\zeta^C_{\Omega_j}$ [29] qui est dérivé du senseur de Jameson.
Notation l'indice k désigne les variables liées à un sommet k de la cellule considérée et l'indice Ω_j désigne les variables liées à la cellule Ω_j.

5.3.2.1 Senseur de Jameson

Le senseur de Jameson $\zeta^J_{\Omega_j}$ lié à la cellule Ω_j (défini par l'Eq. 5.11) est le maximum de tous les senseurs ζ^J_k liés aux sommets k (définis par l'Eq. 5.12). S est le scalaire évalué par le senseur et (Δ^k_1, Δ^k_2) sont des évaluations différentes du gradient définies par l'Eq. 5.13. Δ^k_1 mesure la variation de S au sein de la cellule Ω_j. Δ^k_2 est une estimation de la même grandeur en utilisant $(\vec{\nabla}S)_k$, le gradient de S au nœud k. Ce senseur varie proportionnellement à l'amplitude de la déviation par rapport à l'évolution linéaire. Ce senseur a une évolution *douce* d'un point de vue numérique et s'applique parfaitement pour des cas quasi-stationnaires.

$$\zeta^J_{\Omega_j} = \max_{k\in\Omega_j} \zeta^J_k \tag{5.11}$$

$$\zeta^J_k = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + |S_k|} \tag{5.12}$$

$$\Delta^k_1 = S_{\Omega_j} - S_k \qquad \Delta^k_2 = (\vec{\nabla}S)_k.(\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \tag{5.13}$$

5.3.2.2 Senseur de Colin

Dans le cas d'écoulements turbulents fortement instationnaires, il est nécessaire de se munir d'un senseur plus précis, c'est-à-dire plus faible lorsque l'écoulement est suffisamment résolu et presque maximum dans les zones de non-linéarités fortes : le senseur de Colin, défini par les Eq. 5.14 à 5.18.

- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est très petit lorsque Δ^k_1 et Δ^k_2 sont petits comparés à S_{Ω_j}. Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si Δ^k_1 et Δ^k_2 sont de signes opposés) ou à des faibles gradients bien résolus par le schéma (si Δ^k_1 et Δ^k_2 sont de même signe).
- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est petit lorsque Δ^k_1 et Δ^k_2 sont du même signe et du même ordre de grandeur (même si cet ordre de grandeur est grand). Ceci correspond à des gradients raides bien résolus par le schéma.
- $\zeta^C_{\Omega_j}$ est grand lorsque Δ^k_1 et Δ^k_2 sont de signes opposés et qu'un des deux est beaucoup plus grand que l'autre. Ceci correspond à une oscillation numérique de grande amplitude.

– $\zeta^C_{\Omega_j}$ est grand si Δ^k_1 ou Δ^k_2 est du même ordre de grandeur que S_{Ω_j}. Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

Il est à noter que les définitions de Ψ et ϵ^k changent pour l'équation de conservation des fractions massiques : la valeur de référence n'est plus S_k mais 2, valeur maximum de la fraction massique.

$$\zeta^C_{\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\Psi-\Psi_0}{\delta}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{-\Psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{5.14}$$

$$\text{avec :} \quad \Psi = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k|+\epsilon_1 S_k}\zeta^J_k\right) \tag{5.15}$$

$$\Delta^k = |\Delta^k_1 - \Delta^k_2| - \epsilon^k \max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right) \tag{5.16}$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2\left(1-\epsilon_3\frac{\max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right)}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+S_k}\right) \tag{5.17}$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \qquad \delta = 1.10^{-2} \qquad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \qquad \epsilon_2 = 0.95 \qquad \epsilon_3 = 0.5 \tag{5.18}$$

5.3.3 Opérateurs

Les modèles de viscosité artificielle utilisent deux opérateurs dont les propriétés sont :

2ème ordre cet opérateur agit comme une viscosité classique. Il adoucit les gradients et introduit de la dissipation artificielle. Il est associé à un senseur. Ainsi, le schéma numérique garde son ordre de précision dans les zones à faible gradient et assure la stabilité et la robustesse du schéma dans les zones critiques. A l'origine, il était utilisé pour les chocs mais peut en fait adoucir n'importe quel gradient trop fort.

4ème ordre cet opérateur est utilisé pour diminuer les *wiggles*.

Les contributions à la cellule de l'opérateur du 2ème ordre (Eq. 5.20) et de l'opérateur du 4ème ordre (Eq. 5.21) sont reportées sur les nœuds de cette cellule Ω_j (Eq. 5.19).

$$dw_k = \sum_j R^2_{k\in\Omega_j} + \sum_j R^4_{k\in\Omega_j} \tag{5.19}$$

$$\text{avec :} \quad R^2_{k\in\Omega_j} = -\frac{1}{N_v}\frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}}\mathsf{smu2}\;\zeta_{\Omega_j}(w_{\Omega_j}-w_k) \tag{5.20}$$

$$\text{avec :} \quad R^4_{k\in\Omega_j} = \frac{1}{N_v}\frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}}\mathsf{smu4}\left[(\vec{\nabla}w)_{\Omega_j}\cdot(\vec{x}_{\Omega_j}-\vec{x}_k)-(w_{\Omega_j}-w_k)\right] \tag{5.21}$$

Notation smu2 et smu4 sont des coefficients sans dimension fixés par l'utilisateur.

5.4 Maillages

Dans les calculs de mécanique des fluides numérique avec les méthodes RANS, on cherche souvent à obtenir des résultats indépendants du maillage. La LES étant conçue pour dégénérer vers la DNS au

fur et à mesure du raffinement du maillage, on peut dire que la LES n'est pas indépendante du maillage. Raffiner apporte ainsi de la précision aux résultats en permettant de résoudre des échelles de plus en plus petites. Ainsi, il apparaît dans la stratégie de maillage une alternative fondamentale qui va dicter l'organisation même du code :

- soit utiliser des maillages structurés
- soit utiliser des maillages non-structurés (hybrides ou non)

Maillages structurés	**Maillages non-structurés**
• Efficacité de l'algorithme de calcul sur les hexahèdres (travail séquentiel). • Volume plus grand de la maille hexahédrique qu'une maille tétrahédrique à iso-résolution, permettant des pas de temps plus grands (explicite). • Précision réelle plus grande du schéma numérique (ordre effectif [29]).	• Rapidité / facilité de la génération du maillage sur des géométries complexes. • Possibilité de raffiner à loisir dans les zones d'intérêt (zone de flamme, zone de mélange, panache d'un jet transverse...). • Pas de direction préférentielle pouvant perturber l'écoulement.

TAB. 5.1 - *Avantages respectifs des maillages structurés et non-structurés*

La Tab. 5.1 donne un panorama des avantages respectifs des deux stratégies. Dans notre étude, on peut identifier clairement les zones où la résolution revêt un caractère critique[1] :

- Les jets de gaz naturel dans l'écoulement transverse.
- La zone de mélange située entre les jets de fuel et la chambre de combustion.
- La région où la flamme va se stabiliser.

Dès lors, la nécessité de raffiner efficacement le maillage dans ces zones, tout en préservant une bonne qualité du maillage[2], oriente clairement vers le choix d'un maillage non-structuré.

5.5 Parallélisation et « speedup »

Les calculs de simulation aux grandes échelles sont assez gourmands en termes de temps de calcul. Pour obtenir des résultats dans un temps acceptable, la parallélisation (utilisation de plusieurs processeurs simultanément) est nécessaire.

Cette parallélisation doit être efficace pour être pleinement utilisable. Dans AVBP, la librairie MPI est utilisée pour la communication entre processeurs. Des tests de performance ("speedup") ont été effectués [145, 146] et démontrent la capacité du code AVBP à utiliser parallèlement un grand nombre de processeurs sans perdre d'efficacité. La Figure C.1 (voir Annexe C) montre clairement l'accroissement quasi idéal de la vitesse de calcul du code AVBP en fonction du nombre de processeurs employés.

[1] Les zones proches des parois ne sont pas ici considérées comme critiques car elles sont prises en compte par la loi de paroi.
[2] Rapports d'aspects, taille minimum, étirement et cisaillement des mailles, etc...

Deuxième partie

Flamme turbulente partiellement prémélangée

Table des matières

6 Présentation de la configuration PRECCINSTA **85**

6.1 Un projet européen . . . 85
6.2 Un injecteur Turboméca . . . 85
6.3 Géométrie . . . 86
6.3.1 Le plénum . . . 86
6.3.2 L'injecteur . . . 88
6.3.3 La chambre de combustion . . . 89
6.3.4 Le tuyau d'échappement . . . 89
6.4 Les campagnes de mesures effectuées par le DLR . . . 89
6.4.1 Campagnes de mesures LDV . . . 90
6.4.2 Campagnes de mesures Raman . . . 90
6.4.3 Campagnes de mesures de chemiluminescence OH . . . 90
6.4.4 Campagnes de mesures PLIF sur les radicaux OH . . . 90
6.5 Présentation des calculs LES . . . 91
6.5.1 Conditions aux limites d'entrée/sortie . . . 91
6.5.2 Conditions aux murs . . . 92
6.5.3 Chimie . . . 92

7 LES de la chambre de combustion PRECCINSTA parfaitement prémélangée : comparaisons PCM-FPI, PCM-2 étapes et TFLES-2 étapes **93**

7.1 Le maillage utilisé pour la LES de la chambre avec hypothèse de prémélange parfait . . . 93
7.2 Cas calculés . . . 98
7.3 Comparaison TFLES-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de vitesse . . . 98
7.3.1 Champs de vitesse moyenne . . . 98
7.3.2 Champs de fluctuation de vitesse . . . 98
7.3.3 Conclusions sur les champs de vitesse . . . 98
7.4 Comparaison TFLES-2 étapes vs PCM-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de température et de fractions massiques . . . 102

7.4.1 Comparison of LES combustion model . . . 102
7.4.2 Comparison of chemical kinetics modelisation . . . 107
7.4.3 Conclusions . . . 110
7.5 Influence des paramètres de la méthode PCM-FPI . . . 111
7.5.1 Effet du type de tabulation : taux de réactions vs fractions massiques . . . 111
7.5.2 Effet du raffinement de la table . . . 115
7.5.3 Effet de la constante de dissipation scalaire . . . 119
7.6 Influence des paramètres du modèle de combustion turbulente TFLES . . . 122
7.6.1 Les fonctions d'efficacité . . . 122
7.6.2 Données d'entrée . . . 122
7.6.3 Résultats . . . 122
7.6.3.1 *Colin* vs *Colin dynamique* vs *Charlette* . . . 124
7.6.3.2 Résultats sur le cas turbulent parfaitement prémélangé . . . 124
7.7 Conclusions . . . 130

8 LES couplée mélange/combustion de la chambre de combustion partiellement prémélangée PRECCINSTA 131
8.1 Résumé . . . 131
8.2 Introduction . . . 131
8.3 LES methodology for reacting flows . . . 133
8.4 Results . . . 136
8.4.1 Mixing study (SOFT case) . . . 136
8.4.2 Influence of acoustic boundary conditions . . . 152
8.5 Conclusion . . . 160

Chapitre 6

Présentation de la configuration PRECCINSTA

Ce chapitre contient des extraits de la thèse de S. Roux [128].

6.1 Un projet européen

Ce chapitre poursuit les études menées par Sébastien Roux [128] dans cadre du contrat européen de recherche PRECCINSTA (PREdiction and Control of Combustion INStabilities in Tubular and Annular Gas Turbine Combustion Systems) dont l'objectif était de comprendre, de prédire et de contrôler les causes des instabilités de combustion dans les systèmes de combustion prémélangés. L'enjeu sous-jacent est explicitement identifié par les coordinateurs du contrat : diminuer les émissions de NOx sans nuire à la sécurité des implantations industrielles. Parmi les contractants qui ont oeuvré ensemble à la réalisation de ces études, on peut notamment relever la présence de grands industriels concernés : Alstom, Turboméca, Rolls-Royce, Siemens, EDF, Ansaldo.

La chambre de combustion Preccinsta est documentée sur le site :

http ://www.dlr.de/vt/forschung/projekte/beispielhafte_projekte/preccinsta/

6.2 Un injecteur Turboméca

Le dispositif expérimental retenu dans ce projet est un injecteur manufacturé par Turboméca. Il reprend dans ses caractéristiques générales une famille d'injecteurs bien connus de l'industriel. Plutôt que d'insérer cet injecteur dans une chambre de combustion inspirée de celles montées en pratique sur les hélicoptères, il a été toutefois décidé de se placer dans la situation plus académique d'une chambre de combustion droite de section carrée qui présente un rétrécissement en sortie pour guider les gaz brûlés

dans un tuyau d'échappement qui débouche sur l'atmosphère.

Le recours à une chambre de combustion de section carrée permet l'usage de vitres en quartz planes et parallèles pour autoriser les accès optiques nécessaires aux mesures optiques. Les vitres en quartz offrent le double avantage de résister aux températures qui règnent au sein de la chambre et d'induire une différence de marche constante entre les rayons laser qui les traversent. Enfin, même si une campagne de mesure n'exploite pas directement les quatre faces transparentes de la chambre de combustion, il est nécessaire de toujours travailler avec les quatre vitres en quartz. En effet, L'utilisation d'une paroi en métal aurait pour effet de voir la flamme se « pencher » vers celle-ci de par la différence de conductivité thermique entre les deux matériaux. La figure 6.1 montre un dessin du brûleur étudié.

Dans des conditions de fonctionnement réelles, les brûleurs sont soumis à des contraintes de pression et de température telles qu'il est nécessaire de mettre en place des systèmes de refroidissements et d'effectuer un long et coûteux travail d'installation de l'expérience afin de s'assurer de la sécurité des expérimentateurs. On peut citer à titre d'exemple le contrôle à distance de l'expérience, l'usage de vitres blindées, le dimensionnement des pièces du dispositif expérimental. De plus, l'instrumentation peut souffrir de ces conditions particulièrement contraignantes : si s'offrir un accès optique dans une chambre de combustion qui fonctionne à pression atmosphérique n'est déjà pas une mince affaire, on comprendra que la même chambre fonctionnant sous une pression d'une dizaine de bars est compliquée et coûteuse. L'alimentation en gaz comprimés est aussi un point à prendre en compte dans ces questions de mise en place d'expérience. Sans s'étendre davantage sur les difficultés de la mise en place de manipulations sur une chambre de combustion sous pression, on retiendra simplement qu'une campagne de mesures minutieuses comme l'a été celle menée par le DLR est beaucoup plus facile sur un dispositif à pression ambiante : tous les résultats PRECCINSTA correspondent donc à des cas atmosphériques.

6.3 Géométrie

Le brûleur étudié développe une puissance de l'ordre de 30kW. On peut le décomposer en 4 parties :
- le plénum,
- l'injecteur,
- la chambre de combustion et
- le tuyau d'échappement.

6.3.1 Le plénum

La totalité de l'air qui va circuler dans le dispositif est amené par un système de pompes dans la première partie du brûleur : le plénum (Fig. 6.1). Cette partie globalement semblable à un cylindre comblé par un plus petit cylindre sert de chambre de tranquillisation pour le fluide. Il débouche sur trois orifices en forme de haricots qui font le lien entre le plénum et l'injecteur.

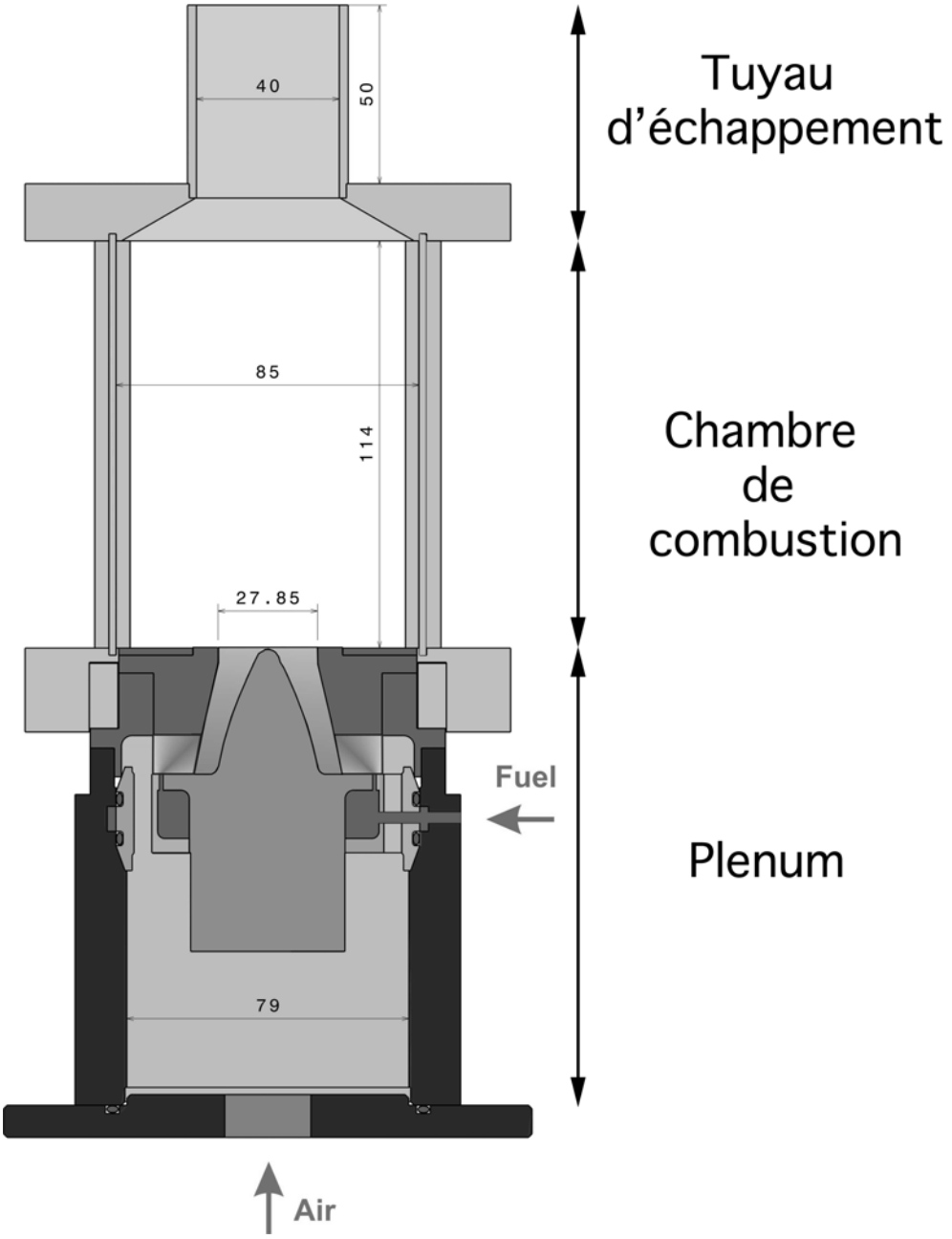


FIG. 6.1 - *Configuration PRECCINSTA : dessin du plénum, de l'injecteur, de la chambre de combustion et du tuyau d'échappement (côtes en millimètres).*

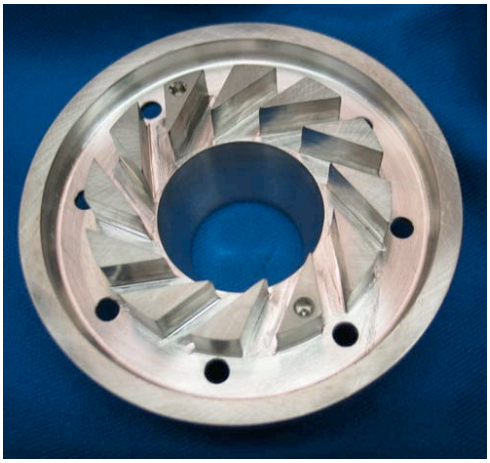


FIG. 6.2 - *Photographie de la pièce constituant l'injecteur. On y voit les fentes empruntées par l'écoulement d'air pour introduire le swirl (design Turboméca).*

6.3.2 L'injecteur

L'injecteur, bien que classique, est la partie la plus compliquée du dispositif. L'air amené du plénum par les trois haricots débouche dans un tore et prend un virage pour entrer ensuite dans 12 vannes (sortes de couloirs de section rectangulaire) obliques permettant d'induire une giration de l'écoulement (Fig. 6.2). A la sortie de ces vannes qui constituent ce que l'on nomme souvent une vrille, l'air glisse ensuite sur une la paroi extérieure d'un cône dont la pointe coïncide avec l'arrivée dans la chambre de combustion (Fig. 6.3). Le méthane est injecté par 12 petits tubes de 1 mm de diamètre perpendiculaires aux 12 vannes de la vrille (Fig. 6.4).

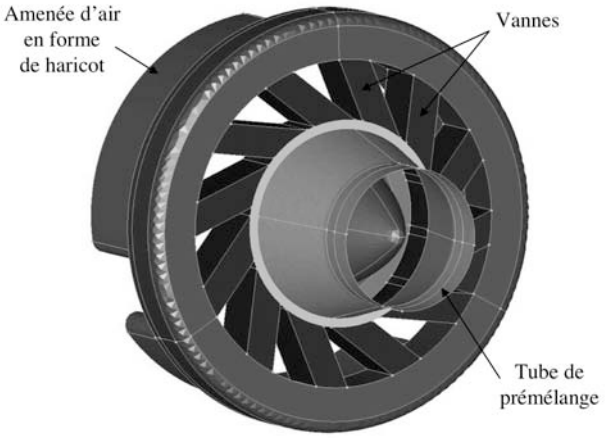


FIG. 6.3 - *L'injecteur PRECCINSTA (maillage de peau pour le fluide)*

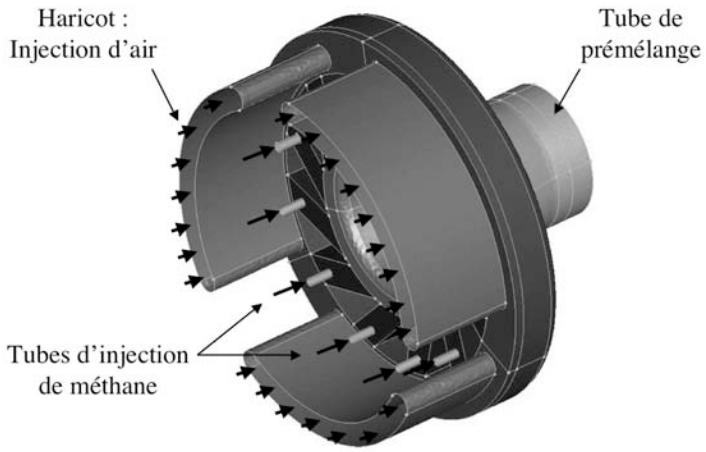


FIG. 6.4 - *L'injecteur est pourvu de trous d'injection de méthane de 1mm de diamètre*

6.3.3 La chambre de combustion

C'est une chambre à section carrée de 85 mm de côté et de 114 mm de long (Fig. 6.1). Ses parois planes sont en quartz, tenues par 4 piliers métalliques. A froid, il y a du jeu entre les parois et les piliers car en montant en température, les piliers se dilatent et il ne faudrait pas qu'ils compriment les vitres en quartz au risque de les briser.

6.3.4 Le tuyau d'échappement

Précédé d'un court rétrécissement qui le relie à la chambre de combustion, le tuyau d'échappement (Fig. 6.1) a une section circulaire de 40 mm de diamètre et une longueur de 50 mm. Il débouche sur l'atmosphère (pression ambiante).

6.4 Les campagnes de mesures effectuées par le DLR

Les équipes de Berlin, de Stuttgart et de Cologne du DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) se sont partagé les campagnes d'expériences menées dans le cadre du projet PRECCINSTA sur le brûleur (Fig. 6.5). Celles-ci concernaient la LDV (Vélocimétrie Laser Doppler), des mesures Raman, la chemiluminescence sur les radicaux OH, de la PLIF (Fluorescence induite par laser planaire) sur les radicaux OH et des mesures de vitesses au fil chaud dans le cas du régime isotherme.

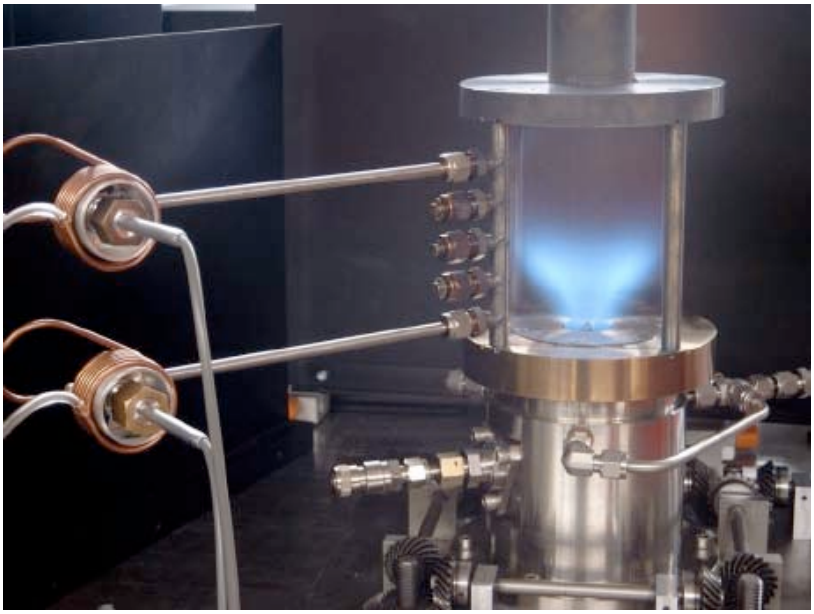


FIG. 6.5 - *Photographie du dispositif expérimental. A gauche, deux sondes de pression.*

6.4.1 Campagnes de mesures LDV

- Un premier cas isotherme ne fonctionnant qu'avec de l'air ;
- Un second cas réactif à la richesse de 0,70 ;
- Un troisième cas réactif à la richesse de 0,75.

6.4.2 Campagnes de mesures Raman

- Un premier cas réactif à la richesse de 0,70 ;
- Un second cas réactif à la richesse de 0,83.

6.4.3 Campagnes de mesures de chemiluminescence OH

- Un premier cas réactif à la richesse de 0,70 ;
- Un second cas réactif à la richesse de 0,83.

6.4.4 Campagnes de mesures PLIF sur les radicaux OH

- Un premier cas réactif à la richesse de 0,70 ;
- Un second cas réactif à la richesse de 0,83.

6.5 Présentation des calculs LES

Dans les premiers calculs de PRECCINSTA [47,93,129], le prémélange entrant dans la chambre était supposé parfait. L'article de *Meier et al.* de 2007 [88] a montré que les mesures d'espèces contredisaient cette hypothèse et qu'il fallait donc calculer aussi le mélange entre les 12 jets de CH_4 et l'air, ce qui complique considérablement le calcul. Au cours de cette thèse, nous sommes donc revenus sur l'hypothèse de mélange et deux configurations ont été calculées pour le brûleur PRECCINSTA :

- La chambre a d'abord été calculée en supposant le prémélange air/méthane parfait (chapitre 7) à deux richesses différentes (0,75 et 0,83). C'est sur ce cas que seront comparés TFLES et PCM-FPI.
- La même chambre a ensuite été calculée en prenant en compte l'alimentation en carburant au travers des 12 injecteurs. Le mélange entre le méthane et l'air avant l'entrée dans la chambre de combustion (chapitre 8) est ainsi calculé ce qui permet d'établir les limites de l'hypothèse de mélange parfait faite au chapitre 7 et par toutes les autres équipes ayant calculé PRECCINSTA. Ce calcul est fait avec TFLES.

Ces deux chapitres, complétés par les résultats expérimentaux du DLR, permettent d'évaluer les capacités des modèles de combustion TFLES et PCM et des cinétiques chimiques réduites ou tabulées.

Un aspect important de cette étude réside dans le choix du domaine de calcul qui libère l'analyse numérique de ses habituelles contraintes imposées par l'application des conditions aux limites. Les calculs commencent bien en amont de l'injecteur et se terminent largement en aval de la chambre de combustion. Dans ces conditions, les conditions aux limites sont extrêmement simples : le débit massique est imposé à l'entrée de l'ensemble du dispositif tandis que la pression atmosphérique est imposée loin en aval de la sortie de la chambre de combustion. Aucune condition aux limites (comme la vitesse, les espèces ou le profil de "swirl" à l'entrée) ne peut être ajustée pour faire concorder les calculs numériques avec les résultats expérimentaux. On verra cependant que derrière cette apparente simplicité se cache une autre difficulté : si on connaît les débits massiques à imposer en entrée, dans une zone où la forme exacte du profil de vitesse à peu d'importance, on ne connaît pas les impédances de la ligne d'air et de celle de méthane. On montrera que ces impédances contrôlent l'apparition d'instabilités au chapitre 8.

6.5.1 Conditions aux limites d'entrée/sortie

Le brûleur fonctionne à pression atmosphérique et l'air injecté affiche une température approximative de 300 K (expérimentalement, l'air est légèrement réchauffé par les parois du plénum) [88]. A l'entrée du plénum, on impose un profil plat de vitesse de 27 m/s (Re$\sim$45000) et il est vérifié que ce profil n'a aucune influence sur le calcul pourvu que le débit massique soit conservé égal à 12 g/s.

A la sortie de la chambre de combustion, une partie de l'atmosphère est prise en compte dans le domaine de calcul. Cet ajout coûteux en ressources CPU est néanmoins nécessaire puisqu'il permet aux ondes acoustiques qui atteignent la sortie de la chambre de combustion d'être proprement réfléchies ou transmises sans avoir à imposer d'impédance acoustique dans cette section du domaine étant donné que ce n'est pas une condition aux limites mais bien une partie du domaine de calcul.

Les deux cas présentés dans la section 6.5 correspondent à deux conditions limites d'entrée différentes :

- Dans le premier cas (hypothèse de prémélange parfait, chapitre 7), le mélange méthane/air est injecté dès l'entrée du plénum à une richesse de 0,75 (section 7.3) ou 0.83 (section 7.4).
- Dans le second cas (chapitre 8), de l'air pur est injecté par le plénum et du méthane pur est injecté par l'entrée de fuel.

6.5.2 Conditions aux murs

Des conditions de murs non glissants adiabatiques sont imposées sur toutes les parois du calcul. Le tenseur de sous-maille est décrit par le modèle WALE [96] (voir aussi section 3.3.2). Même si ce modèle peut prédire la turbulence aux murs comme cela est montré dans [96], le maillage près de la paroi n'est pas suffisamment raffiné pour résoudre la couche turbulente à la paroi pour tous les murs du brûleur. Cette limitation évidente est bien connue lorsqu'on aborde la LES dans les chambres de combustion mais n'a en réalité que peu d'effet sur les résultats. La comparaison entre les résultats LES et les mesures LDV montrent d'ailleurs que seule une zone limitée à la proximité immédiate des parois est affectée par ce déficit de résolution du maillage dans ces régions : la plus grande partie de l'activité turbulente est générée par les gradients de vitesse dans la chambre qui sont bien résolus quant à eux sur le maillage, justifiant ainsi la pertinence du choix du maillage. D'autres simulations réalisées avec des conditions de loi-de-paroi pour la LES ne montrent pas de différence significative avec la condition de non-glissement. On notera d'ailleurs que le calcul de *Roux et al.* [129] était effectué avec AVBP et des lois de parois.

6.5.3 Chimie

Deux types de modélisation de la chimie ont été utilisés :

- TFLES-Schéma réduit, détaillé dans les sections 4.1 et 4.3.2.2
- PCM-Schéma réduit, détaillé dans les sections 4.2 et 4.3.2.2
- PCM-FPI, détaillé dans les sections 4.2 et 4.4

Chapitre 7

LES de la chambre de combustion PRECCINSTA parfaitement prémélangée : comparaisons PCM-FPI, PCM-2 étapes et TFLES-2 étapes

7.1 Le maillage utilisé pour la LES de la chambre avec hypothèse de prémélange parfait

Le maillage LES utilisé dans ce chapitre est identique à ceux utilisés dans [47, 129]. Il est non structuré. Il comporte environ 500.000 noeuds soit près de 3 millions de cellules (cf. tableau 7.1). Le code AVBP est explicite en temps, c'est donc la CFL qui va fixer le pas de temps en fonction de la taille des cellules et de l'écoulement (vitesse convective + vitesse du son). Il est de l'ordre de 0,25 μs.

TAB. 7.1 - *Caractéristiques du maillage*

Nombre de cellules :	2 958 592
Nombre de noeuds :	514 475
Plus petite maille :	$0,000543043$ m
Plus grande maille :	$0,0673331$ m
Volume total du domaine :	$0,144077$ m^3
Volume du plus petit élément :	$2,97812.10^{-11}$ m^3

Le maillage s'étend du tuyau d'alimentation du plénum jusqu'à une partie de l'atmosphère dans laquelle aboutit le tuyau d'échappement des gaz issus de la chambre de combustion (Figs. 7.1 à 7.3). La prise en compte de l'atmosphère dans le maillage permet de ne pas faire de la sortie de la chambre de combustion ou du tuyau d'échappement une condition aux limites susceptible d'être déterminante quant

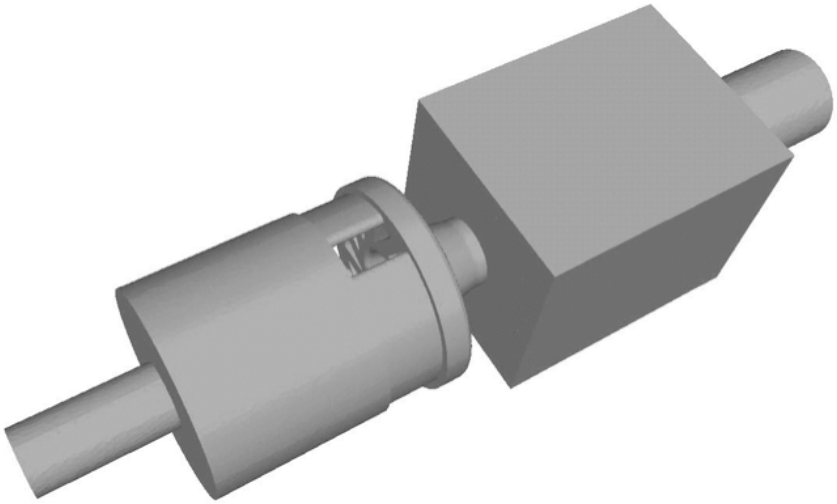


FIG. 7.1 - *Visualisation du domaine de calcul sans la partie "atmosphère"*

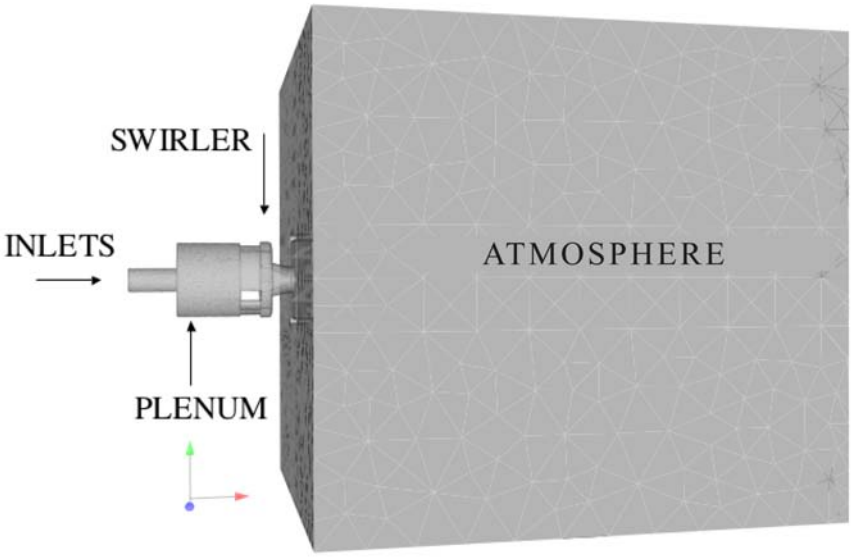


FIG. 7.2 - *Visualisation du domaine de calcul avec la partie "atmosphère"*

au comportement de l'ensemble de la simulation numérique.

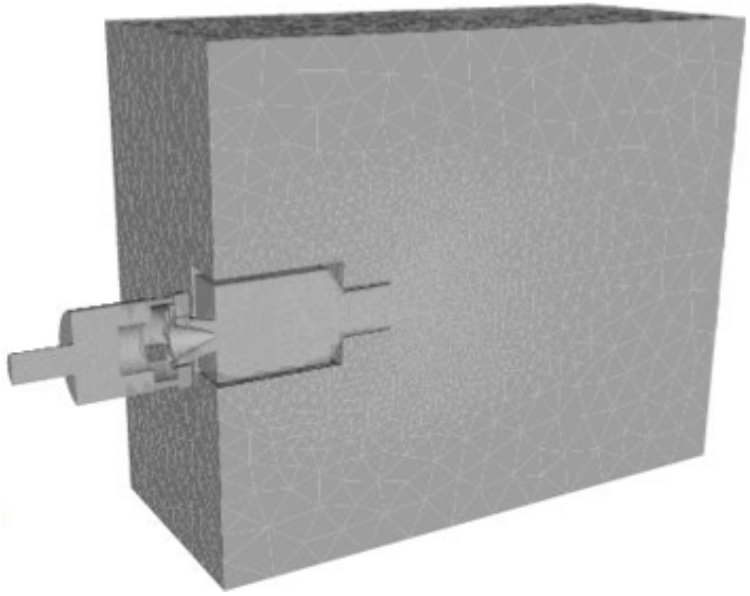


FIG. 7.3 - *Visualisation de la moitié du domaine de calcul complet*

La majorité des points du maillage se concentrent dans l'injecteur et dans la zone de flamme afin de correctement rendre compte de la dynamique de l'écoulement dans ces deux zones sensibles. Les figures 7.4 à 7.6 présentent le raffinement du maillage dans les vanes de l'injecteur, dans la zone de flamme et dans l'atmosphère. La distribution des cellules dans le domaine de calcul est la suivante :

- 20% dans le plénum et dans l'injecteur ;
- 50% dans la moitié amont de la chambre de combustion ;
- 20% dans la moitié aval de la chambre de combustion et
- 10% dans le tuyau d'échappement et l'atmosphère.

Les mailles très lâches en sortie du domaine de calcul (en aval de la partie de l'atmosphère maillée) permettent d'amortir numériquement les perturbations incidentes sur la condition limite de sortie et préviennent toute complication d'ordre numérique en sortie. Ceci n'influence pas la simulation dans le domaine étudié c'est-à-dire jusqu'en sortie de chambre de combustion.

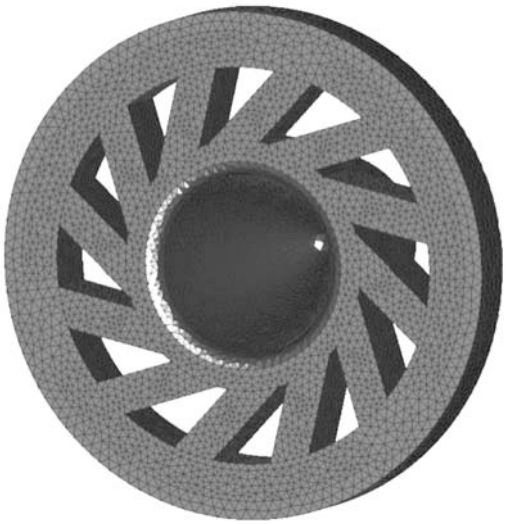


FIG. 7.4 - *Peau du maillage dans la vrille de l'injecteur*

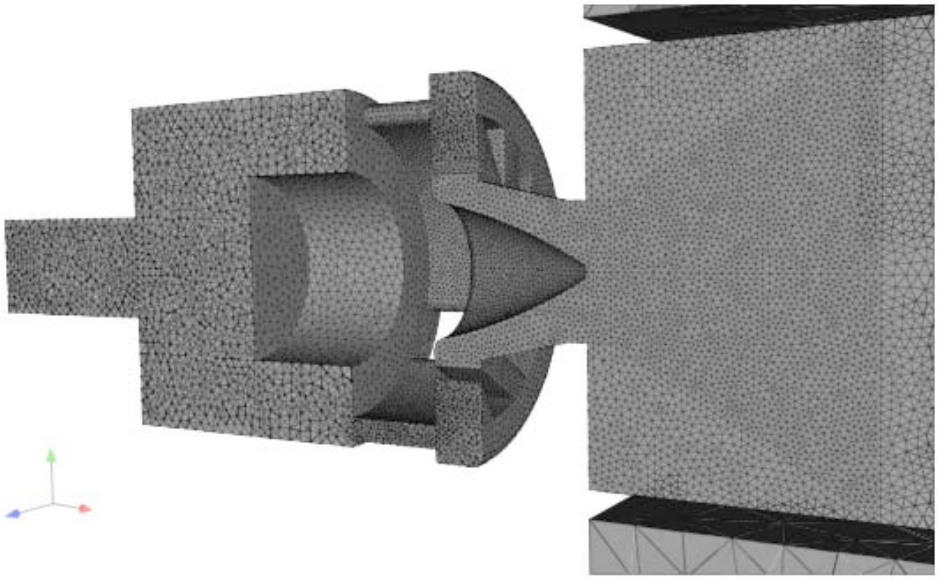


FIG. 7.5 - *Détail du raffinement dans le plénum, l'injecteur et la chambre de combustion : le maillage est plus fin là où a lieu la combustion.*

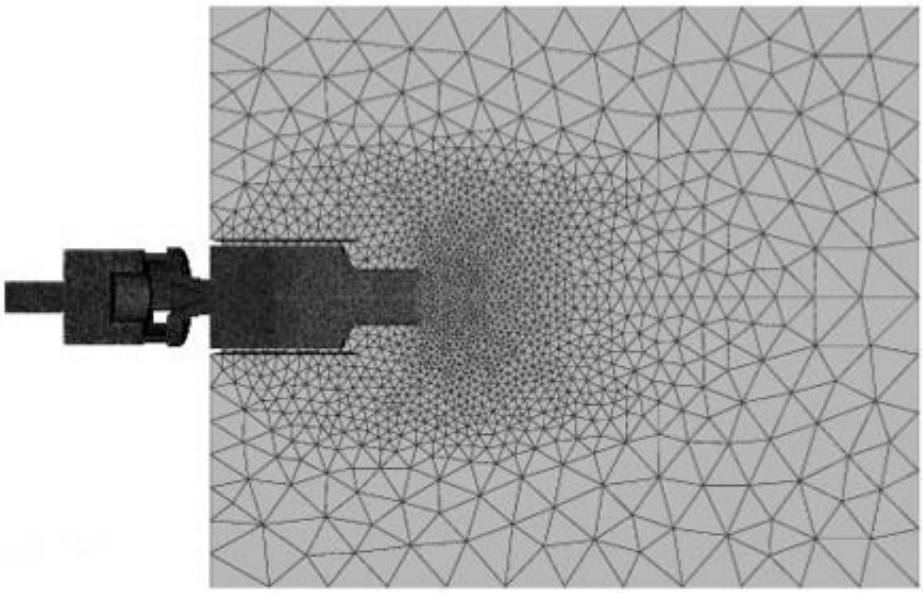


FIG. 7.6 - *L'atmosphère est grossièrement maillée à l'extérieur de la cheminée.*

7.2 Cas calculés

Les simulations réalisées ont été choisies afin de pouvoir être comparées aux mesures expérimentales. Ainsi, les deux simulations réactives ont été réalisées à deux richesses différentes :

- $\Phi = 0.75$: les champs de vitesse LES sont comparés aux champs obtenus expérimentalement par LDV
- $\Phi = 0.83$: les champs de température et fraction massique LES sont comparés aux champs obtenus expérimentalement par les mesures Raman

L'utilisation de 2 cas expérimentaux vient du fait qu'à $\Phi = 0.75$, les températures et fractions massiques n'ont pas été mesurées, tandis qu'à $\Phi = 0.83$, les champs de vitesses n'ont pas été mesurés.

7.3 Comparaison TFLES-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de vitesse

Les comparaisons TFLES-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de vitesse se font sur le cas expérimental à $\Phi = 0.75$. Les résultats présentés font suite aux travaux de *Roux et al.* [129] (TFLES-2 étapes) et de *Galpin et al.* [48] (PCM-FPI).

7.3.1 Champs de vitesse moyenne

- Vitesse axiale (7.7) : les simulations LES, que ce soit TFLES-2 étapes ou FPI-PCM, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. La simulation FPI-PCM semble mieux respecter l'ouverture du jet rotatif que la simulation TFLES-2 étapes.
- Vitesses radiales (7.8) et tangentielles (7.9) : les résultats LES sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

7.3.2 Champs de fluctuation de vitesse

- Vitesse axiale (7.10) : Les niveaux de fluctuations de vitesse radiale respectent l'ordre de grandeur des valeurs expérimentales, la simulation TFLES-2 étapes montrant un avantage à proximité de l'injecteur, tandis que FPI-PCM montre un avantage à distance de l'injecteur.
- Vitesses radiales (7.11) et tangentielles (7.12) : les résultats LES sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

7.3.3 Conclusions sur les champs de vitesse

Les simulations LES, que ce soit TFLES-2 étapes ou FPI-PCM, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux, que ce soit pour les champs de vitesse moyenne ou pour les fluctuations. Aucun des deux modèles ne montre d'avantage flagrant sur l'autre dans ces conditions.

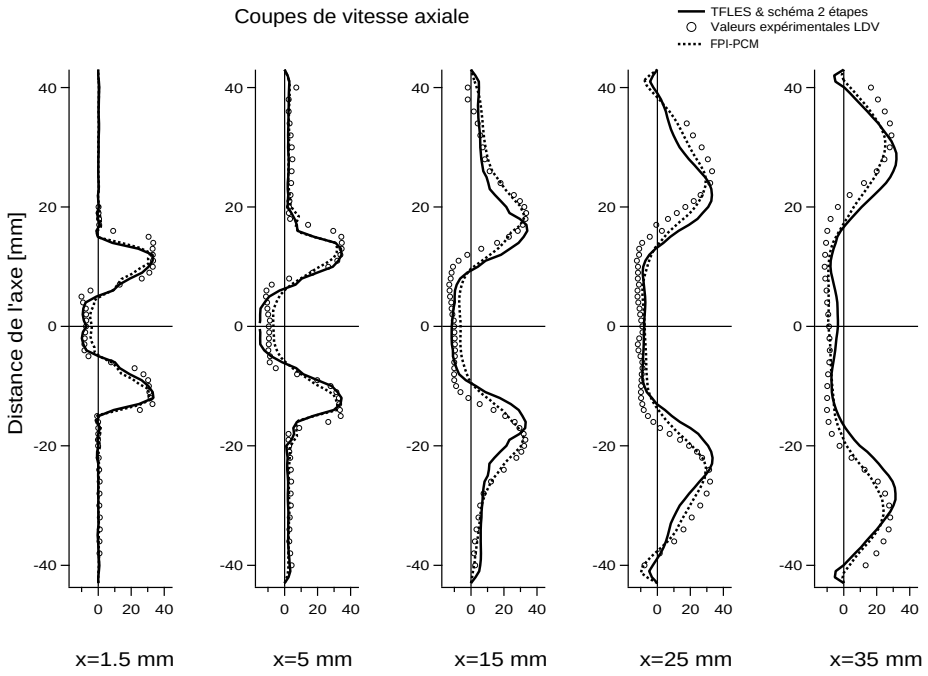


FIG. 7.7 - *Profils de vitesse moyenne axiale pour le cas* $\Phi = 0.75$

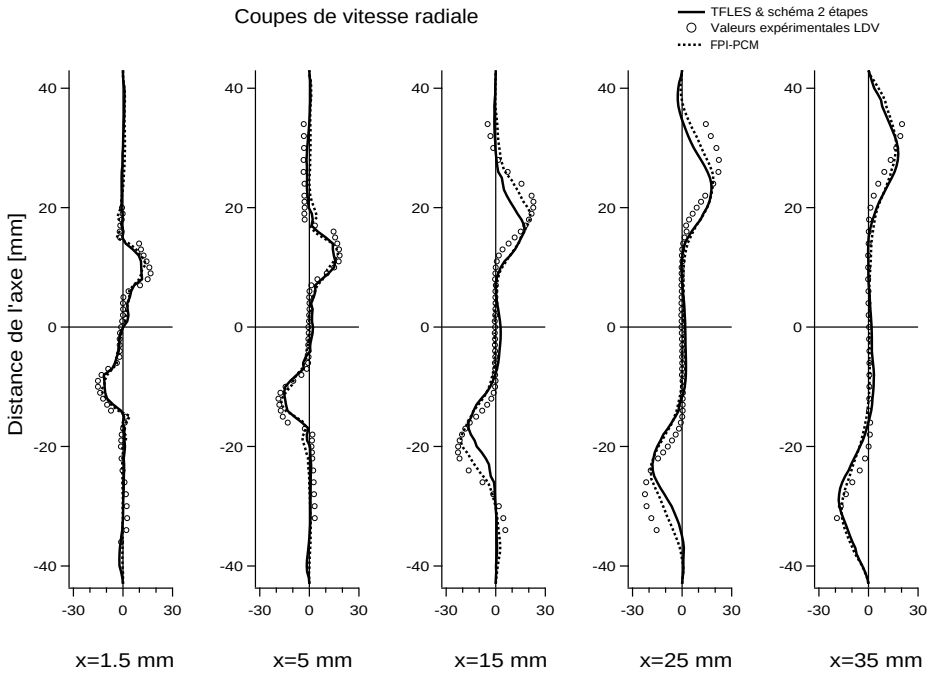


FIG. 7.8 - *Profils de vitesse moyenne radiale pour le cas* $\Phi = 0.75$

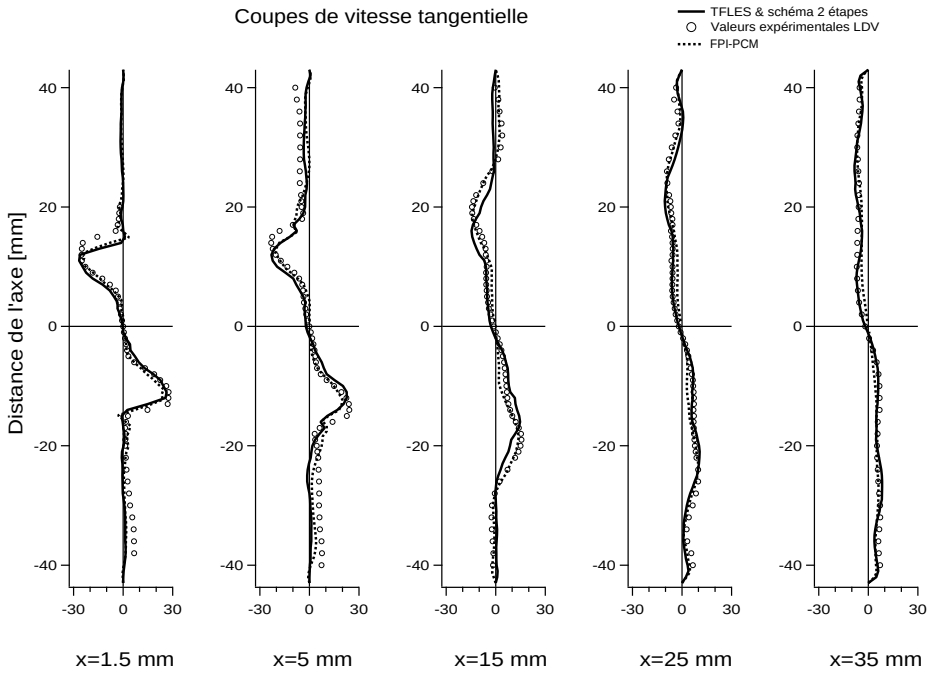


FIG. 7.9 - *Profils de vitesse moyenne azimutale pour le cas* $\Phi = 0.75$

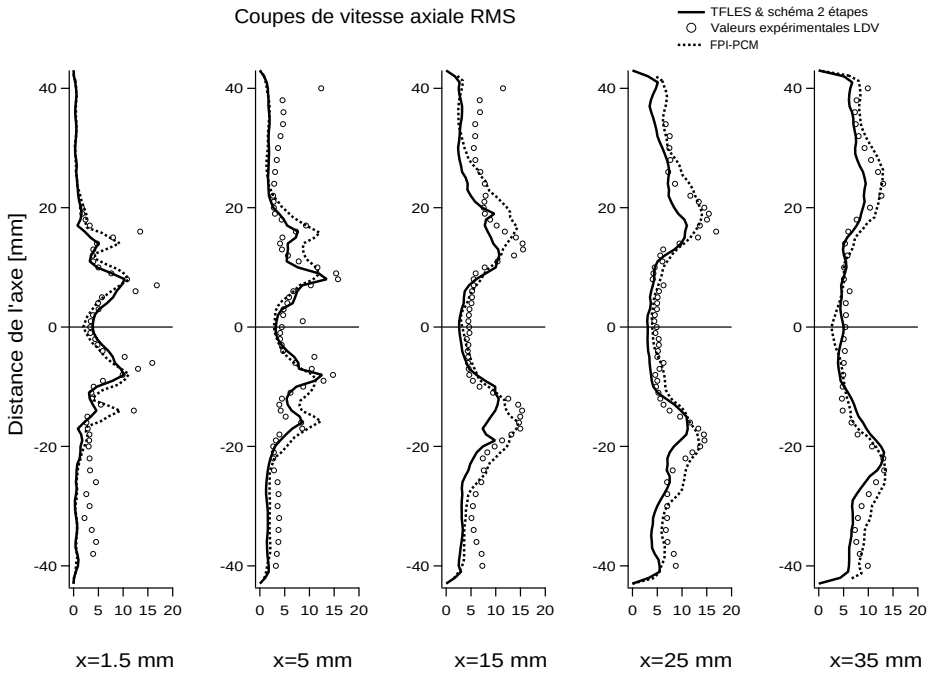


FIG. 7.10 - *Profils de vitesse RMS axiale pour le cas* $\Phi = 0.75$

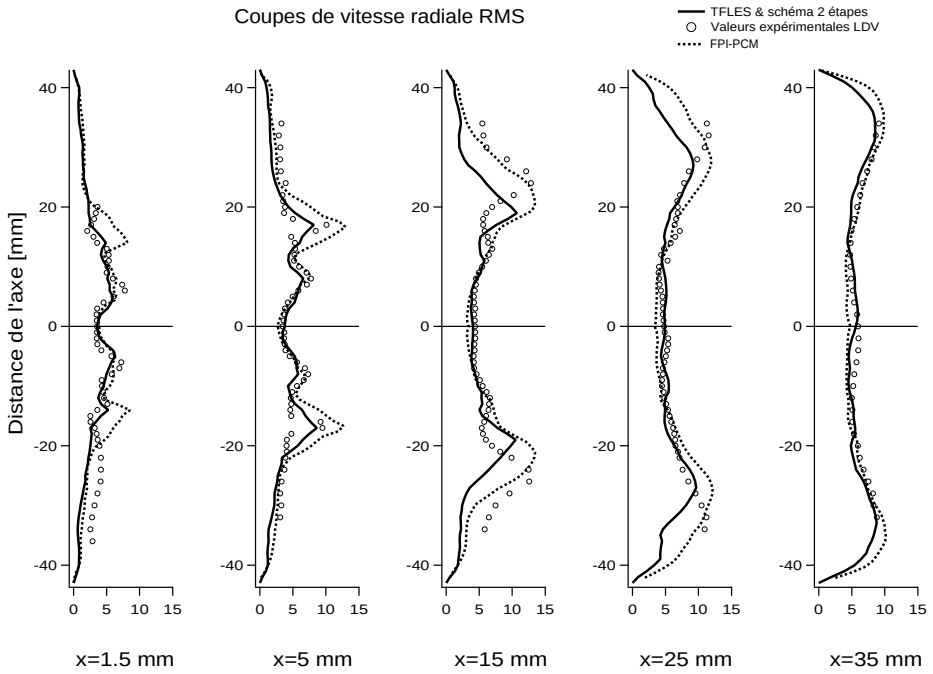


FIG. 7.11 - *Profils de vitesse RMS radiale pour le cas* $\Phi = 0.75$

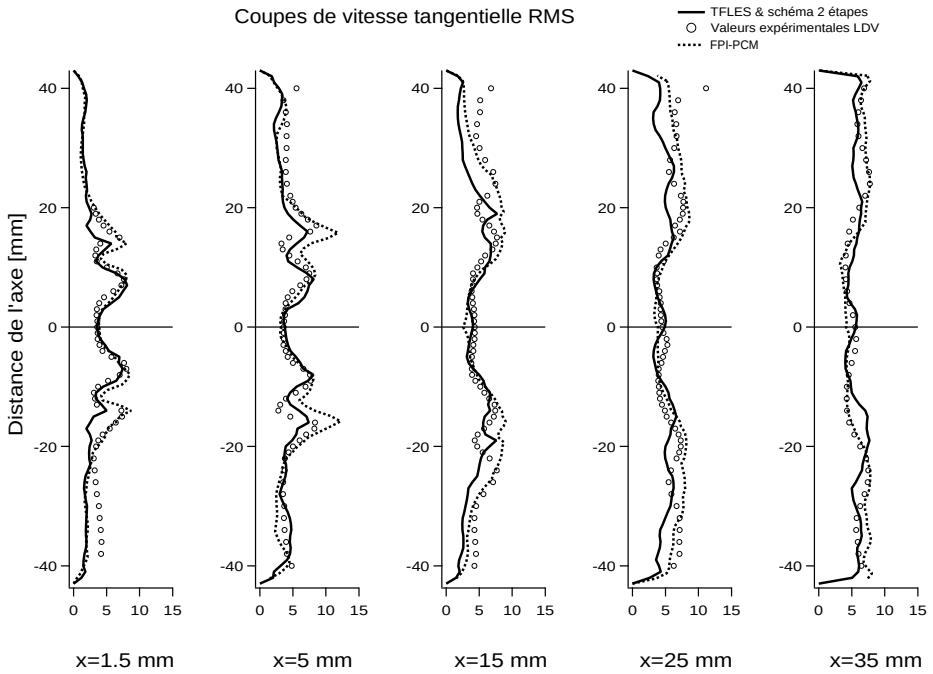


FIG. 7.12 - *Profils de vitesse RMS azimutale pour le cas* $\Phi = 0.75$

7.4 Comparaison TFLES-2 étapes vs PCM-2 étapes vs PCM-FPI sur les champs de température et de fractions massiques

By combining turbulent combustion models and chemistry, 3 different simulations can be performed for the $\Phi = 0.83$ case : PCM-FPI, PCM-reduced kinetic scheme and TFLES-reduced kinetic scheme.

	Complex chemistry	2 steps reduced kinetic scheme (CM2)
TFLES	-	TFLES - CM2
PCM	PCM-FPI	PCM - CM2

TAB. 7.2 - *Overview of computed LES.*

The influence of the turbulent combustion model can be observed by comparing PCM-CM2 and TFLES-CM2 simulations (section 7.4.1), whereas the influence of chemistry modelisation can be observed by comparing PCM-FPI and PCM-CM2 simulations (section 7.4.2). Results are presented in Figs. 7.14 (mean temperature), 7.15 (mean CH_4 mass fraction), 7.16 (mean CO_2 mass fraction), 7.17 (mean CO mass fraction), 7.18 (RMS temperature), 7.19 (RMS CH_4 mass fraction), 7.20 (RMS CO_2 mass fraction), 7.21 (RMS CO mass fraction).

7.4.1 Comparison of LES combustion model

The influence of the turbulent combustion model is observed by comparing PCM-CM2 (dashed curves), and TFLES-CM2 (lines) with experimental data (circles).

For temperature, CH_4 and CO_2 mass fractions profiles (Figs 7.14, 7.15 and 7.16), there is no major difference between PCM and TFLES simulations. This is the same for RMS profiles (Fig. 7.18, 7.19 and 7.20), although TFLES values are always a little bit smaller than PCM ones.

Concerning CO mass fractions profiles (Fig. 7.17 and 7.21), there are some discrepancies between PCM and TFLES simulations. The main difference is that TFLES slightly over-estimates CO mass fractions along the center-line (r=0) of the domain. The overall agreement between TFLES and PCM-FPI remains very good however. The same CO levels at the outlet are predicted (the last measurement x=80 mm of Fig. 7.17 is probably wrong in the experimental data). The CO levels predicted by the two LES are also very comparable to the experiments. A major difference between LES and experimental data is found on CO mass fractions : experimental data have only two minima of CO mass fraction, whereas LES data have four. It seems natural to find 4 minima when displacing radialy in the first measuring planes of the combustion chamber, because four flame fronts are found where CO is produced and almost fully consumed (see Fig. 7.13). The large relative error on CO mass fractions experimental data (between 20 and 50 %, see [88]) has to be kept in mind when comparing with LES.

PCM-CM2 and TFLES-2 steps temperature, heat release and normalized progress variable averaged fields are compared on Figs. 7.22, 7.23 and 7.24. Instantaneous temperature profiles are compared on Fig. 7.25.

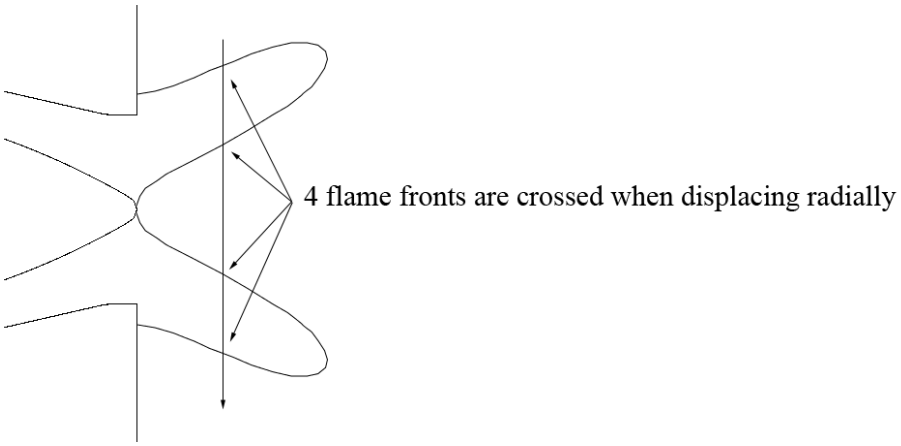


FIG. 7.13 - *Sketch of the flame.*

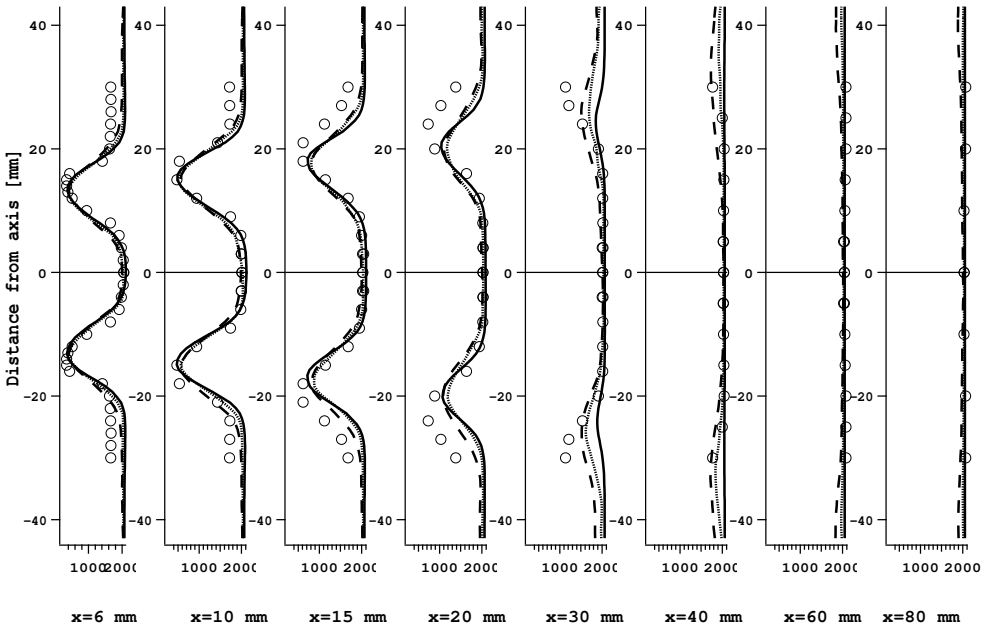


FIG. 7.14 - *Average temperature profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (− − − −) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

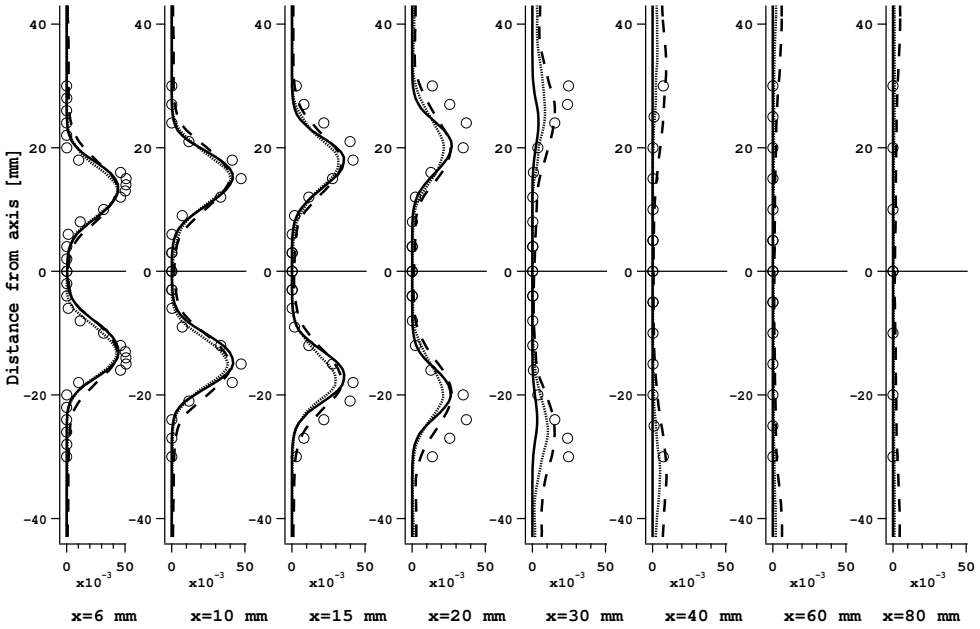


FIG. 7.15 - *Average CH_4 mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (- - - -) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

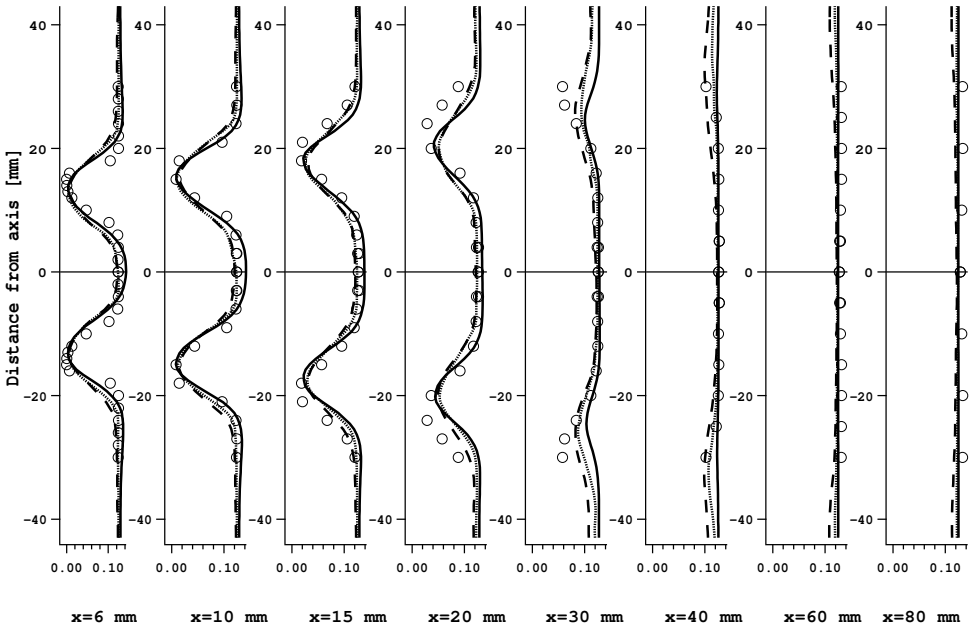


FIG. 7.16 - *Average CO_2 mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (- - - -) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

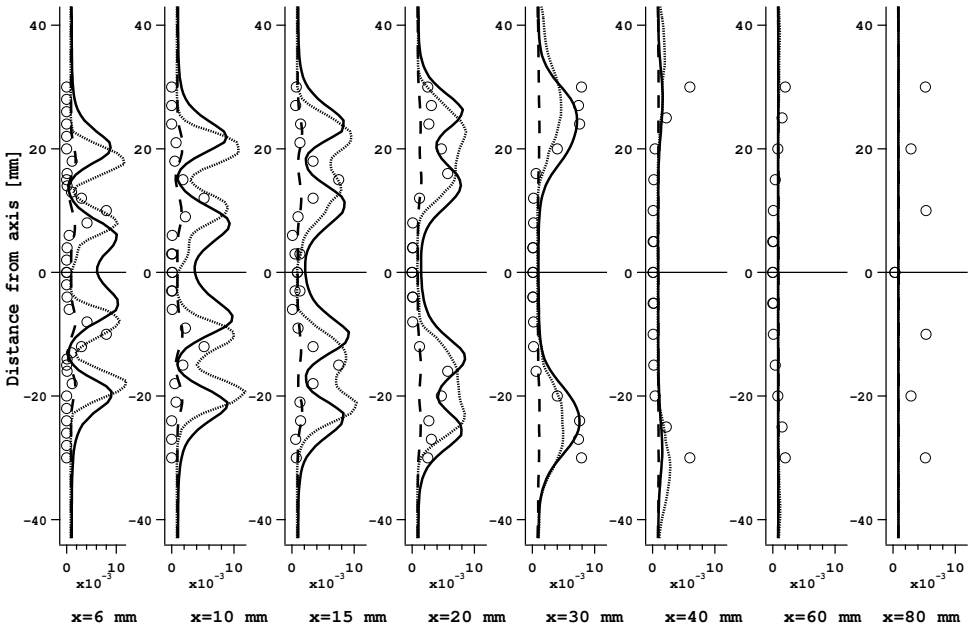


FIG. 7.17 - *Average CO mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (− − − −) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

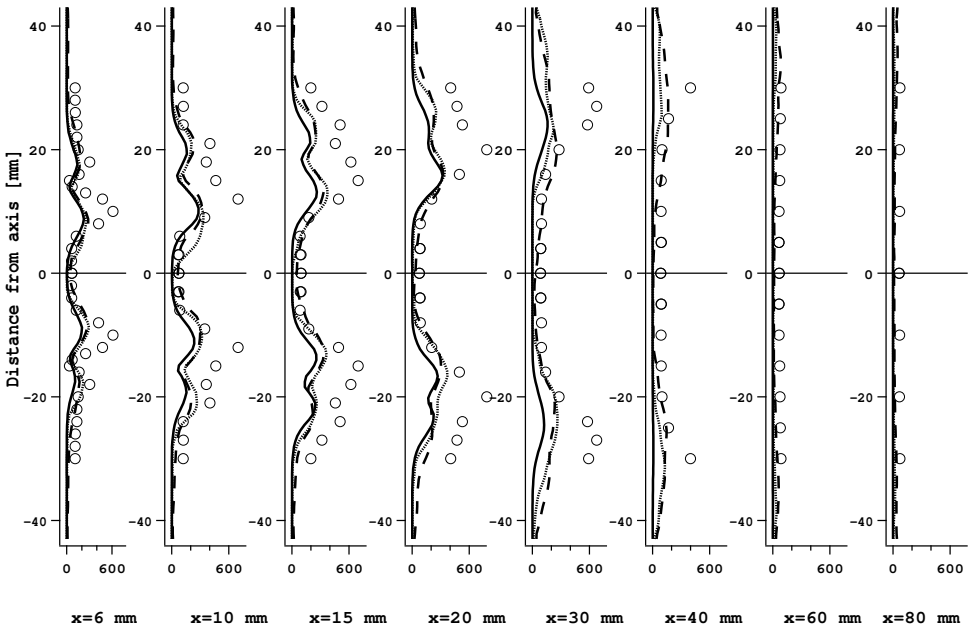


FIG. 7.18 - *RMS temperature profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (− − − −) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

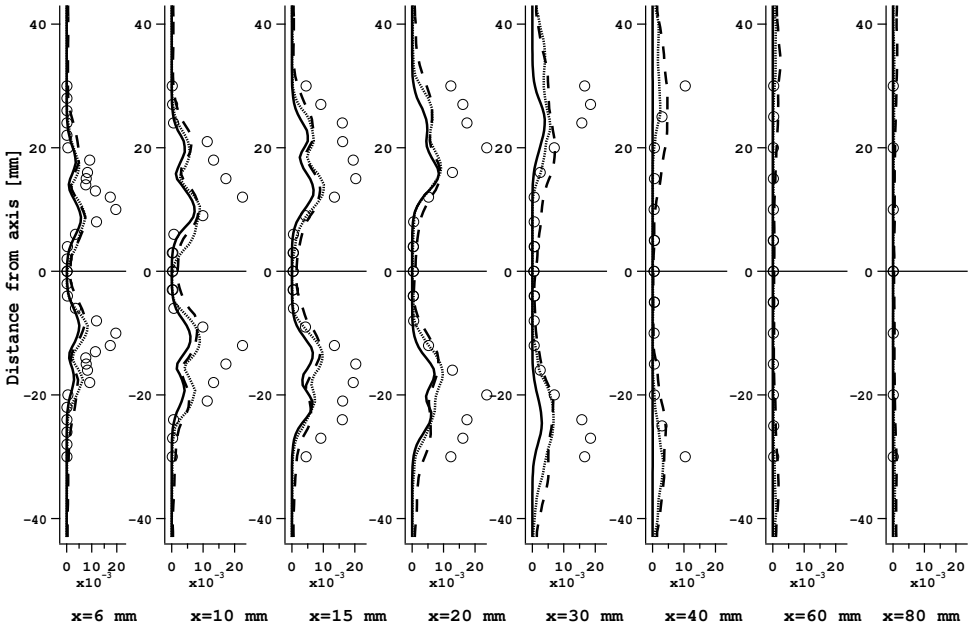


FIG. 7.19 - *RMS CH_4 mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (– – – –) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

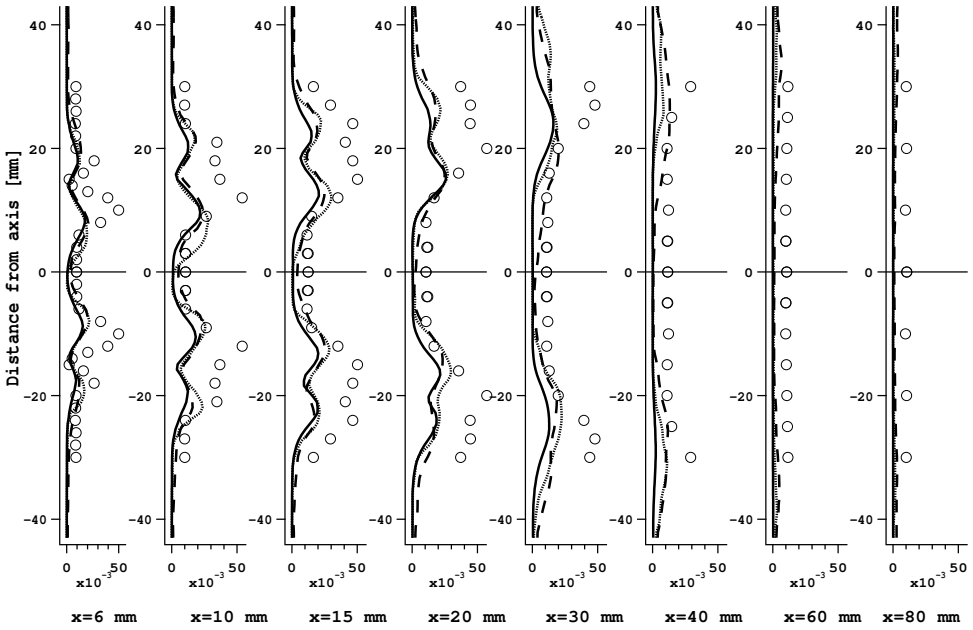


FIG. 7.20 - *RMS CO_2 mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (– – – –) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

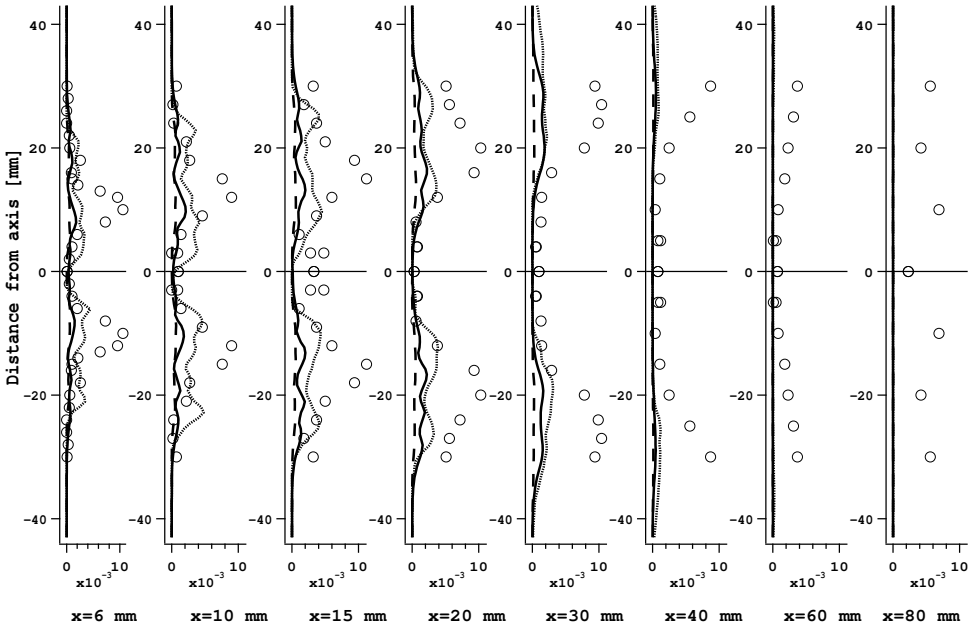


FIG. 7.21 - *RMS CO mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES-2 steps; (− − − −) PCM-2 steps; (·····) PCM-FPI.*

Heat release is compared based on an average field in Figs. 7.23. The TFLES flame seems to be anchored to the burner extremity while the PCM flame seems to be located inside the injector. The PCM flame seems to be larger and more diffuse than the TFLES one. Two reasons could lead to this observation : either the flame is really larger (*i.e.* thickened), either it is less stable and moves more around its mean position.This second possibility seems to be confirmed by RMS values (see Figs. 7.18, 7.19 and 7.20), which are smaller for TFLES than for PCM. Turbulent structures differences are clearly visible between PCM and TFLES on instantaneous cuts of temperature (see Fig. 7.25). The thickening factor of the flame for the TFLES is 17.

Concerning the averaged normalized progress variable, the main difference between both cases is that the PCM flame seems to burn until it touches walls, contrary to the TFLES case that seems to respect a conical shape, classical of swirled flames [54]. This is also visible on mean and instantaneous temperature fields (Fig. 7.22 and 7.25). In the PCM case, "fresh" gases remain near combustion chamber walls, contrary to the TFLES case where everything is burnt at the same location.

7.4.2 Comparison of chemical kinetics modelisation

The influence of the chemical kinetics modelisation is observed by comparing PCM-CM2 (dashed curves), and PCM-FPI (dotted curves) over experimental data (circles). Temperature profiles (Fig. 7.14) are in good agrement, although all simulations show some difficulties to match temperature outside of

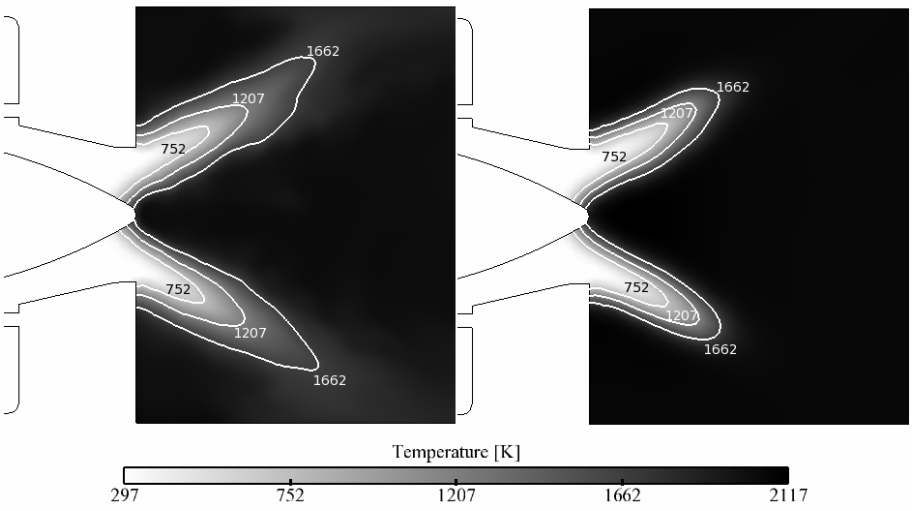


FIG. 7.22 - *Cut of mean temperature* $[K]$ *and iso-contours of temperature (752 K, 1207 K, 1662 K). Left : PCM-CM2 ; Right : TFLES-CM2.*

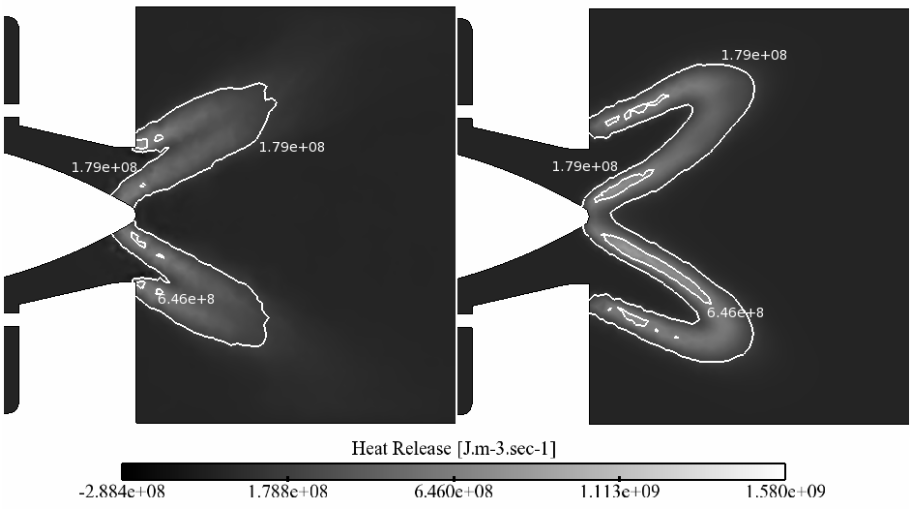


FIG. 7.23 - *Cut of mean heat release* $\left[J.m^{-3}.s^{-1}\right]$ *and iso-contours of heat release (*$1.79.10^8$ *J.m*$^{-3}$*.s*$^{-1}$, $6.46.10^8$ *J.m*$^{-3}$*.s*$^{-1}$*). Left : PCM-CM2 ; Right : TFLES-CM2.*

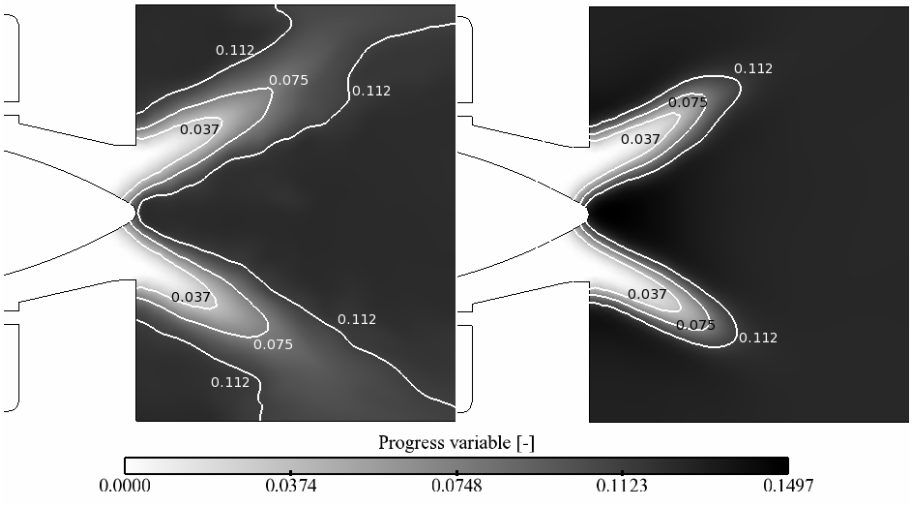


FIG. 7.24 - *Cut of mean normalized progress variable $[-]$ and iso-contours of normalized progress variable (0.037, 0.075 and 0.112). Left : PCM-CM2 ; Right : TFLES-CM2.*

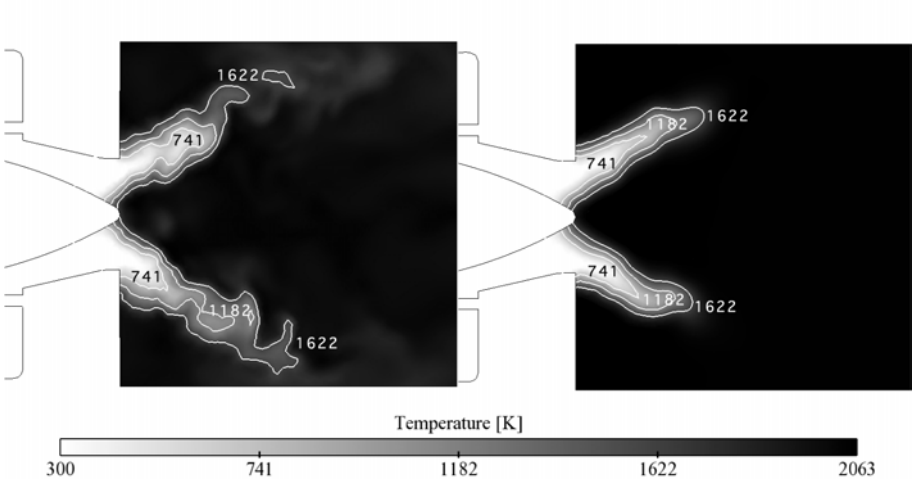


FIG. 7.25 - *Cut of instantaneous temperature $[K]$ and iso-lines of temperature (741 K, 1182 K, 1622 K) . Left : PCM-CM2 ; Right : TFLES-CM2.*

the jet, near the walls. LES always over-estimates temperature of the outer recirculation zone in the first 40 mm. It is probably due to the fact that heat losses to the combustion chamber walls are not taken into account. In the simulations walls are considered adiabatic.

Complex chemistry reactions rates are greater than reduced kinetic schemes, since complex chemistry CH_4 mass fractions are always smaller than those of reduced chemistry (Fig. 7.15). Both simulations seem to over-estimate reaction rates since experimental CH_4 mass fractions are always under-estimated. This can also be seen on CO_2 profiles (Fig. 7.16), which is always created sooner in the case of complex chemistry than in the case of reduced chemistry. However, both simulations show a good agreement with experimental data.

CO mass fraction profiles display more differences between complex and reduced chemistry (Fig. 7.17 and 7.21). Reduced chemistry always under-estimates locally CO mass fractions, despite the fact that final mass fractions are almost the same for every simulations.

Temperature, CH_4 and CO_2 RMS profiles (Fig.7.18, 7.19, 7.20) are very close between PCM-CM2 and PCM-FPI simulations. As expected, it is not the case for CO, since averaged CO mass fractions are under-estimated in the case of the reduced kinetic schemes simulation, as show by the laminar flame computation (see Section 4.5).

7.4.3 Conclusions

This study has been motivated by the need to understand turbulent combustion models and chemical kinetics modelisation effects on temperature and species mass fractions. Thus, LES has been used on the PRECCINSTA configuration to study averaged and RMS profiles of temperature and species mass fractions. A pdf approach turbulent model (PCM-FPI) has been compared to the thickened flame model (TFLES). In a second step, kinetic schemes reduction effects have been studied.

In the case of this swirled combustor and under the perfectly premixed assumption, conclusions are the following :

- conclusion on chemical kinetics modelisation :
  - both FPI and CM2 seems to over-estimate a few reaction rates, this point being more important for FPI than for CM2.
  - FPI provides better results than CM2 for CO mass fractions. However, CM2 is still able to predict final values of CO
- conclusion on turbulent combustion modelisation :
  - PCM and TFLES yield very close results, unless for CO that is over-estimated by the TFLES approach, especially along the center line of the combustion chamber.
  - The mean PCM flame is larger and more diffused than TFLES one.
  - Turbulent structures are more visible on PCM flame than on TFLES one.

This study has shown that reactive LES had good capabilities on complex combustors and that experimental profiles were well matched. It has also proved that some ameliorations could still be done. Among them, the perfectly premixed hypothesis has to be removed and heat losses at wall has to be taken

into account. This is the object of future publications.

7.5 Influence des paramètres de la méthode PCM-FPI

7.5.1 Effet du type de tabulation : taux de réactions vs fractions massiques

Cette section analyse les différences observées quand FPI est utilisé en tabulant les taux de réaction ou les fractions massiques des espèces. Un premier calcul a été réalisé sur la configuration Preccinsta avec une tabulation des taux de réaction (détaillé dans la section 4.4.1). Un second calcul a ensuite été fait en tabulant les fractions massiques (détaillé dans la section 4.4.2) et reconstruisant des taux de réaction via un temps caractéristique (détaillé dans la section 4.4.2).

Les paramètres des modélisations FPI-PCM en termes sources et en fractions massiques sont détaillés dans la table 7.3. Deux tables distinctes, de mêmes dimensions, sont utilisées.

TAB. 7.3 - *Paramètres de la modélisation FPI-PCM en termes sources*

Nombre d'éspèces	10
Nombre de points de maillage en c	145
Nombre de points de maillage en z	1 (Prémélange parfait)
Nombre de points de maillage en $S(Y_c)$	20
Nombre de points de maillage en $S(z)$	1

- Profils de température (7.26) : Les profils LES sont très proches, quelle que soit le type de tabulation. Sur les coupes comprises entre 15 et 30 mm, la température est sur-estimée dans les gaz frais, montrant que la flamme est un peu trop courte. Ceci est très probablement un effet du traitement adiabatique des parois de la chambre de combustion.
- Profils de fraction massique de méthane (7.27) : la constatation précédente se vérifie sur cette figure. Le méthane est consommé trop rapidement, plus encore pour la tabulation des termes sources que pour la tabulation des fractions massiques. On remarque aussi sur cette figure qu'il est possible que la fraction massique de méthane devienne négative dans le cas de la tabulation des termes sources lorsque ceux-ci ont été surévalués.
- Profils de fraction massique de dioxyde de carbone (7.28) : de manière identique au méthane, le dioxyde de carbone est produit trop rapidement. Les profils de fraction massique de CO_2 sont difficilement représentés par la tabulation des termes sources.
- Fraction massique de monoxyde de carbone (7.29) : Dans le cas de la tabulation des fractions massiques, les profils de CO sont assez fidèles aux niveaux mesurés expérimentalement. Dans le cas de la tabulation des termes sources, les fractions massiques de monoxyde de carbone sont largement surévaluées, que ce soit dans la flamme ou sur le bilan global de monoxyde de carbone formé (visible en champ lointain). Une explication est donnée dans [46]. La composition des gaz brûlés est le résultat de l'intégration des taux de réaction à travers la flamme. Or, cette intégration peut être affectée par de nombreuses erreurs liées au numérique, à l'interpolation, aux différences de trans-

port moléculaire entre la chimie détaillée et AVBP, ... Des travaux sont en cours actuellement, au CERFACS et au laboratoire EM2C par exemple, pour préciser les sources d'erreur et proposer des corrections à la méthode utilisée.

En conclusion, la tabulation des fractions massiques des espèces donne globalement de meilleurs résultats que la tabulation des termes sources, et est donc à privilégier.

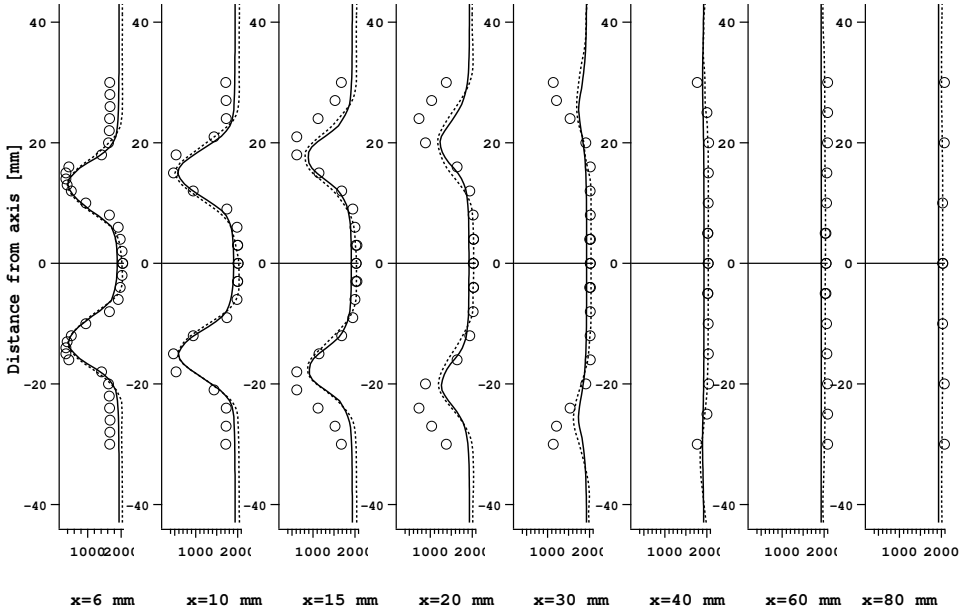


FIG. 7.26 - *Profils de température pour le cas* $\Phi = 0.83$. *(∘) Raman; (———) Tabulation des termes sources; (·····) Tabulation des fractions massiques.*

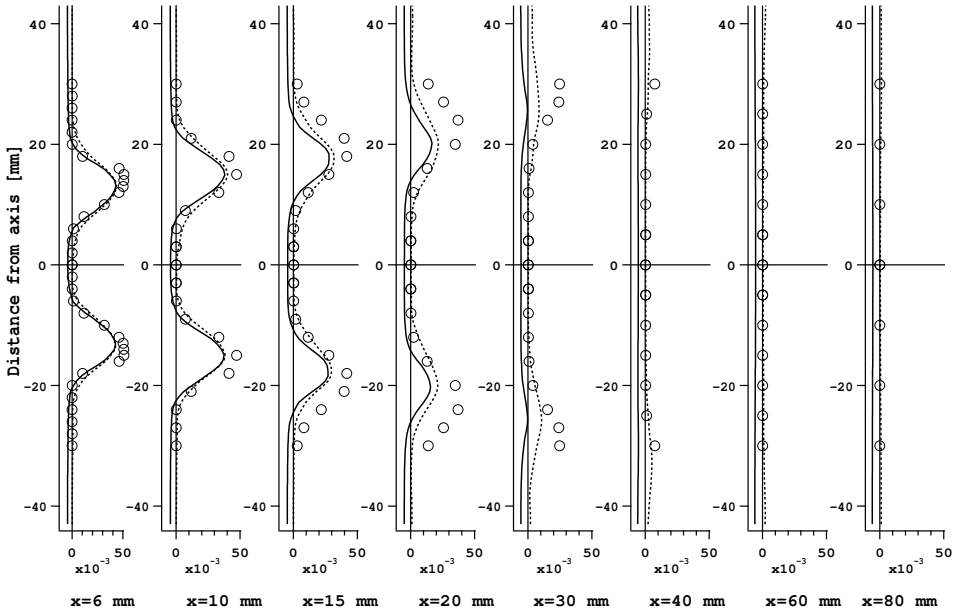


FIG. 7.27 - *Profils de fraction massique de CH_4 pour le cas $\Phi = 0.83$. (∘) Raman; (———) Tabulation des termes sources; (·····) Tabulation des fractions massiques.*

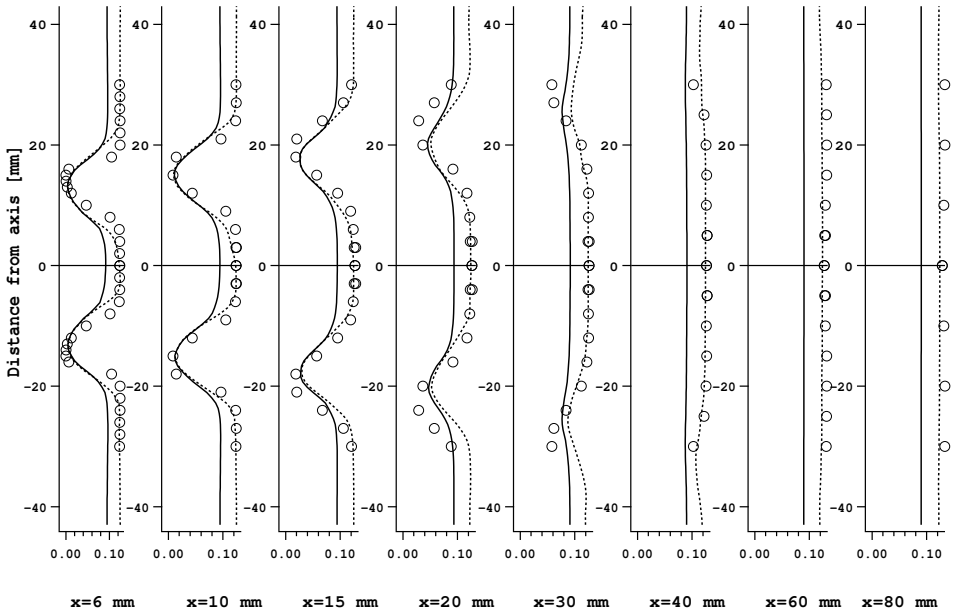


FIG. 7.28 - *Profils de fraction massique de CO_2 pour le cas $\Phi = 0.83$. (∘) Raman; (———) Tabulation des termes sources; (·····) Tabulation des fractions massiques.*

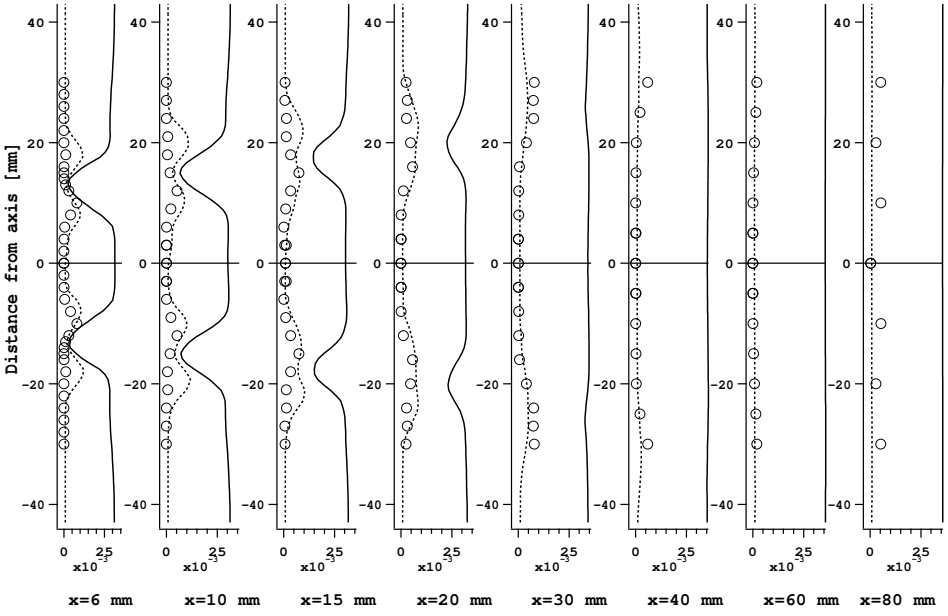


FIG. 7.29 - *Profils de fraction massique de CO pour le cas* $\Phi = 0.83$. *(∘) Raman; (——) Tabulation des termes sources; (·····) Tabulation des fractions massiques.*

7.5.2 Effet du raffinement de la table

L'étude présentée en section 7.5.1 a permis de mettre en évidence la mauvaise prédiction des fractions massiques de CO dans le cas PCM-FPI avec tabulation des termes sources. Une raison possible est la méthode de discrétisation du taux de réaction du CO en fonction de c. En effet, lorsque l'on se déplace entre $c = 0$ et $c = 1$, le taux de réaction de CO est d'abord positif puis négatif. Dans l'éventualité où la table n'est pas suffisamment raffinée, il serait possible de sous-estimer la partie consommation du CO, celle-ci ayant lieu sur une gamme réduite de Y_c. L'objectif de cette section est d'étudier cette éventualité.

L'effet du raffinement de la table PCM-FPI sur les profils LES est étudié en comparant les résultats obtenus précédemment (section 7.5.1) à des résultats obtenus avec une table raffinée, détaillée dans le tableau 7.4. Les figures 7.30 à 7.33 sont des représentations graphiques des deux tables utilisées.

TAB. 7.4 - *Paramètres de la modélisation FPI-PCM en termes sources de la table raffinée*

Nombre d'éspèces	10
Nombre de points de maillage en c	218
Nombre de points de maillage en z	1 (Prémélange parfait)
Nombre de points de maillage en $S(Y_c)$	40
Nombre de points de maillage en $S(z)$	1

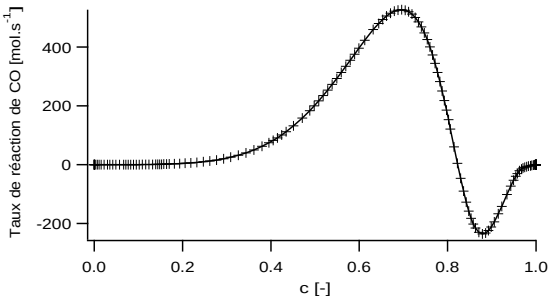


FIG. 7.30 - *Taux de réaction de CO en fonction de la variable d'avancement c pour la flamme monodimensionnelle laminaire à $\Phi = 0.83$ (145 points de maillage en c)*

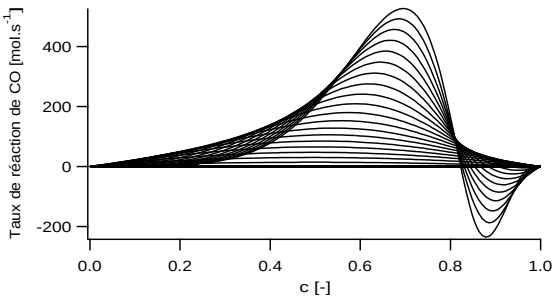


FIG. 7.31 - *Taux de réaction de CO en fonction de la variable d'avancement c et de la ségrégation de c pour $\Phi = 0.83$ pour la table non raffinée (145 points de maillage en c et 20 en $S(Y_c)$)*

Aucune différence n'est visible sur les champs obtenus entre la simulation avec la table FPI-PCM initiale et la simulation avec la table FPI-PCM raffinée (Fig. 7.34 à 7.37). Ceci nous permet de conclure que la table utilisée initialement était suffisamment raffinée et qu'aucune amélioration ne peut être attendue par un raffinement de la table.

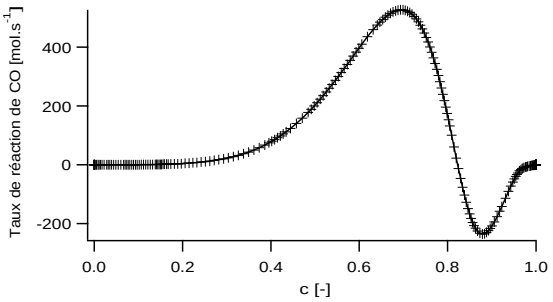


FIG. 7.32 - *Taux de réaction de CO en fonction de la variable d'avancement c pour la flamme monodimensionnelle laminaire à $\Phi = 0.83$ (218 points de maillage en c)*

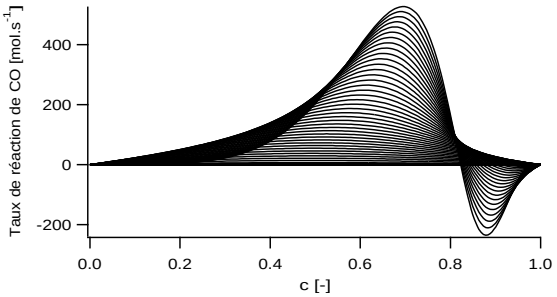


FIG. 7.33 - *Taux de réaction de CO en fonction de la variable d'avancement c et de la ségrégation de c pour $\Phi = 0.83$ pour la table raffinée (218 points de maillage en c et 40 en $S(Y_c)$)*

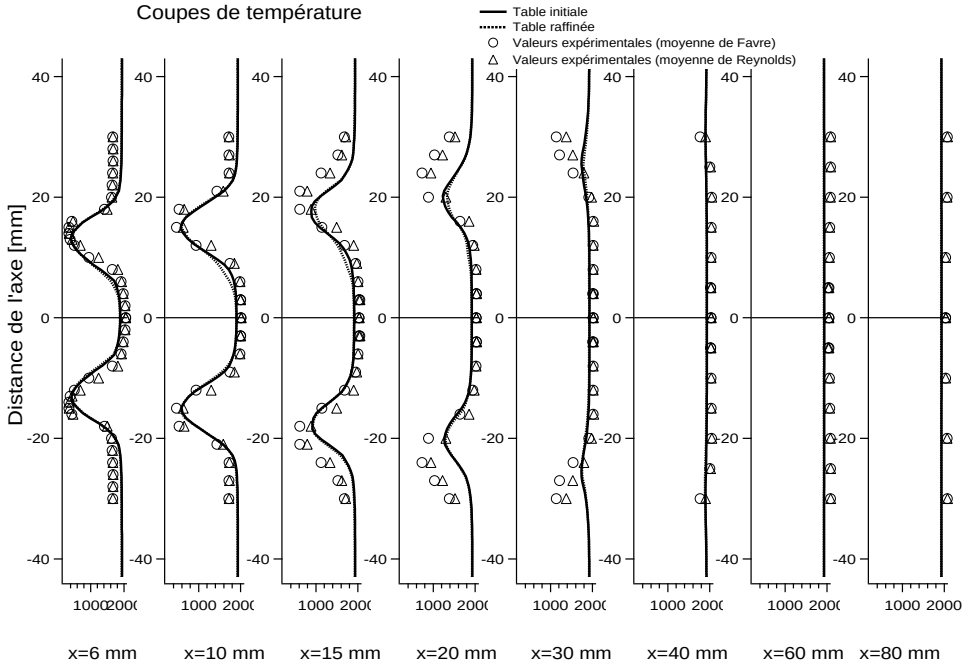


FIG. 7.34 - *Profils de température pour le cas $\Phi = 0.83$ (tabulation des termes sources)*

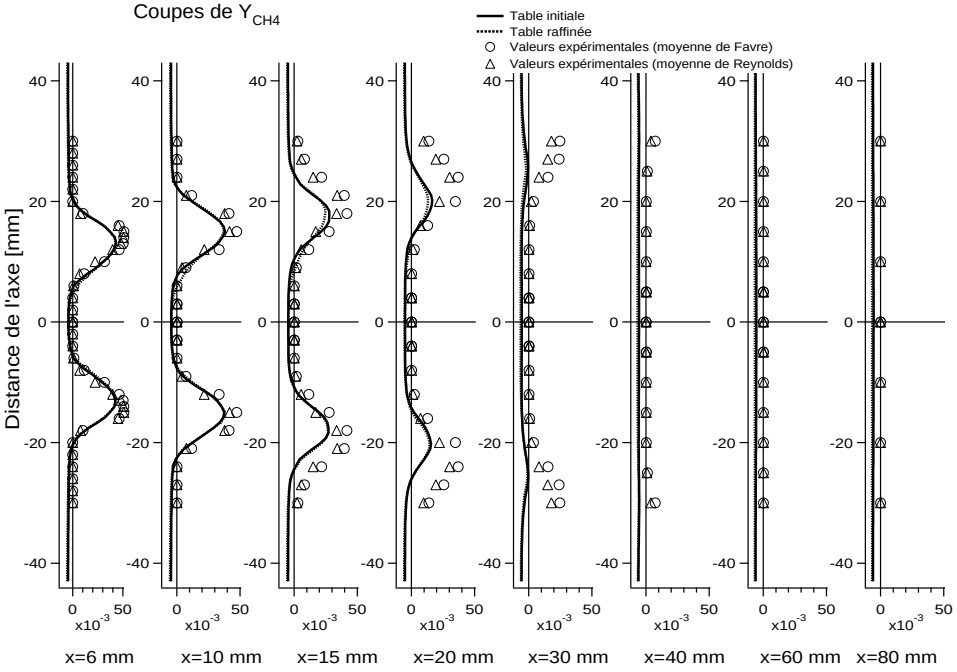


FIG. 7.35 - *Profils de fraction massique de CH_4 pour le cas $\Phi = 0.83$ (tabulation des termes sources)*

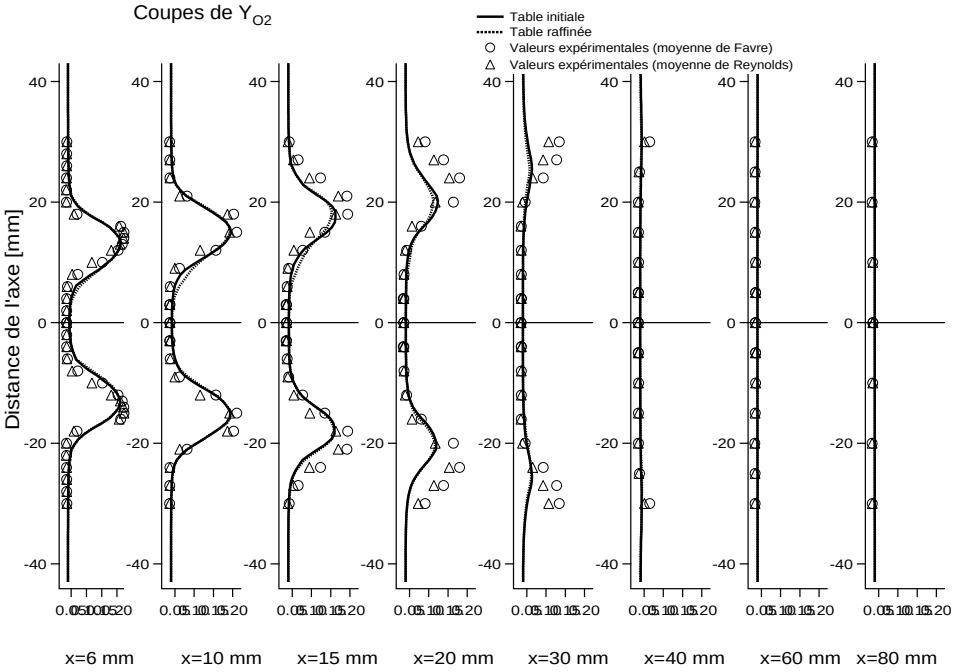


FIG. 7.36 - *Profils de fraction massique de O_2 pour le cas $\Phi = 0.83$ (tabulation des termes sources)*

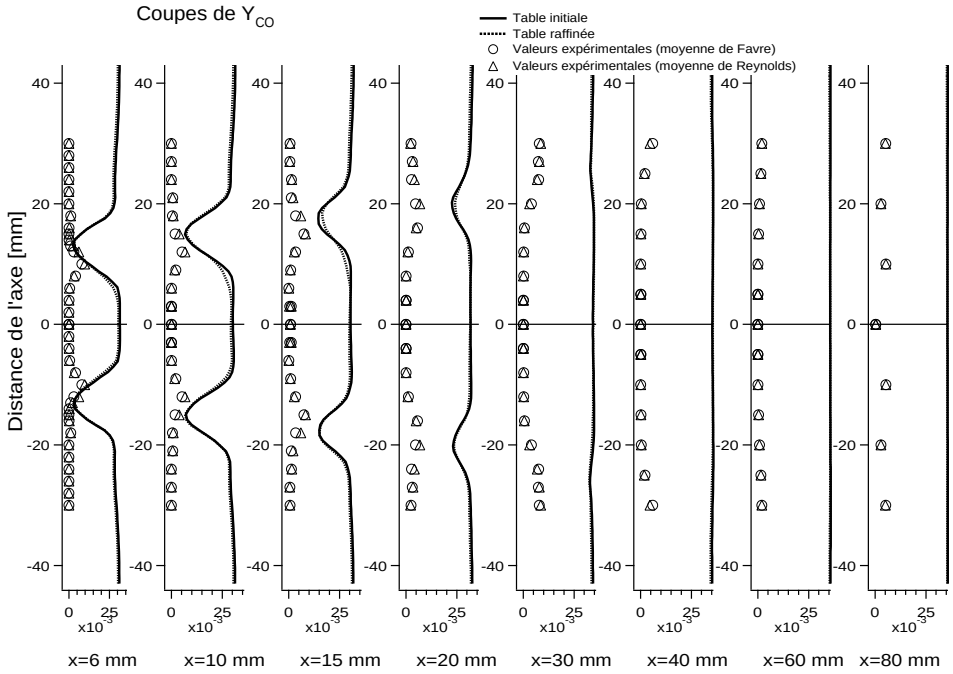


FIG. 7.37 - *Profils de fraction massique de CO pour le cas* $\Phi = 0.83$ *(tabulation des termes sources)*

7.5.3 Effet de la constante de dissipation scalaire

L'influence de la constante de dissipation scalaire du modèle PCM (section 4.2) a été étudiée en lui donnant successivement 3 valeurs différentes et en comparant les profils moyens. Les valeurs de $C_d^{Y_{cv}}$ sont 0.25, 0.50 et 0.75. Les résultats sont visibles sur les figures 7.38, 7.39, 7.40 et 7.41.

Les résultats obtenus montrent que le coefficient $C_d^{Y_{cv}}$ n'a pas d'influence majeure sur la température et les fractions massiques moyennes. Tous les profils obtenus suivent la même tendance et sont très proches les uns des autres, quelle que soit la valeur de $C_d^{Y_{cv}}$.

De même que pour les LES précédentes (section 7.4 et 7.5.2), il reste une surestimation de la température à proximité des murs, du fait du traitement adiabatique de ceux-ci et une surestimation des taux de réaction, le méthane étant toujours brûlé légèrement trop rapidement.

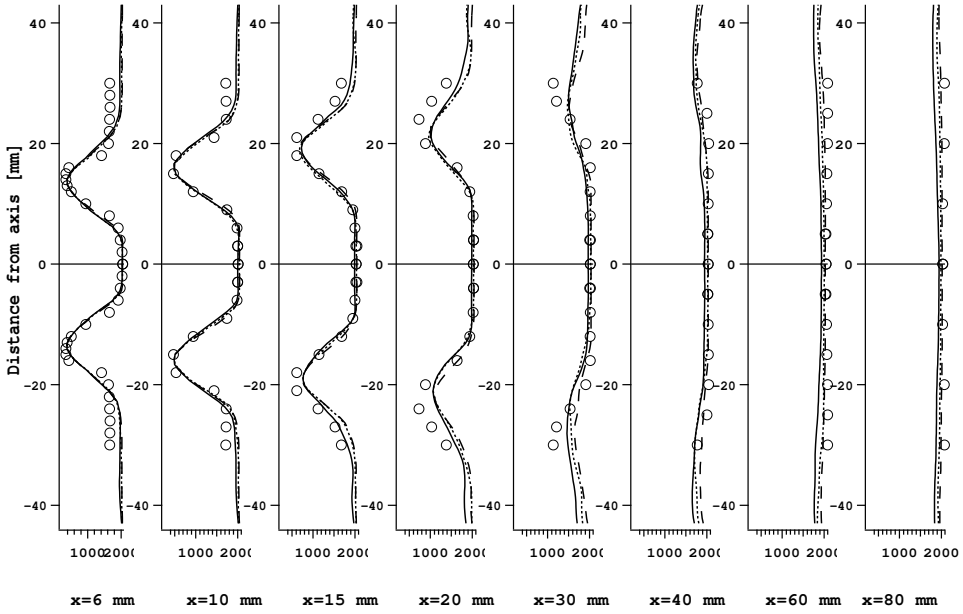


FIG. 7.38 - *Profils de température pour le cas* $\Phi = 0.83$. *(∘) Raman; (* ——— *)* $C_d^{Y_{cv}} = 0.25$*; (* ····· *)* $C_d^{Y_{cv}} = 0.50$*; (* - - - - *)* $C_d^{Y_{cv}} = 0.75$.

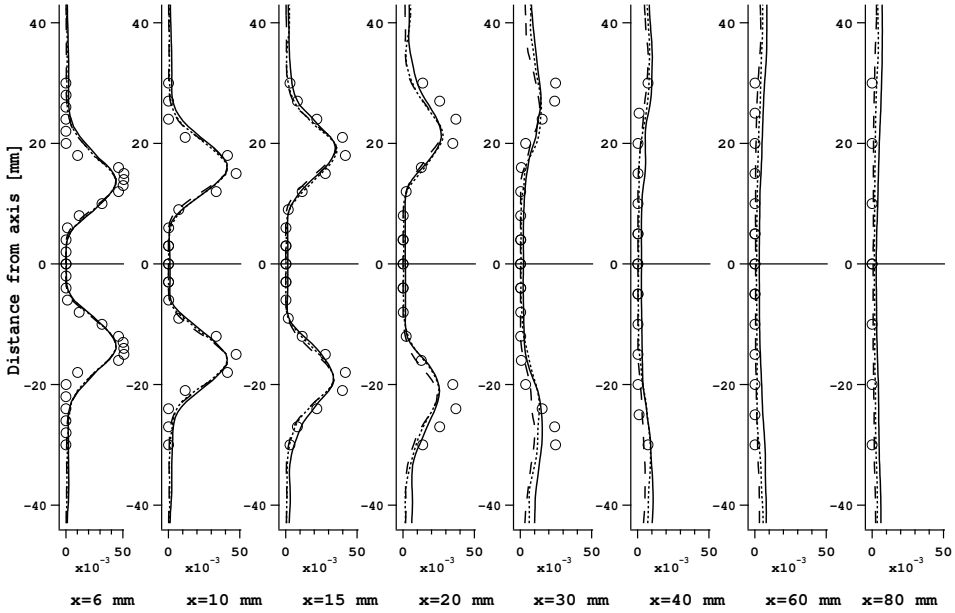


FIG. 7.39 - *Profils de fraction massique de CH_4 pour le cas $\Phi = 0.83$. (∘) Raman; (———) $C_d^{Y_{cv}} = 0.25$; (·····) $C_d^{Y_{cv}} = 0.50$; (- - - -) $C_d^{Y_{cv}} = 0.75$.*

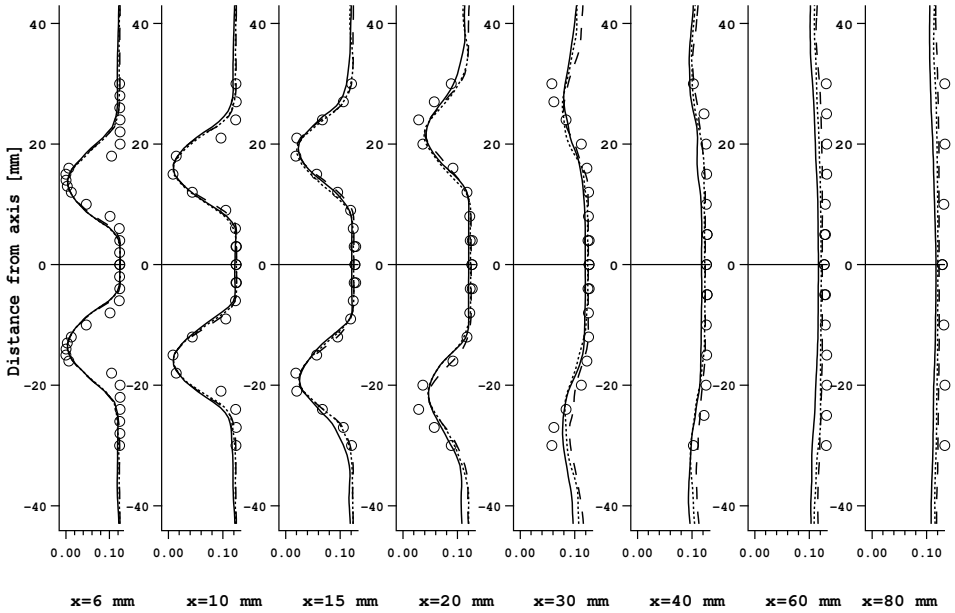


FIG. 7.40 - *Profils de fraction massique de CO_2 pour le cas $\Phi = 0.83$. (∘) Raman; (———) $C_d^{Y_{cv}} = 0.25$; (·····) $C_d^{Y_{cv}} = 0.50$; (- - - -) $C_d^{Y_{cv}} = 0.75$.*

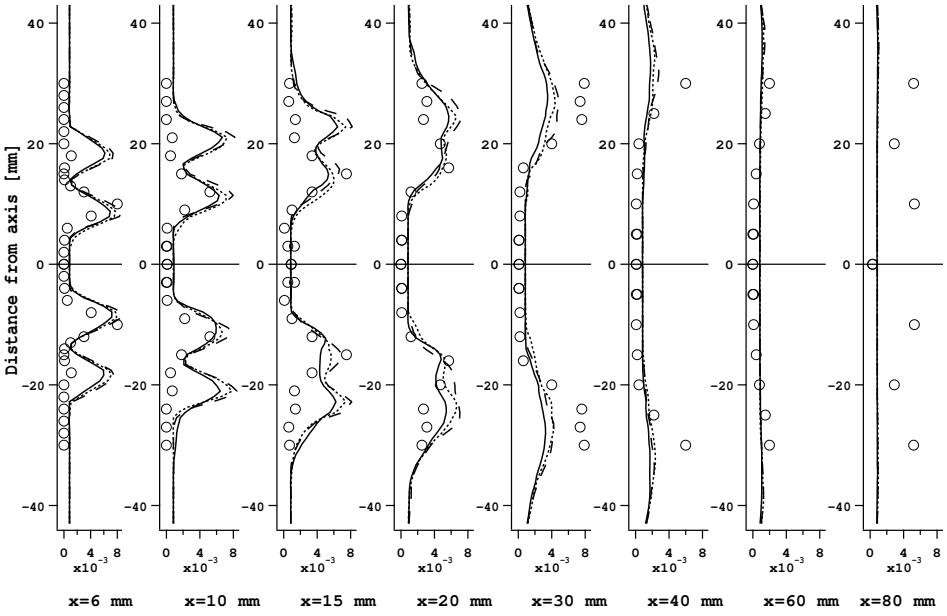


FIG. 7.41 - *Profils de fraction massique de CO pour le cas* $\Phi = 0.83$. *(∘) Raman; (* —— *)* $C_d^{Y_{cv}} = 0.25$*;* *(* ····· *)* $C_d^{Y_{cv}} = 0.50$*; (* - - - *)* $C_d^{Y_{cv}} = 0.75$.

7.6 Influence des paramètres du modèle de combustion turbulente TFLES

7.6.1 Les fonctions d'efficacité

3 fonctions d'efficacité sont disponibles dans AVBP :

- La fonction d'efficacité de Colin *et al.* [27], que l'on nommera par la suite fonction *Colin*, et présentée brièvement en section 4.1.2.1.
- La fonction d'efficacité dynamique de Colin *et al.* [29], que l'on nommera par la suite fonction *Colin dynamique*.
- La fonction d'efficacité de Charlette *et al.* [23], que l'on nommera par la suite fonction *Charlette*.

Pour les 3 fonctions d'efficacité, les lignes fortran sont extraites du code AVBP puis copiées dans IGOR[1] afin de les comparer en dehors de AVBP . On montrera ensuite l'effet du choix de la fonction d'efficacité dans un calcul AVBP complet.

7.6.2 Données d'entrée

Quelques valeurs doivent être données au programme IGOR. Elles sont regroupées dans la table 7.5. Les valeurs internes au fonctions, non modifiables par l'utilisateur, ne sont pas répertoriées.

Pour chaque fonction, il est nécessaire de donner au moins la taille de maille Δ. On se place donc sur le point visible sur la figure 7.42. Il est suffisament éloigné des murs pour que la "damping function" ne s'applique pas sur u'_Δ dans le cas *Colin dynamique*.

La valeur de l'épaississement est 17. Ainsi, les fonctions d'efficacité *Colin* et *Colin dynamique* présenteront une valeur maximale $E = F^{\frac{2}{3}} = 6.61$ tandis que la fonction d'efficacité *Charlette* présente une valeur maximale $E = (1 + F)^{0.5} = 4.24$.

En fixant ces paramètres, l'efficacité E ne dépend plus que de la valeur de la vitesse de sous-maille u'_Δ et nous tracerons donc $E = f\,(u'_\Delta)$.

7.6.3 Résultats

La manière la plus directe de comparer les fonctions d'efficacité est de tracer les valeurs de la fonction d'efficacité $E = f\left(\frac{u'_\Delta}{s_l^0}\right)$.

[1] IGOR pro carbon est un logiciel pour l'exploitation graphique de données scientifiques, l'analyse des données, le traitement d'image pour les scientifiques et les ingénieurs (http ://www.wavemetrics.com).

[2] Données par l'utilisateur

TAB. 7.5 - *Variables d'entrée des trois fonctions d'efficacité.*

Fonction d'efficacité	Variables communes[2]	Variables propres[2]	Variables internes au code de calcul
Colin	s_{l0} , δ_{l0} , F	$\alpha = \frac{1.65}{Re_t^{0.5}}$	Δ
Colin dynamique		$\beta = 0.3$ $l_t^0 = 0.00348125$	Δ ν $d_{wall} = 1.43.10^{-2}\ m$
Charlette		$\beta = 0.5$	Δ



FIG. 7.42 - *Position du curseur*

7.6.3.1 *Colin* vs *Colin dynamique* vs *Charlette*

Les 3 fonctions d'efficacité sont représentées sur la figure 7.43. Les fonctions *Colin* et *Colin dynamique* présentent des résultats très proches tandis que la fonction *Charlette* atteint sa valeur de saturation très rapidement ($\frac{u'_\Delta}{s_l^0} \approx 5$).

Remarque : Bien que la figure 7.43 semble montrer des valeurs limites différentes pour les fonctions *Colin* et *Colin dynamique*, si l'on prolonge u'_Δ jusqu'à de très grandes valeurs, on retrouve bien :

$$\lim_{u'_\Delta \to \infty} E = F^{\frac{2}{3}}$$

comme indiqué par *Colin et al.* [27].

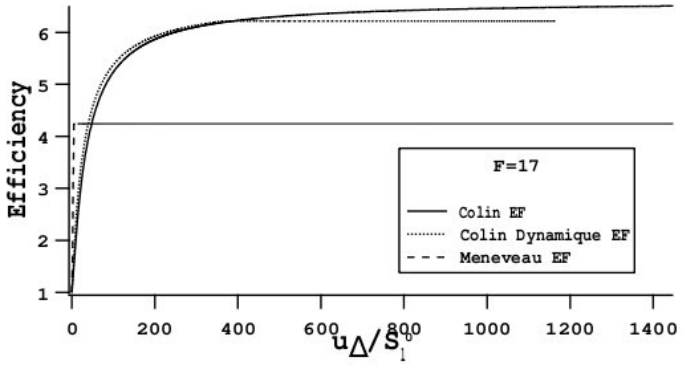


FIG. 7.43 - *Comparaison des trois fonctions d'efficacité telles qu'elles sont codées dans* AVBP

7.6.3.2 Résultats sur le cas turbulent parfaitement prémélangé

7.6.3.2.1 Résultats sur les profils moyens de température et de fractions massiques Les différences notées à la section précédente ne semblent pas avoir d'impact fort sur les valeurs moyennes (Figs. 7.44 à 7.49), les trois fonctions d'efficacité donnant des résultats très proches les uns des autres.

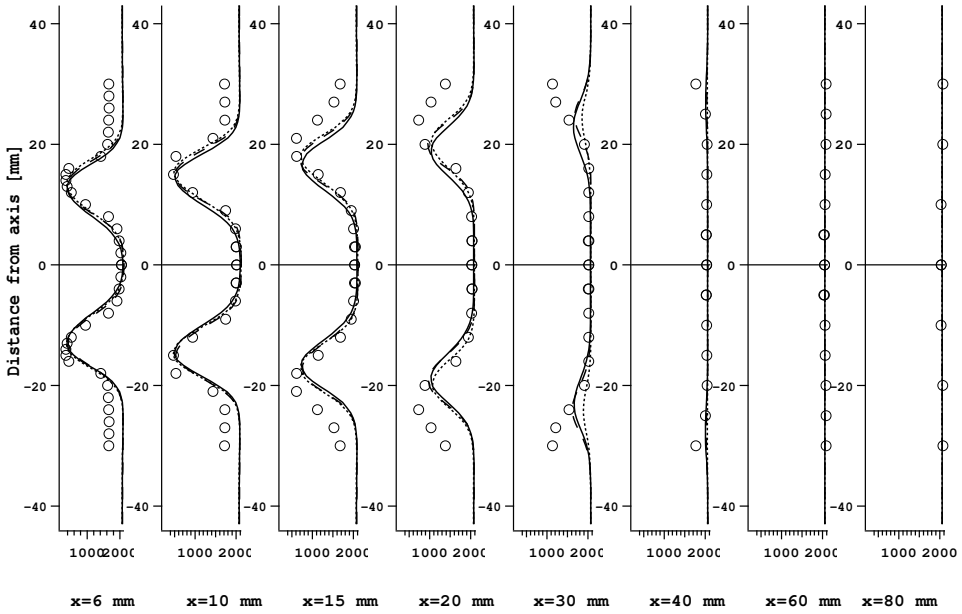


FIG. 7.44 - *Profils de température moyenne. (○) Raman; (———) Fonction Colin; (·····) Fonction Colin dynamique; (– – – –) Fonction Meneveau.*

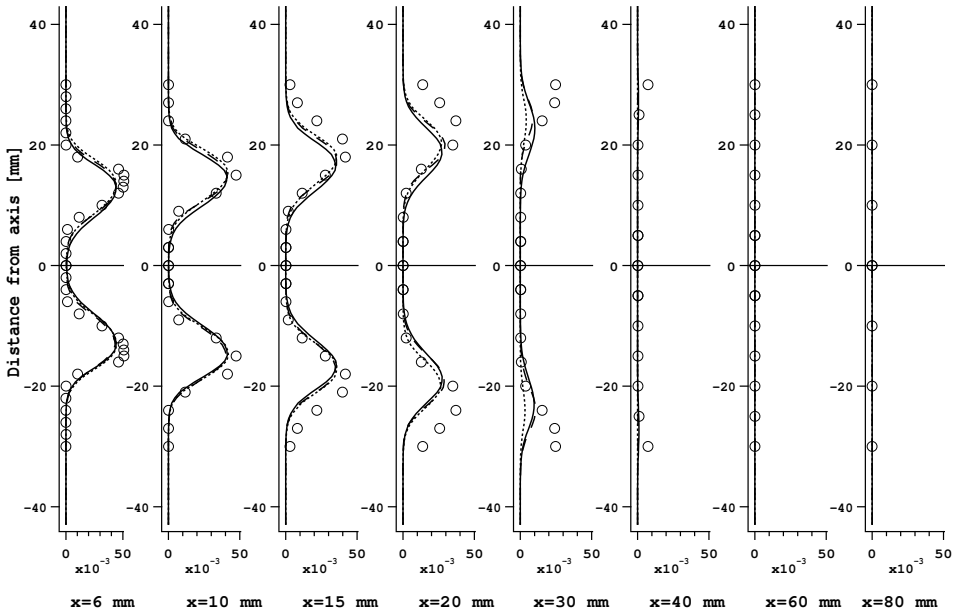


FIG. 7.45 - *Profils de fraction massique moyenne de CH_4. (○) Raman; (———) Fonction Colin; (·····) Fonction Colin dynamique; (– – – –) Fonction Meneveau.*

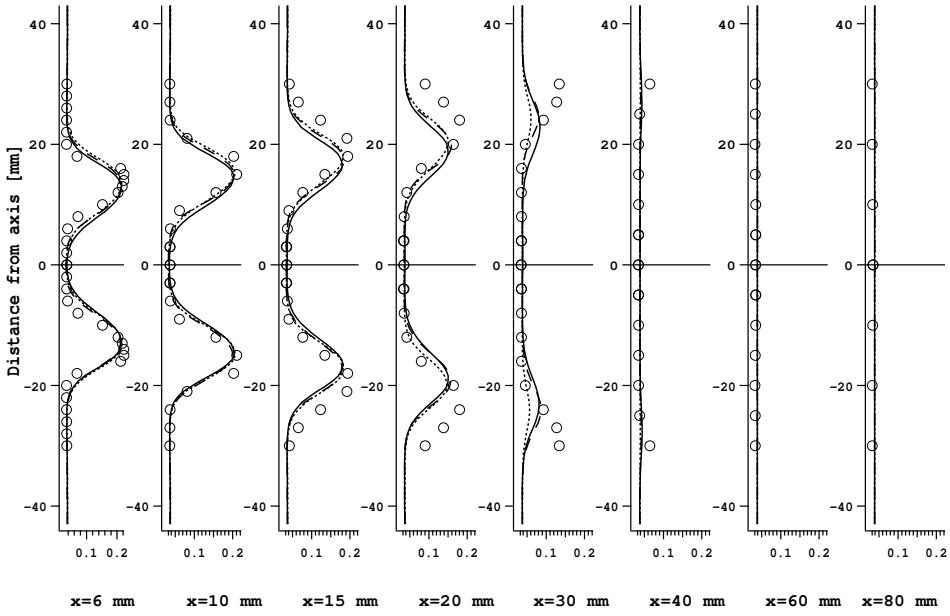


FIG. 7.46 - *Profils de fraction massique moyenne de O_2. (○) Raman; (———) Fonction Colin; (·····) Fonction Colin dynamique; (– – – –) Fonction Meneveau.*

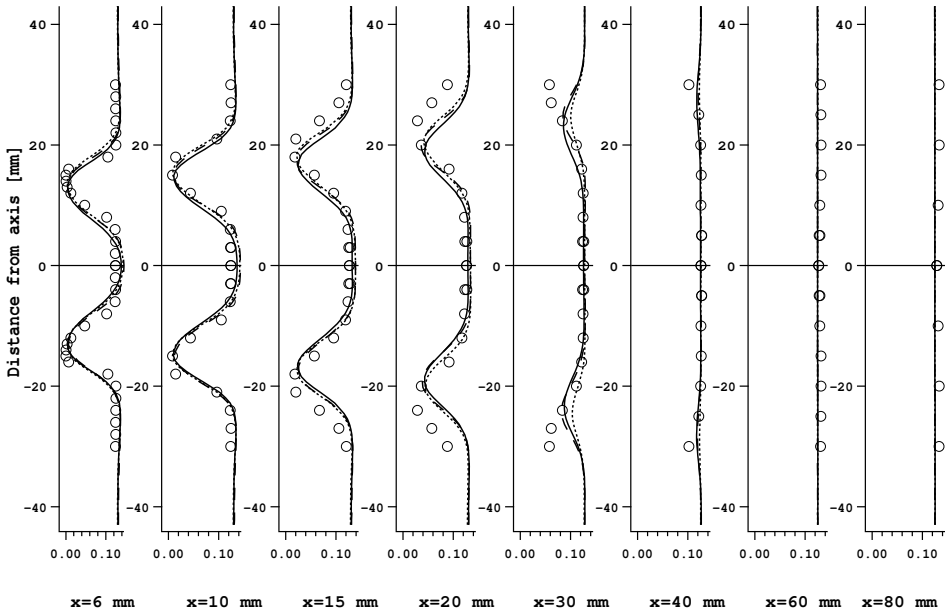


FIG. 7.47 - *Profils de fraction massique moyenne de CO_2. (○) Raman; (———) Fonction Colin; (·····) Fonction Colin dynamique; (– – – –) Fonction Meneveau.*

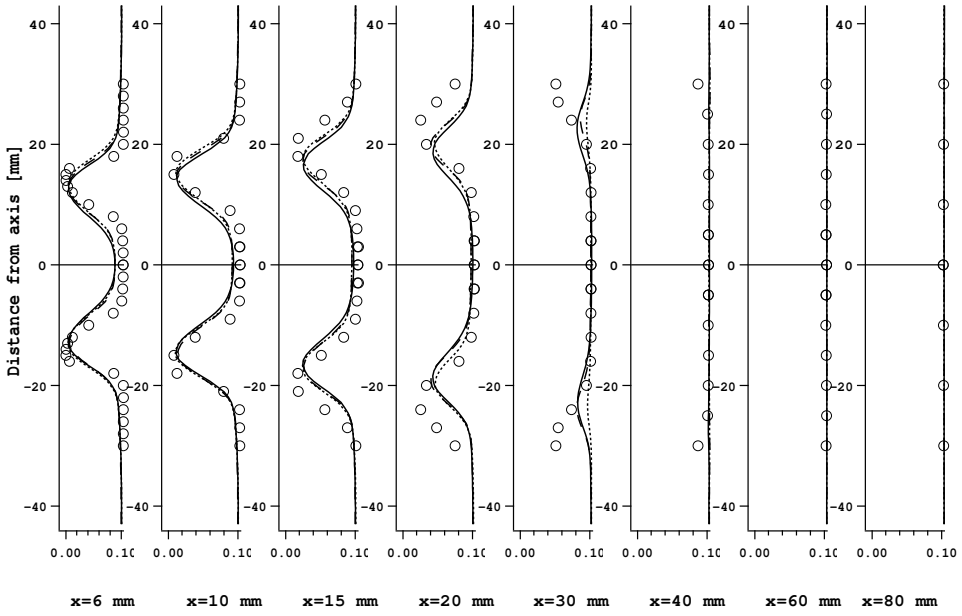


FIG. 7.48 - *Profils de fraction massique moyenne de H_2O. (○) Raman; (———) Fonction Colin; (·····) Fonction Colin dynamique; (− − − −) Fonction Meneveau.*

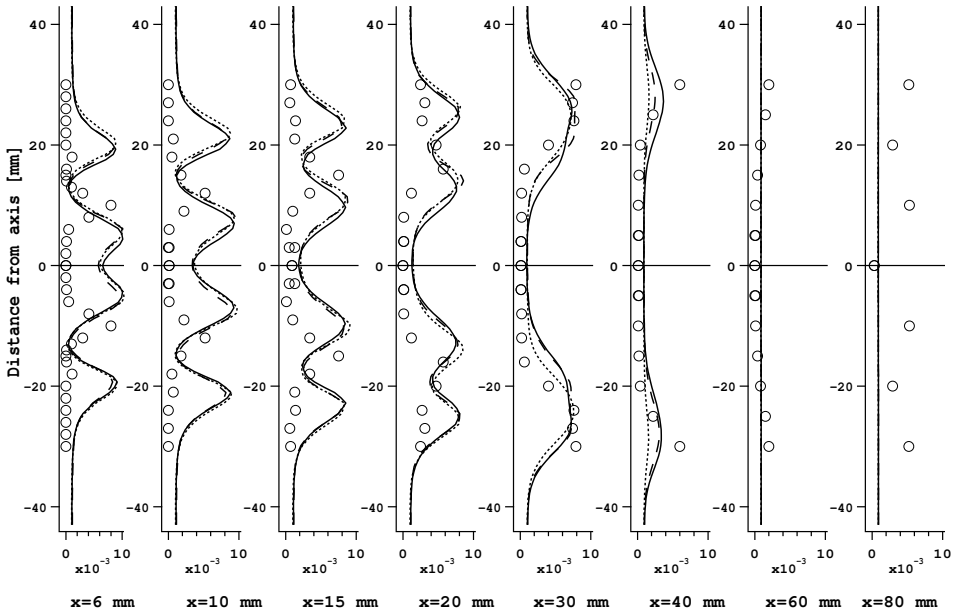


FIG. 7.49 - *Profils de fraction massique moyenne de CO. (○) Raman; (———) Fonction Colin; (·····) Fonction Colin dynamique; (− − − −) Fonction Meneveau.*

7.6.3.2.2 Influence de la résolution du maillage L'une des données importantes du problème est la résolution du maillage. Les 3 fonctions d'efficacité ont donc été testées sur des maillages de tailles différentes, dont les caractéristiques principales sont regroupées dans la table 7.6. Les résultats sont présentés sur les figures 7.50 à 7.61.

TAB. 7.6 - *Caractéristiques des maillages utilisés.*

n	Nombre de noeuds	Nombre de cellules
1	43 883	223 100
2	648 209	3 653 010
3	1 618 168	9 219 049
4	6 595 427	37 925 192

Les champs instantanés de fonction d'efficacité de *Colin dynamique* ne sont pas présentés car très proches de *Colin*, hormis aux murs où la décroissance vers $E = 1$ est clairement visible dans le cas *Colin dynamique*. Par contre, le champ instantané de fonction d'efficacité, type *Charlette*, est systématiquement très différent des deux autres puisqu'il est, comme attendu, quasiment intégralement saturé à la valeur limite $E = (1 + F)^{0.5} = 4.24$ sur les maillages grossiers. Cette étude permet par ailleurs de visualiser plus clairement l'importance de la résolution du maillage. Comme prévu, la valeur de la fonction d'efficacité décroît avec l'augmentation de la résolution.

On note que les faibles valeurs de l'efficacité (zones claires) sont obtenues dans les zones de recirculation et que les maxima sont crées avec *Colin* dans les zones de flamme. Le comportement de la fonction de *Charlette* reste surprenant. Dans tous les cas, on constate que le résultat final reste peu sensible à la fonction d'efficacité, ce qui est plutôt rassurant. On note d'ailleurs que cette conclusion rejoint celle obtenue à la section 7.5.3 pour PCM où un changement de facteur 3 dans la constante de dissipation scalaire ne menait qu'à un faible effet sur la flamme. Visiblement, des mécanismes de compensation existent dans ces modèles et changer un terme mène à d'autres ajustements de la flamme. Cette apparente robustesse du résultat, au moins pour les grandeurs moyennes, est un avantage des deux modèles dans le cas de PRECCINSTA mais ne doit pas être pris pour une règle générale.

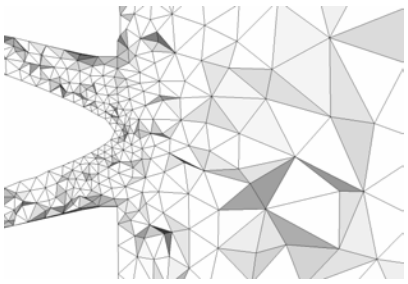


FIG. 7.50 - *Maillage 1.*

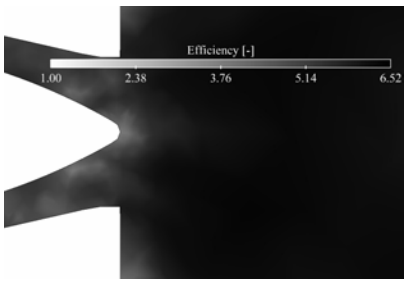


FIG. 7.51 - *Champ de fonction d'efficacité de Colin sur le maillage 1.*

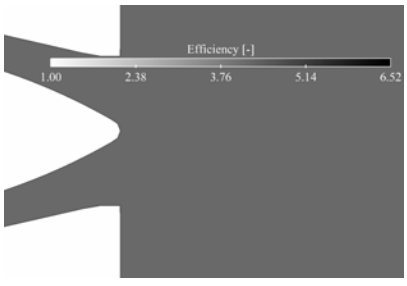


FIG. 7.52 - *Champ de fonction d'efficacité de Charlette sur le maillage 1.*

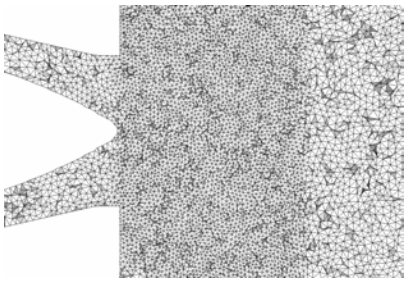


FIG. 7.53 - *Maillage 2.*

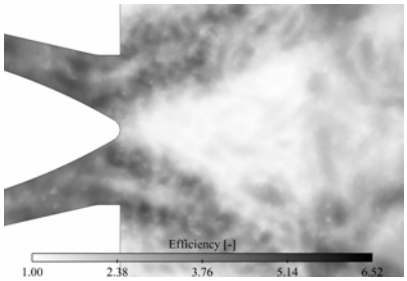


FIG. 7.54 - *Champ de fonction d'efficacité de Colin sur le maillage 2.*

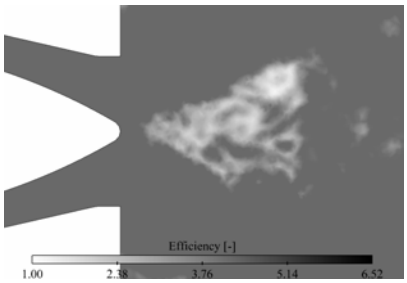


FIG. 7.55 - *Champ de fonction d'efficacité de Charlette sur le maillage 2.*

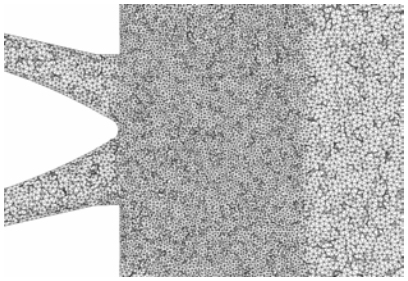


FIG. 7.56 - *Maillage 3.*

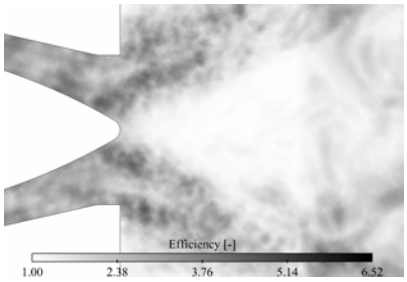


FIG. 7.57 - *Champ de fonction d'efficacité de Colin sur le maillage 3.*

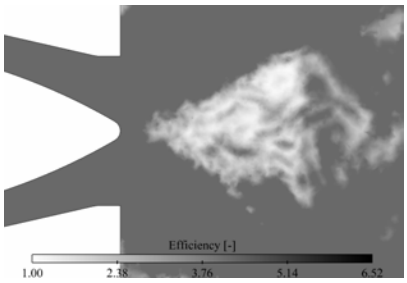


FIG. 7.58 - *Champ de fonction d'efficacité de Charlette sur le maillage 3.*

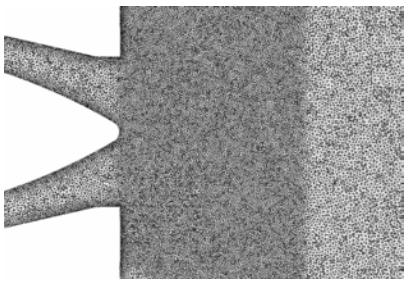


FIG. 7.59 - *Maillage 4.*

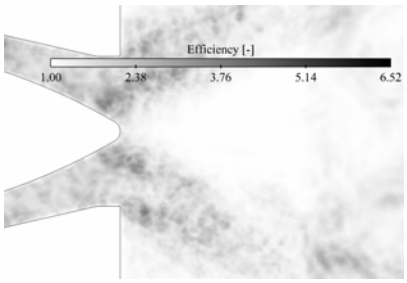


FIG. 7.60 - *Champ de fonction d'efficacité de Colin sur le maillage 4.*

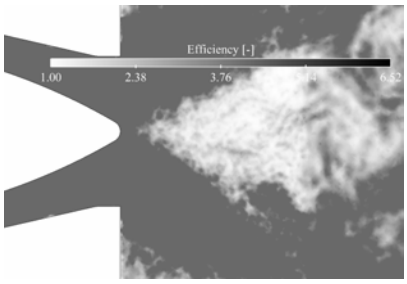


FIG. 7.61 - *Champ de fonction d'efficacité de Charlette sur le maillage 4.*

7.7 Conclusions

Le brûleur prémélangé PRECCINSTA avec hypothèse de prémélange parfait a permis de réaliser une quantité importante de tests et comparaisons sur les modèles de combustion turbulente et de cinétique chimique. Les conclusions principales sont les suivantes :

- Sur les champs de vitesse moyens et RMS, des modélisations de la cinétique chimique turbulente très différentes comme PCM-FPI et TFLES-2 étapes montrent des résultats très proches et en bon accord avec les résultats expérimentaux.
- Bien que la cinétique chimique réduite soit capable de donner les bons niveaux de fraction massique de CO en sortie de chambre de combustion, il y a un net avantage à la chimie complexe à l'intérieur de la chambre de combustion sur les fractions massiques de CO. Les modèles de combustion turbulente PCM et TFLES, pour un même schéma cinétique réduit, sont très proches l'un de l'autre. Malgré tout, la flamme semble plus large dans le cas PCM que dans le cas TFLES.
- Il est inutile de raffiner les tables PCM-FPI au delà d'un certain nombre de points, dépendant en particulier de la chimie considérée. Dans le cas de la combustion méthane-air, 145 points sont suffisants pour discrétiser la flamme monodimensionnelle.
- La variation de la constante de dissipation scalaire a peu d'effet sur les températures et fractions massiques (moyennes et rms).
- La tabulation fractions massiques permet d'obtenir de bien meilleurs résultats que la tabulation des taux de réactions, en particulier pour la prédiction de CO.
- Les fonctions d'efficacité de *Colin* et de *Charlette* sont très différentes sur les cas étudiés. Les champs de fonction d'efficacité de *Charlette* sont systématiquement saturés dans les zones d'intérêt (zones réactives). Une étude similaire doit être menée sur d'autres configurations turbulentes afin de statuer définitivement.

Chapitre 8

LES couplée mélange/combustion de la chambre de combustion partiellement prémélangée PRECCINSTA

8.1 Résumé

Le chapitre précédent présentait des calculs où le méthane et l'air étaient supposés parfaitement prémélangés, ce qui est une hypothèse forte. La configuration PRECCINSTA est calculée ici de nouveau mais en prenant en compte le mélange entre air et carburant pour :

- vérifier que la LES est capable de retrouver les hétérogénéités de mélange mises en évidence par *Meier et al.* [88]
- vérifier si ces hétérogénéités de mélange peuvent-être la cause d'instabilités de combustion
- vérifier l'importance des pertes thermiques sur la stabilité de la flame

Les objectifs poursuivis sont détaillés dans la section 8.2.

La section 8.3 présente la méthodologie utilisée pour réaliser la LES de cet écoulement réactif. Les modèles utilisés sont rappelés et le domaine de calcul est présenté.

Les résultats obtenus sont ensuite présentés dans la section 8.4. Dans un premier temps, la section 8.4.1 présente les effets de la prise en compte du mélange entre air et carburant. Par la suite (section 8.4.2), l'influence des conditions limites acoustiques est étudiée.

8.2 Introduction

Large Eddy Simulation methods are now routinely used for multiple academic configurations [35,47, 58,59,83,102,111] but also for real combustion chambers [17,19]. Even if models for turbulence / flame interaction are not fully mature yet, they offer reasonable levels of accuracy and a major question is now

the validation of LES tools. Such validations require first specific experiments with highly sophisticated measurement techniques and the TNF (Turbulent Non Premixed Flames) workshop has demonstrated in the past years how much progress could be achieved by comparing LES with well-documented academic flames [58, 59, 79, 103, 123, 148]

To validate LES for real combustors, the TNF flames are not sufficient and more representative flames are needed. One of them is the PRECCINSTA experiment [88] which is a swirled confined flame equipped with an industrial swirler (Fig. 8.1). This experiment corresponds to a configuration which is close to a real engine chamber and where multiple measurements, needed for LES validations, are available : average and RMS fields of velocity (3 components), temperature, major species as well as flame dynamics, pdfs of mixture fraction z, flame structures in the z diagram, stable and unstable regimes. This experiment has been used by different groups to validate LES tools [47, 93, 129] and recent work on the comparison of LES and experimental results for this case has shown that the accuracy of the LES results was not controlled only by the quality of flame / turbulence interaction or by the accuracy of the solver but by other phenomena which are typically not important in TNF flames :

- Like all real gas turbine engine flames, this experiment is confined, terminated by a nozzle and the heat losses to the walls (by convection and radiation) can affect significantly the flow.
- The fuel (methane in this case) is not fully premixed but it is injected by holes located in the swirler (Fig. 8.2). The experiment was designed so that this injection region was far upstream from the chamber and perfect premixing could be assumed for the LES. This simplification was essential for the LES because it made the computation much simpler : no LES of the methane jets (12 in this case) was needed. This is the main simplification used in all published papers [47, 93, 129].

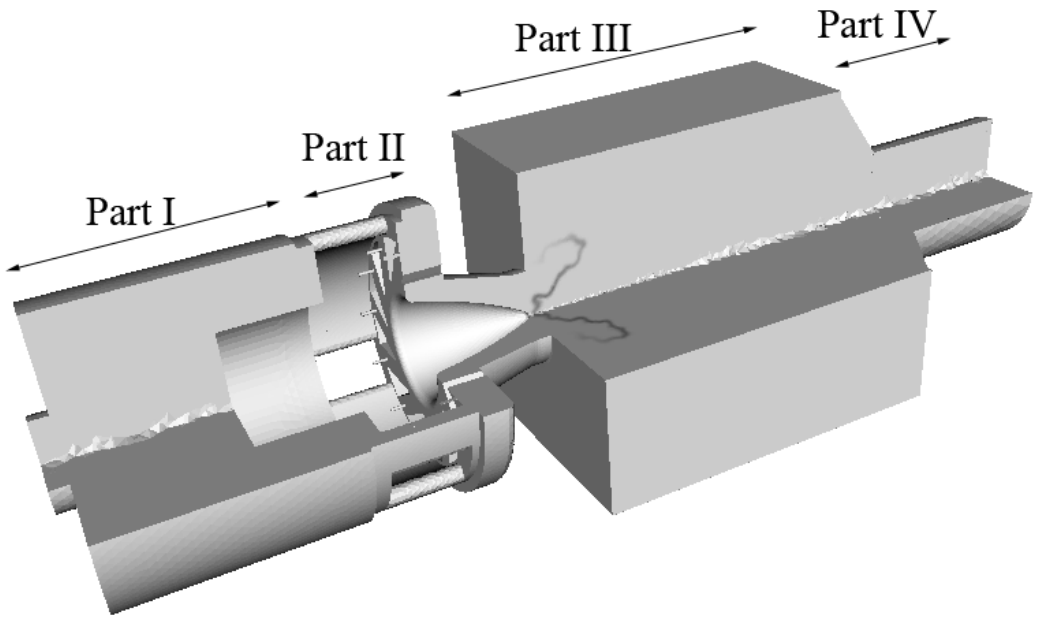


FIG. 8.1 - *Global view of the burner and combustion chamber.*

The objective of the present work is to investigate these two issues : (1) importance of heat losses

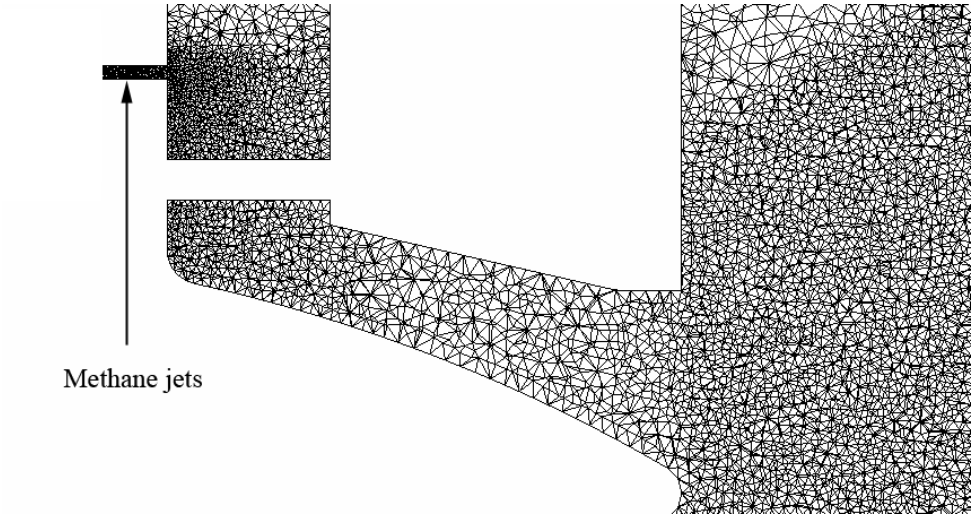


FIG. 8.2 - *Axial cut of the mesh centered on methane injection holes.*

and (2) importance of fuel injection and possible partial premixing. (1) Heat losses can be incorporated today in LES even if the models used for wall losses (usually law of the walls) and for radiation (gray gases) remain crude. Performing LES with these simple models allows at least to measure the effects of heat losses on the structure and stability of such flames and to say whether they are important or not. Recent papers on an Alstom geometry [133] or on a swirled methane/air flame at Twente University [140] have demonstrated that heat losses did change the flame structure obtained by LES in confined swirled flames. Nevertheless, results with heat losses are not ready yet and only adiabatic results are show in the following sections.

(2) The motivation for revisiting the assumption of perfect mixing comes from the recent results obtained at DLR [88] which showed that the mixture entering the chamber was not perfectly mixed and that this incomplete mixing was actually the source of the instabilities observed experimentally, following the classical mechanism proposed for examples by Lieuwen and Zinn [77] where a pulsating equivalence ratio leads to unstable combustion. Repeating the LES of this experiment while taking into account methane injection and explicitely resolving the methane jets is one of the objectives of the present study. The study is limited to a regime where the flame is stable and no attempt was made to predict unstable modes on this combustor. The configuration has been described in Chapter 6 and results are discussed in Section 8.4.

8.3 LES methodology for reacting flows

A Taylor-Galerkin weighted residual central distributions scheme is used as numerical integration [29]. It is a finite element scheme, providing third order accuracy in time and space. Time integration is done by a third-order explicit multi-stage Runge-Kutta scheme along with a CFL condition based on

the sum of local convective and acoustic velocities. The Smagorinsky model [143] is chosen to model the SGS viscosity (see section 3.3.1). Chemical kinetics and flame-turbulence interaction are modeled by the two-steps reduced kinetic scheme with PEA described in section 4.3.3.2.1. The flame/turbulence interaction is modeled by the dynamically thickened flame/efficiency function model [2,27,74] described in section 4.1.

The full geometry is meshed, including the 12 methane injection holes, upstream of the swirler (Fig. 8.3). The mesh is unstructured and contains around 900000 nodes for more than 5 millions elements. 35 % of the cells are located in the plenum (22 % in the swirler and 6 % in the methane injection), 61 % in the combustion chamber and 4 % in the atmosphere.

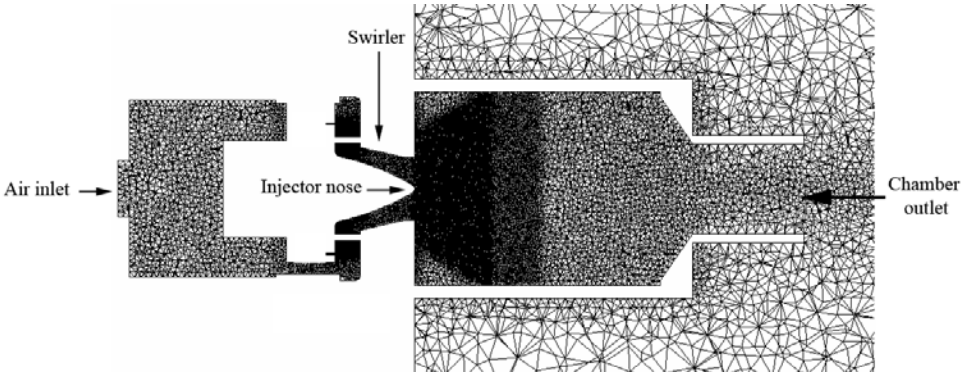


FIG. 8.3 - *Axial cut of the mesh.*

Methane injection is shown on Figure 8.2. Due to the small tubes, the mesh is refined inside the swirler vanes. There are at least 5 cells in radial direction for each hole, which means that the cell length is about 0.2 mm. Those cells are the smallest of the computational domain. They control the time-step, depending on the CFL number. typical time-steps are $0.07\ \mu s$.

Three types of boundary conditions are used for walls of the computational domain (see Fig. 8.4). Adiabatic law of the wall formulation are used for the methane injectors, the atmosphere, the combustion chamber and the injector "nose", and adiabatic no-slip walls for all other walls.

Both inlets and outlet are described by Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC) [92, 107] to ensure a physical representation of the acoustic wave propagation.

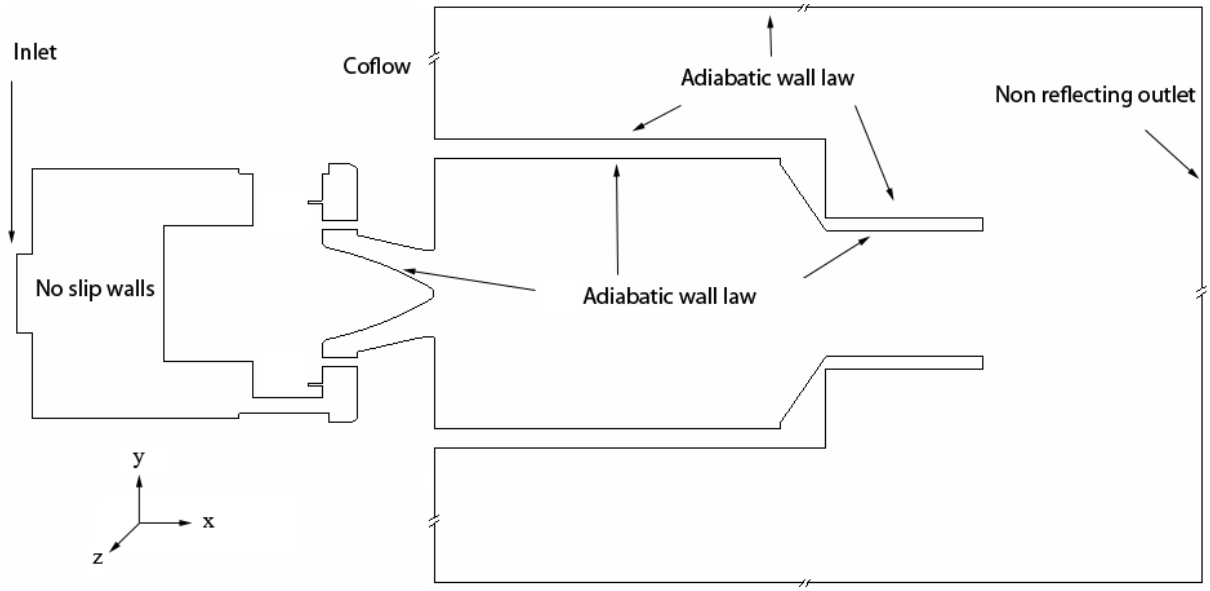


FIG. 8.4 - *Boundary conditions.*

8.4 Results

Table 8.1 summarizes the characteristics of the computations which will be discussed below. In section 8.4.1, the importance of taking the 12 methane jets into account is highlighted by comparing the LES (SOFT case) with the experimental results of Meier *et al.* [88] and with the PCM-CM2 LES of chapter 7.4. In section 8.4.2, the influence of acoustic boundary conditions will be studied by comparing the SOFT and STIFF cases. The differences between the SOFT and STIFF runs are the relaxation coefficients for the air and the CH_4 inlets. The acoustic wave entering an inlet in AVBP is written :

$$\mathcal{L}^+ = K(u - u^t) \tag{8.1}$$

where u^t is the target velocity. Large values of K allow to obtain velocities which are close to the target but lead to strong acoustic reflexions. Low values of K lead to non reflecting boundary conditions but may produce drifts of inlet velocities compared to their target values [108, 111]

TAB. 8.1 - *Values of combustion regime and inlet relaxation coefficients for the two runs SOFT and STIFF. All other parameters are exactly the same.*

Case	$\dot{m}_{Fuel}$ [kg/sec]	$\dot{m}_{Air}$ [kg/sec]	T_{Fuel} [K]	T_{Air} [K]	Global equivalence ratio [-]	Air inlet relaxation coefficient	Methane inlet relaxation coefficient
SOFT	$5.983.10^{-4}$	0.012237	350	350	0.83	50	20
STIFF	$5.983.10^{-4}$	0.012237	350	350	0.83	500	5000

8.4.1 Mixing study (SOFT case)

Mixture fraction is analyzed inside the injector (Fig. 8.5) and profiles are displayed on Fig. 8.6 for the reacting flow LES of Tab. 8.1 (SOFT case). It shows the heterogeneity of mixture fraction when displacing radially. Mixture fraction z is computed as follows :

$$z = Y_{CH_4} + \frac{4}{9} Y_{H_2O} \tag{8.2}$$

An instantaneous field of mixture fraction is presented on Fig. 8.7. It shows the heterogeneity of mixture fraction inside the injector, but also inside the combustion chamber.

Scatterplots of temperature versus mixture fraction in planes located at x=6, 15, 30 and 80 mm (Fig. 8.4) for single-shot Raman measurements and LES data are presented on figure 8.8 for the SOFT case of table 8.1.

The experimental results of Meier *et al.* [88] confirm that the flow is not perfectly premixed (left column in Fig. 8.8). The vertical line a $z = 0.04661$ corresponds to the mean mixture fraction of the

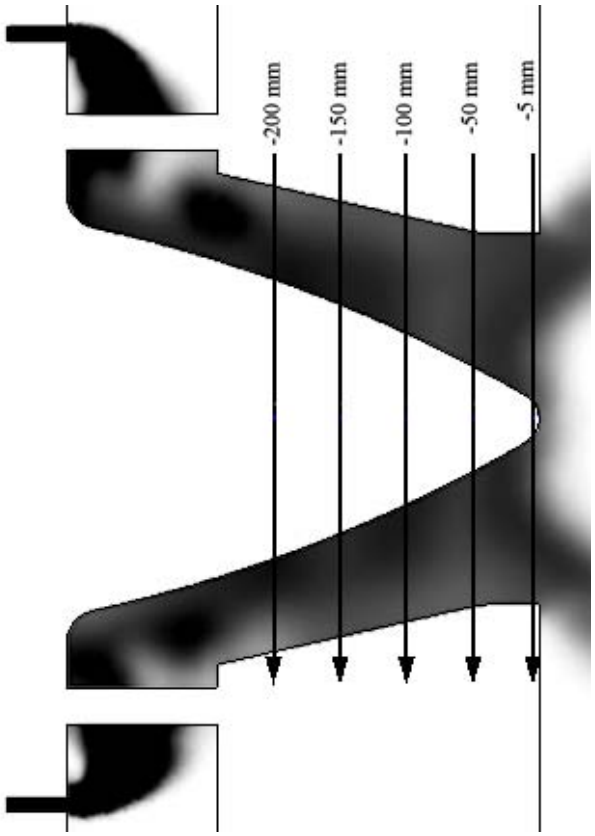


FIG. 8.5 - *Position of the probe lines for mixture fraction profiles.*

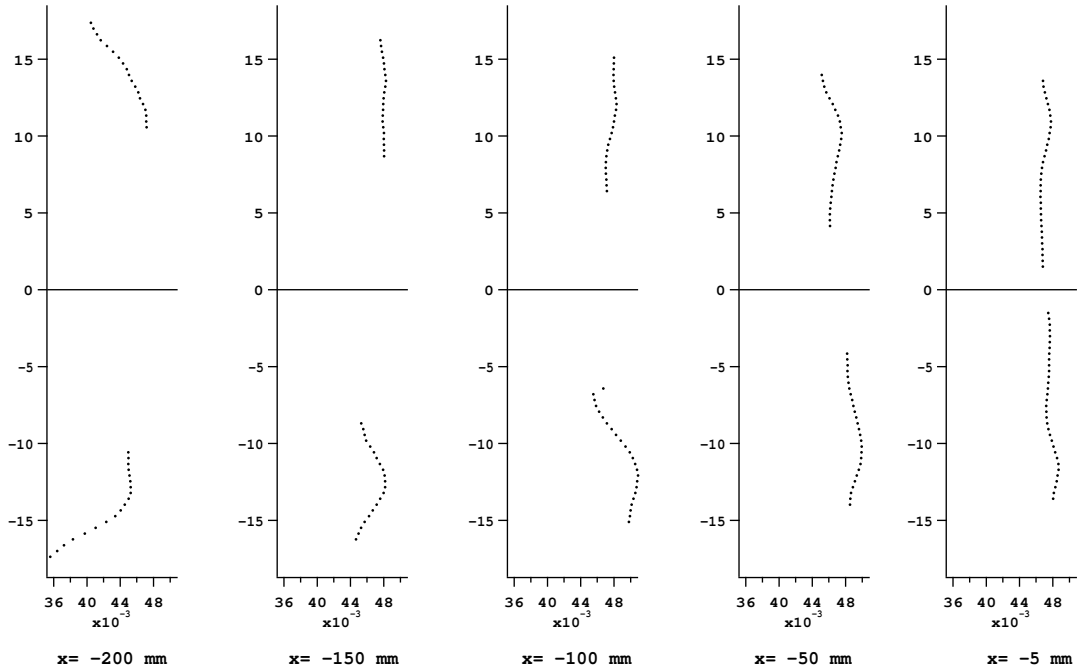


FIG. 8.6 - *Averaged mixture fraction profiles inside the injector.*

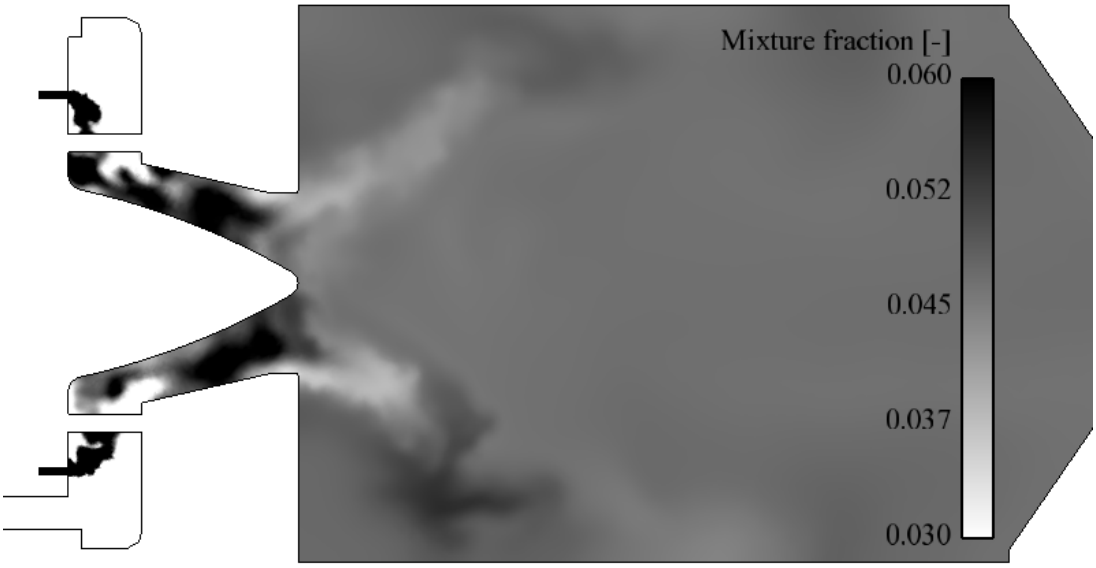


FIG. 8.7 - *Instantaneous field of mixture fraction.*

burner $\left(\frac{\dot{m}_{Fuel}}{\dot{m}_{Fuel}+\dot{m}_{air}}\right)$ and there is a significant dispersion on both sides of this mean value, indicating partial premixing. The LES results (right column in Fig. 8.8) exhibit the same trend with comparable dispersion at every distance x from the injector.

The same conclusion is obtained when plotting scatterplots at 6 mm only from the injector, and at various radial distances (Fig. 8.9).

Fig. 8.10 displays pdfs of mixture fraction in four planes located at x=6, 15, 30 and 80 mm. The agreement between LES and Raman data is quite reasonable. Fig. 8.11 provides the same comparison at x=6 mm as a function of the distance to the combustor axis (0 to 6 mm, 8 to 12, 13 to 16 and 18-30 mm). Again, the comparison is very good, confirming that mixing is definitely not perfect and that LES captures it correctly. Another useful indication of Fig. 8.8 to 8.13 is that very few points in the chamber reach a local mixture fraction larger that 0.07 corresponding to a local equivalence ratio of 1.25. In this region, the two-step scheme used in LES works correctly both for flame speed and temperature (Fig. 8.14 and 8.15). Another confirmation of the partially premixed character of the flame is given in Fig. 8.12 which displays a scatter plot of instantaneous reaction rates vs mixture fraction : very few points burn at mixture fraction larger than 0.065. Finally, Fig. 8.13 displays an histogram of total reaction rate versus mixture fraction and exhibits again that a very small quantity of methane is burnt in rich regime.

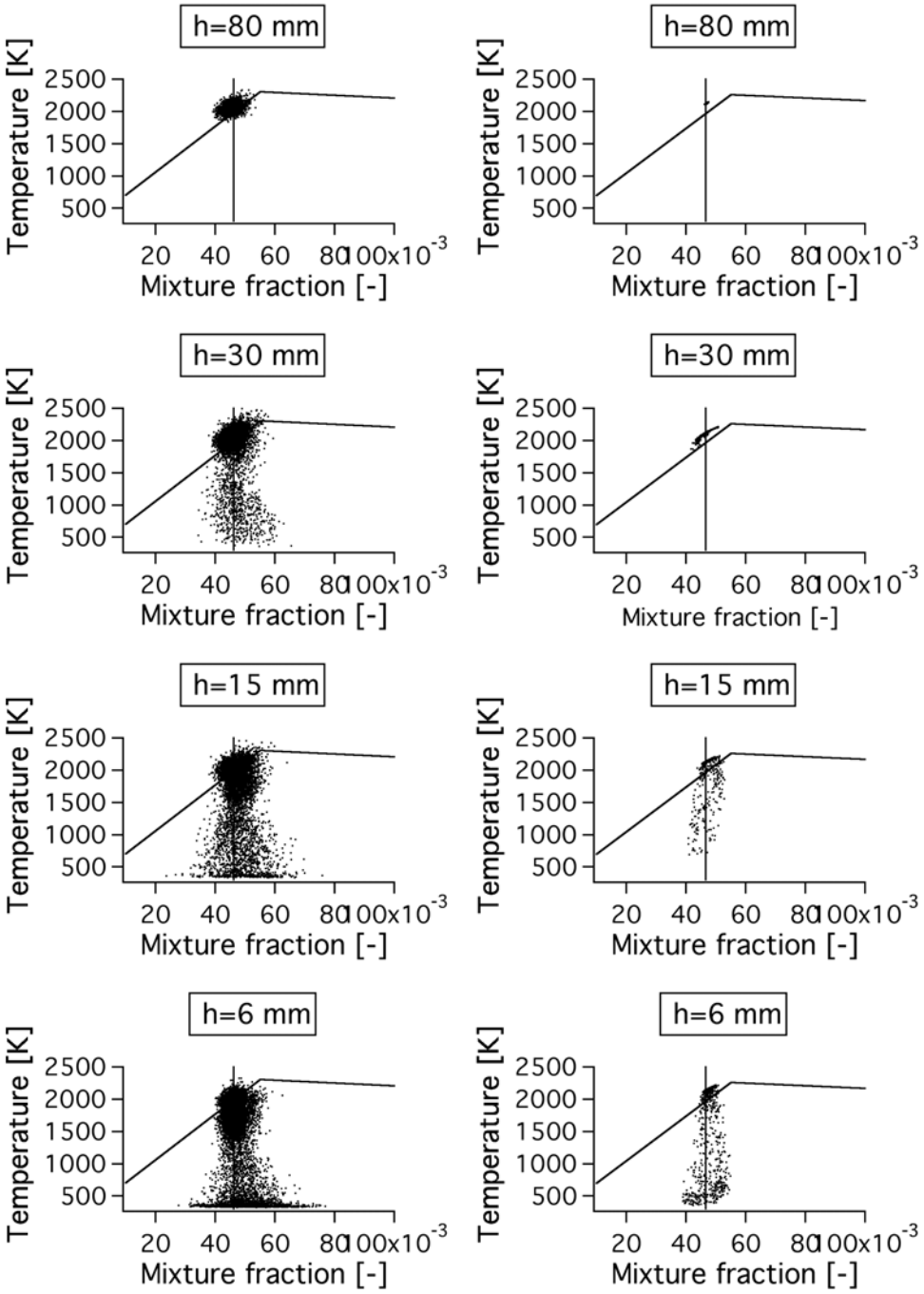


FIG. 8.8 - *Scatterplots of temperature versus mixture fraction at 6, 15, 30 and 80 mm for single-shot Raman measurements (left) and LES data (right). The vertical line indicates the global mixture fraction of the flame and the other lines are mixing lines.*

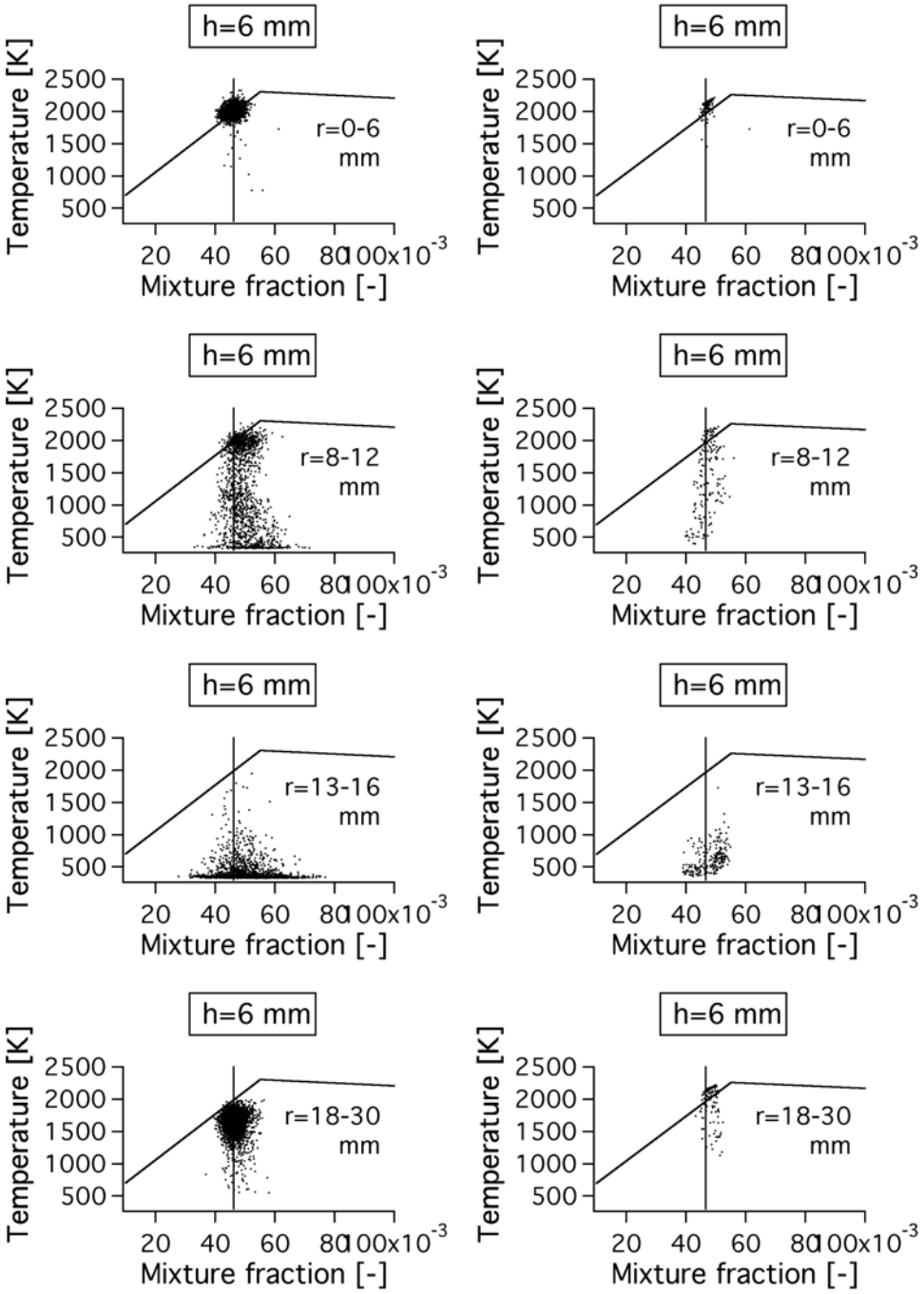


FIG. 8.9 - *Scatterplots of temperature versus mixture fraction at 6 mm at several radial positions for single-shot Raman measurements (left) and LES data (right). The vertical line indicates the global mixture fraction of the flame and the other lines are mixing lines.*

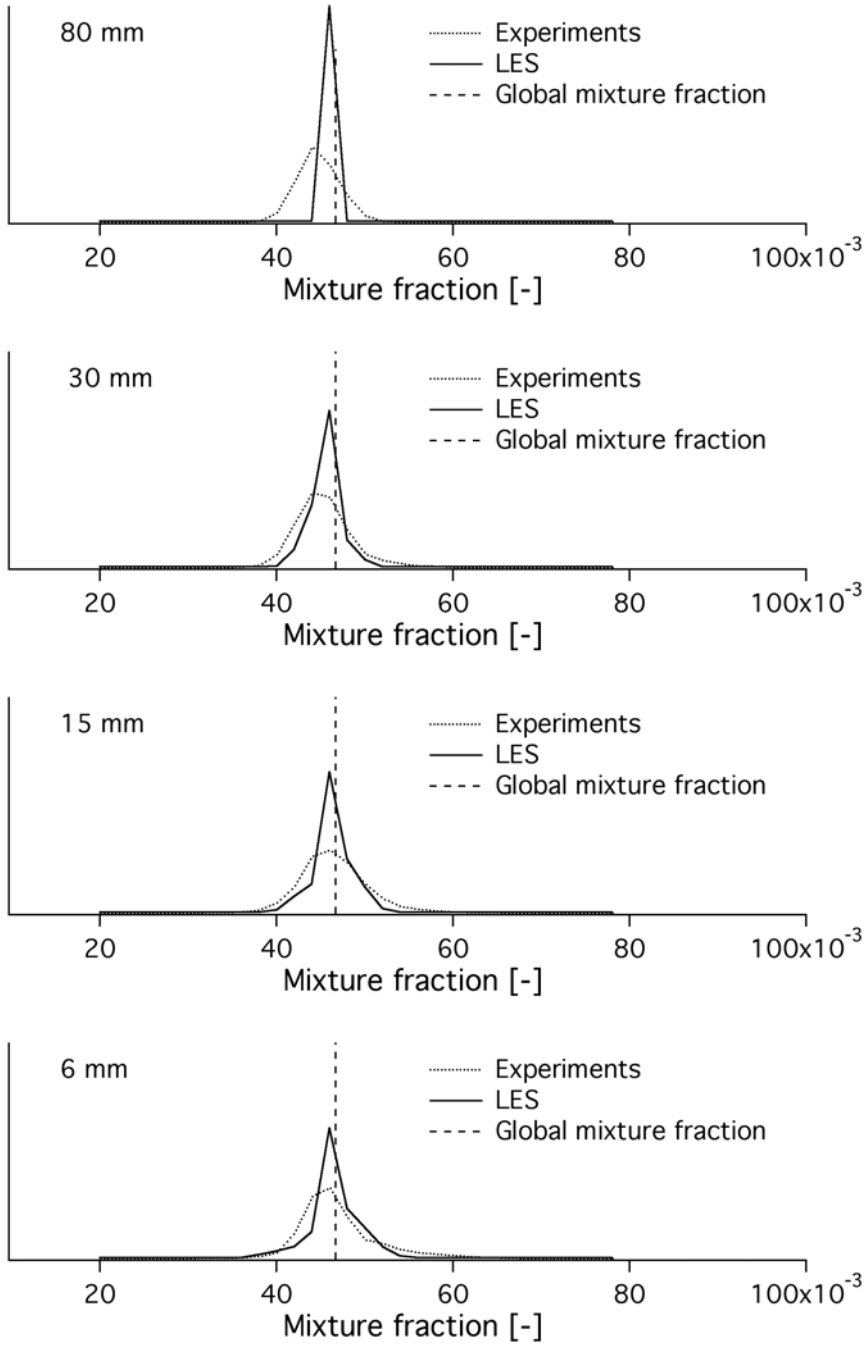


FIG. 8.10 - *Probability density function of mixture fraction at 6, 15, 30 and 80 mm for single-shot Raman measurements (·····) and LES data (———).*

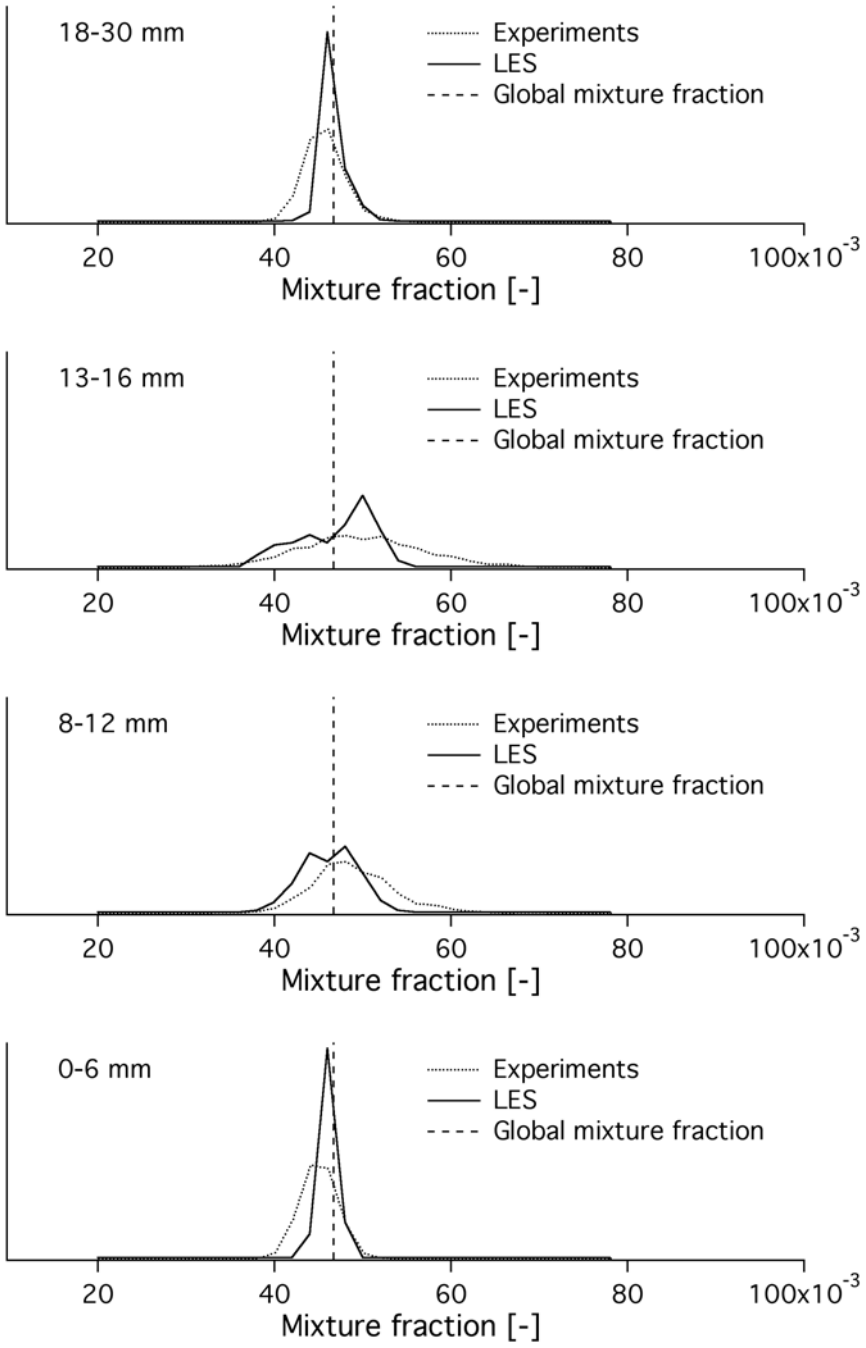


FIG. 8.11 - *Probability density function of mixture fraction at 6 mm at several radial positions for single-shot Raman measurements (·····) and LES data (———).*

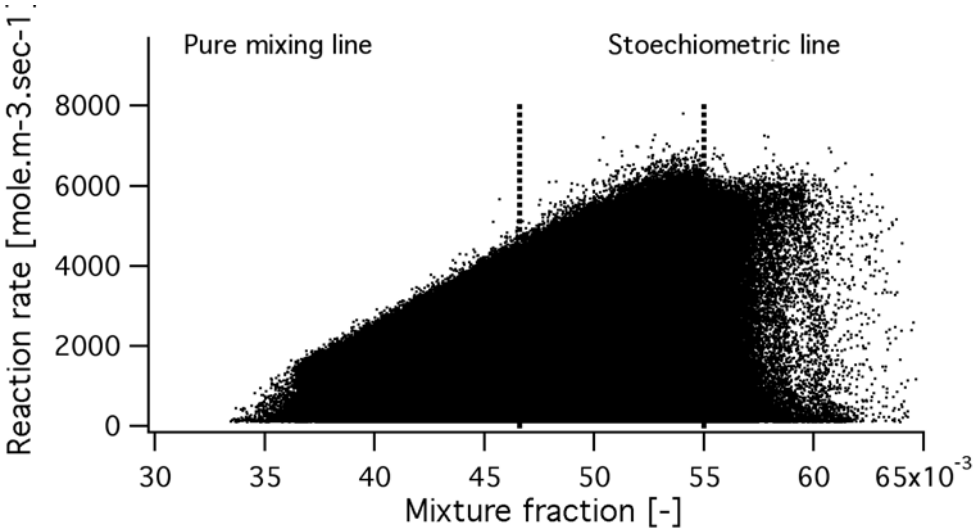


FIG. 8.12 - *Scatter plot of instantaneous reaction rate versus mixture fraction.*

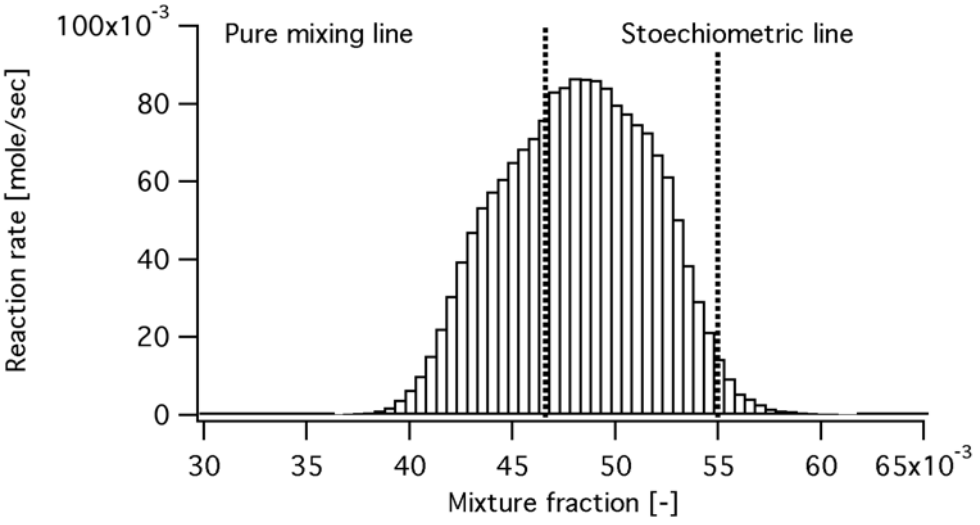


FIG. 8.13 - *Histogram of total reaction rates versus mixture fraction.*

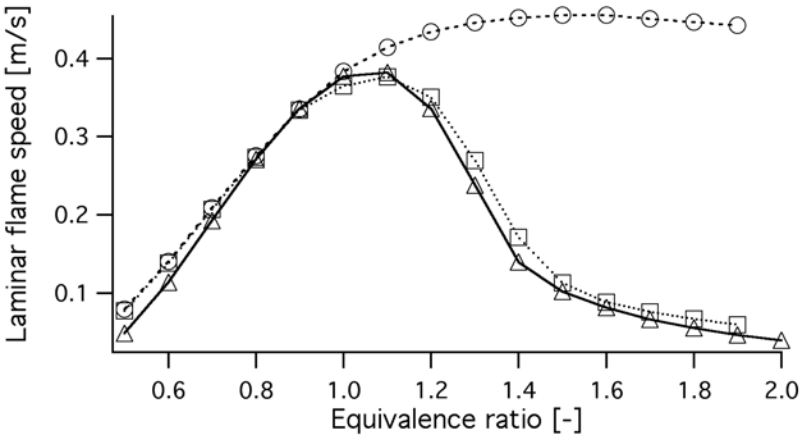


FIG. 8.14 - *Flame speed as a function of equivalence ratio. (—△—) GRI-MECH; (– – –○– – –) 2 étapes CM2 (sans PEA); (···⊡···) 2 étapes avec PEA, méthode 1 ; (··+···) 2 étapes avec PEA, méthode 2.*

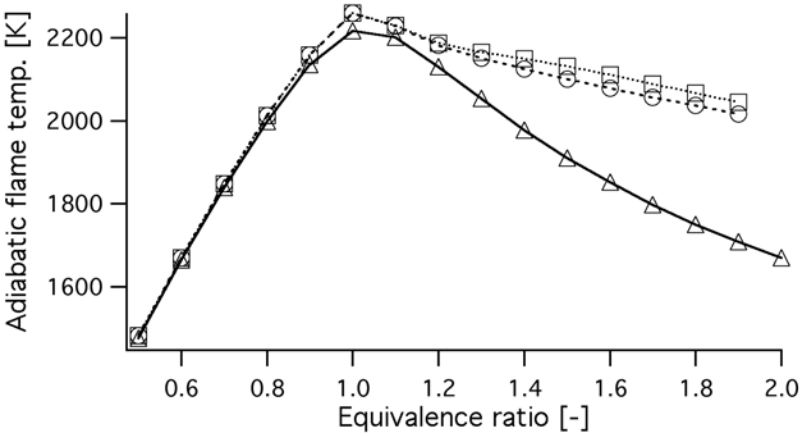


FIG. 8.15 - *Adiabatic flame temperature as a function of equivalence ratio. (—△—) GRI-MECH; (– – –○– – –) 2 étapes CM2 (sans PEA); (···⊡···) 2 étapes avec PEA, méthode 1 ; (··+···) 2 étapes avec PEA, méthode 2.*

Results of the SOFT run are now compared to the LES with perfect premixing assumption of Section 7.4 on Fig. 8.16 to 8.26.

Mean profiles, displayed on Fig. 8.17 to 8.21, do not show a clear advantage for the LES with mixing (SOFT run). The effect of mixing is clearer on RMS profiles (Fig. 8.22 to 8.26) where the LES taking into account the 12 methane jets is more accurate.

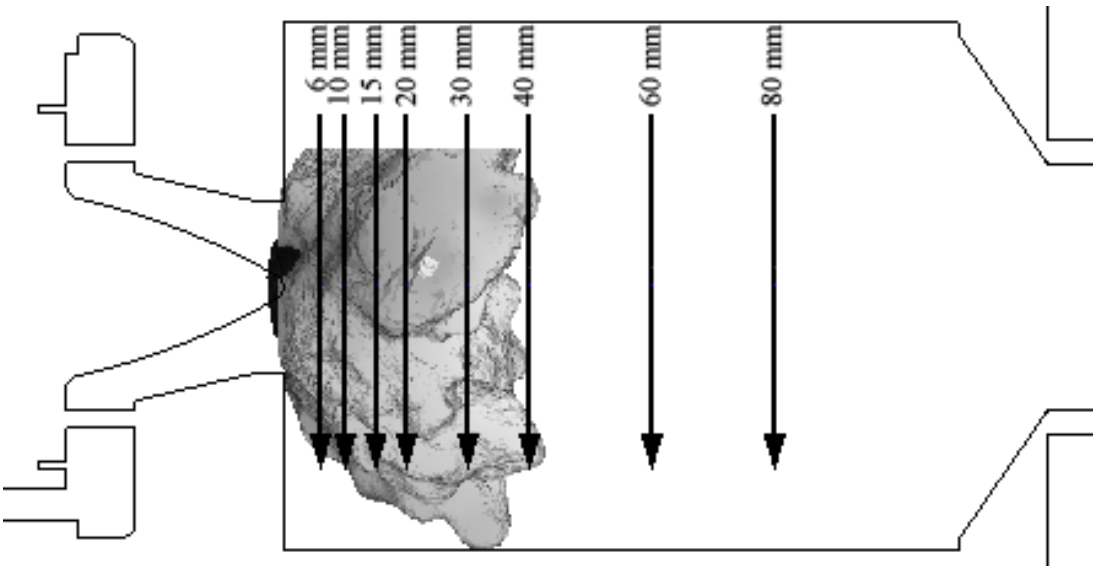


FIG. 8.16 - *Position of the probe lines for species and temperature profiles. The LES flame is visualized with an isosurface of reaction rate colored by temperature.*

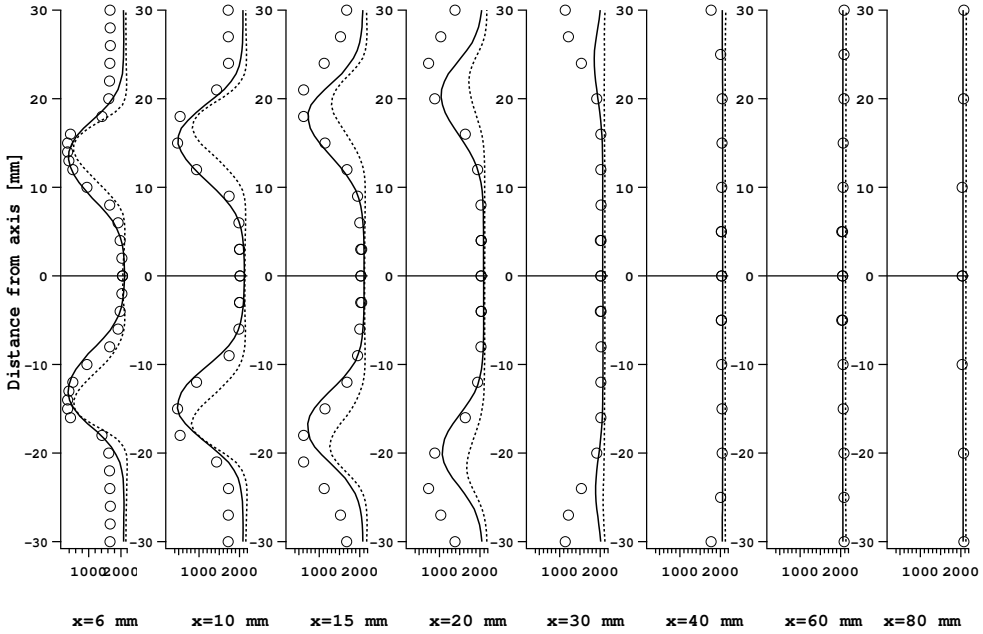


FIG. 8.17 - *Mean temperature profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

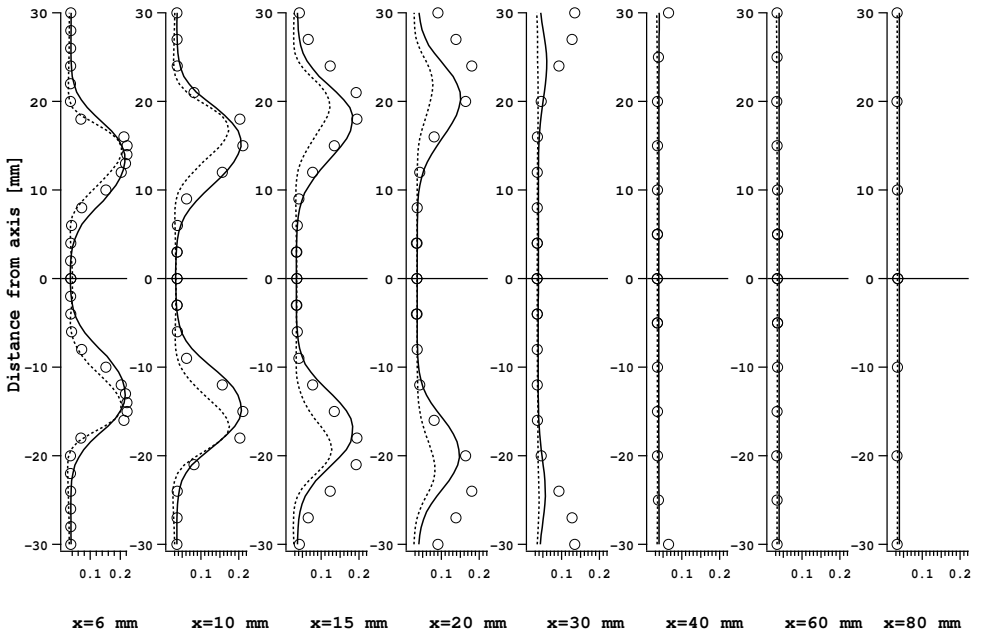


FIG. 8.18 - *Mean O_2 mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

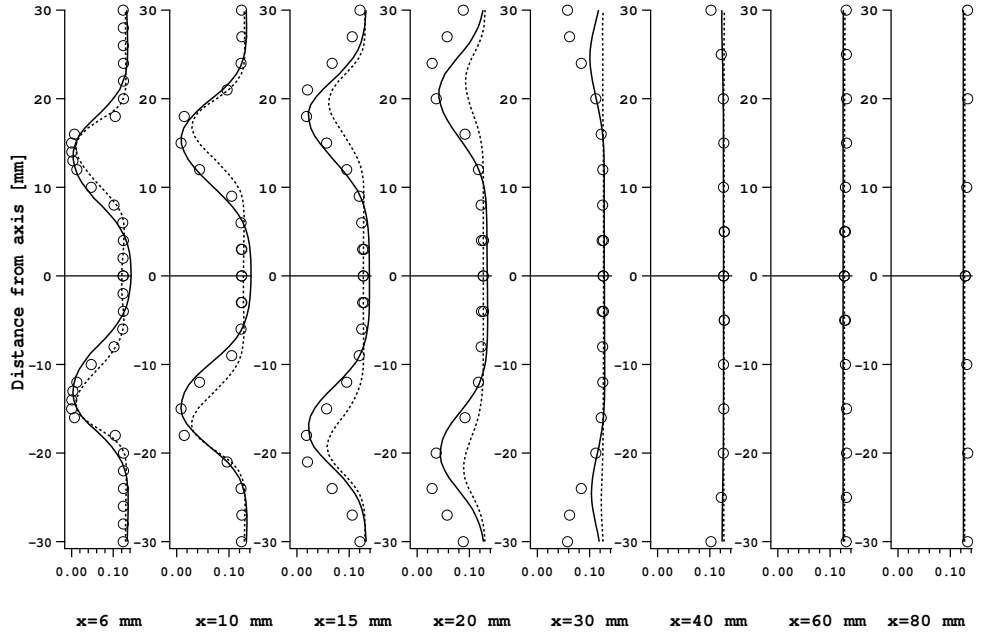


FIG. 8.19 - *Mean CO_2 mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

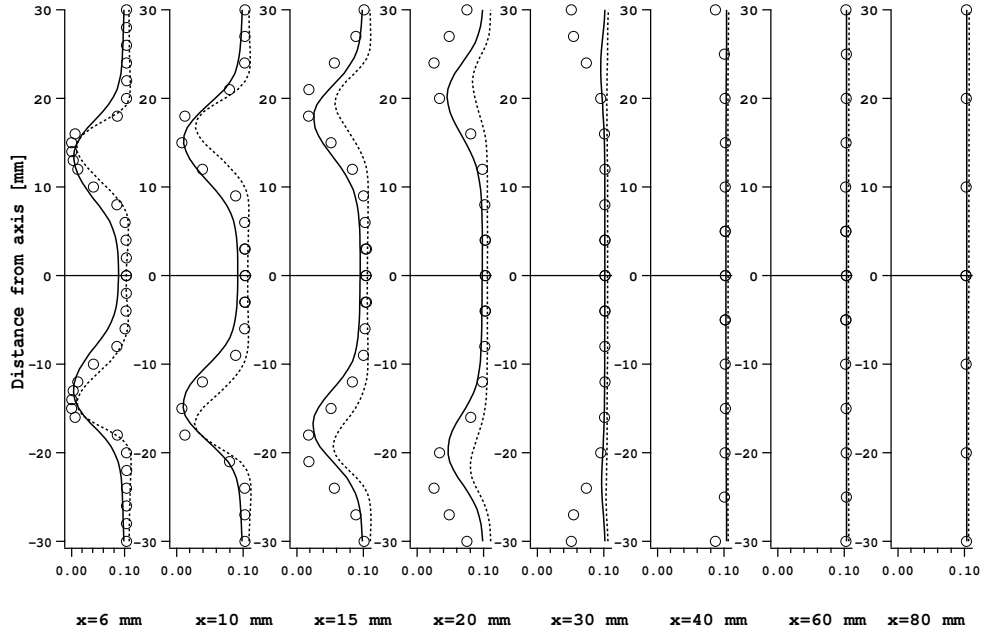


FIG. 8.20 - *Mean H_2O mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

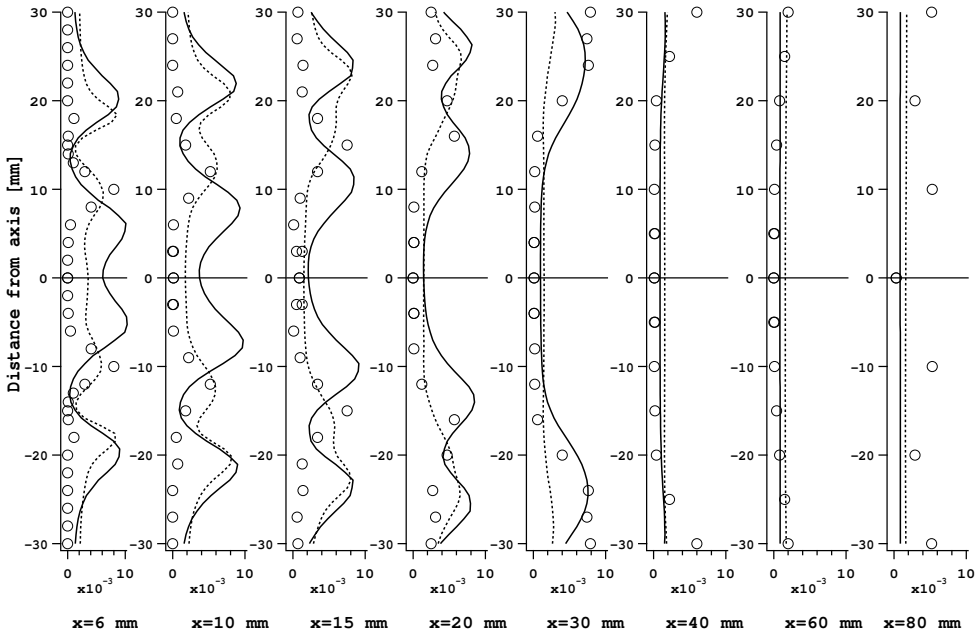


FIG. 8.21 - *Mean* CO *mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

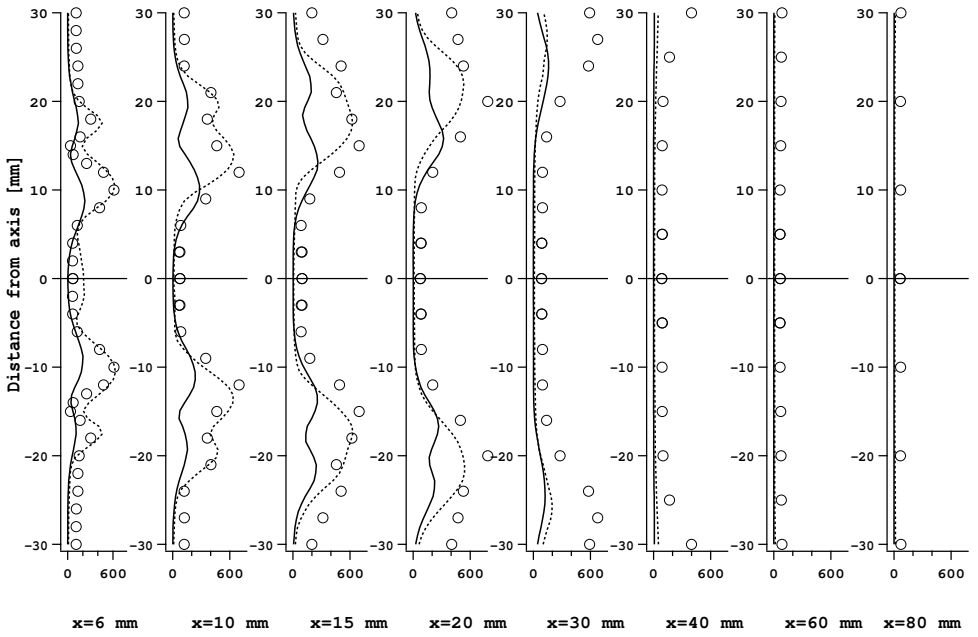


FIG. 8.22 - *RMS temperature profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

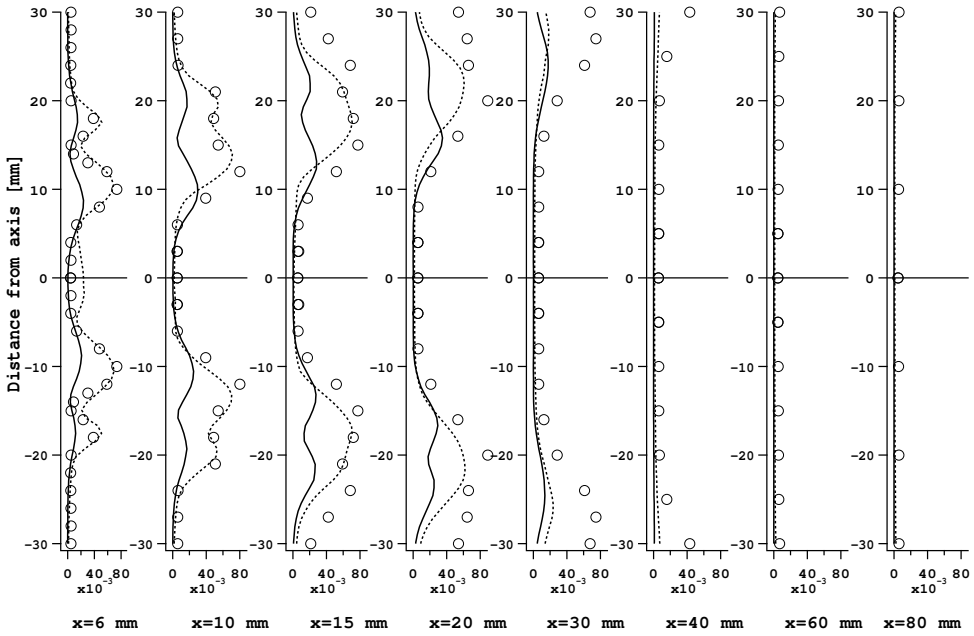


FIG. 8.23 - *RMS* O_2 *mass fraction profiles.* (○) *Raman;* (———) *TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4);* (− − − −) *TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

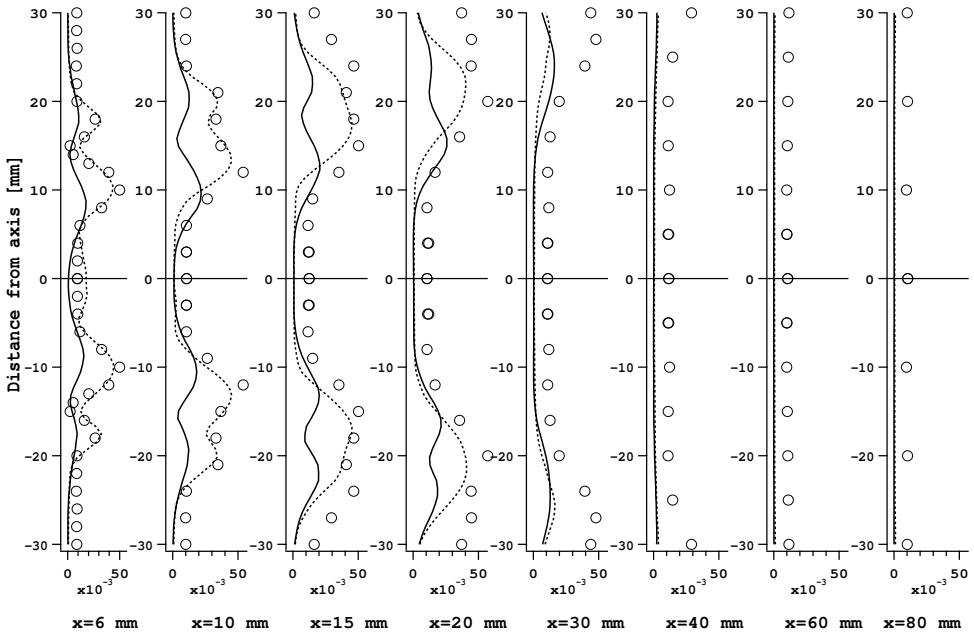


FIG. 8.24 - *RMS* CO_2 *mass fraction profiles.* (○) *Raman;* (———) *TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4);* (− − − −) *TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

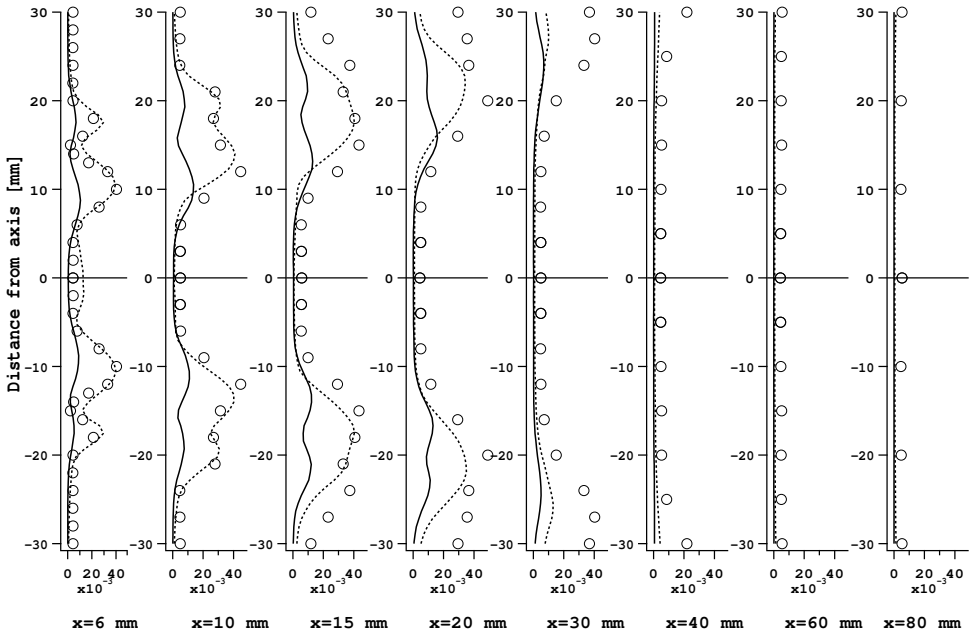


FIG. 8.25 - *RMS* H_2O *mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

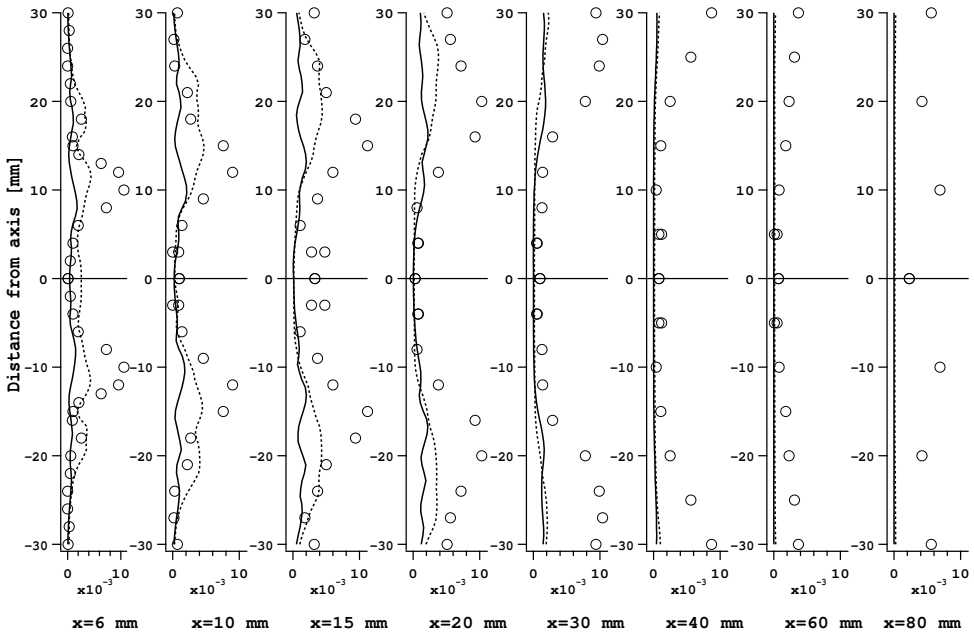


FIG. 8.26 - *RMS* CO *mass fraction profiles. (○) Raman; (———) TFLES with perfectly premixed solution (Section 7.4); (– – – –) TFLES with methane jets injection (SOFT run in table 8.1).*

8.4.2 Influence of acoustic boundary conditions

Even though studying combustion instabilities was not the objective of this work it is worth mentioning a few results linked to this issue : First, the PRECCINSTA experiment exhibits unstable modes. The $\phi = 0.75$ case can be unstable, the 0.83 case is stable. When the first LES of the PRECCINSTA experiment was performed [129], no unstable mode appeared in the LES. At that time (2004), the DLR group had not measured mixing yet and the results of DLR in 2007 [88] were the first indication that mixing was not perfect : this was a possible explanation of some discreapancies observed for the mean flow but also the suggestion that unperfect mixing could have been the source of the instabilities in the experiment. This would also have explained why LES performed with perfect mixing assumptions failed to capture unstable modes.

During the present work, we focused on taking into account the methane jet injection and the explicit computation of mixing to investigate its effect on the combustion chamber flow. The 0.83 case was chosen because temperature and species measurements were available and because the flow was stable in the experiment. However, LES results showed rapidly that the introduction of the methane jets into the LES, even for a supposedly stable regime, revealed many unstable modes and their stabilization proved to be a central difficulty throughout this study. The results displayed in the previous sections were obtained for the most stable regime which could be obtained. The most important parameters which control the occurence of the unstable modes are the impedances imposed at the air and methane jets inlets. A simple sentence summarizing the results described below could be "As soon as the air inlet or the methane inlet impedances are such that acoustic waves reflect significantly on these boundary conditions, the chamber starts resonating". This is different of what was observed for the perfectly premixed simulations of chapter 7 or of Roux et al [129] where no unstable regime was observed even for strongly reflecting inlets.

To illustrate these findings, the present section compares two computations : the first one is the reference case (called here SOFT) presented previously while the second one (STIFF) corresponds to exactly the same LES inwhich the inlet conditions have been made more reflective. This is achieved by increasing the relaxation factor σ used in the NSCBC method [92, 111, 139]. This factor controls the amplitude of the waves entering the domain : this amplitude $\mathcal{L}^+$ is proportional to the difference between instantaneous and target values multiplied by σ. For example, if the target velocity is u^t, the amplitude of the ingoing acoustic wave $\mathcal{L}^+$ will be written as :

$$\mathcal{L}^+ = \sigma(u - u^t) \tag{8.3}$$

Low values of σ lead to zero values of ingoing acoustic waves and non reflecting conditions where acoustic waves can leave the domain without reflection ; in this case, target values may not be fully respected. For larger values of σ, the target values of velocity will be strictly followed but the inlet condition will be reflecting, leading to possible combustion instabilities.

For PRECCINSTA, Table 8.1 indicates the values of the σ coefficients used for the air and methane inlets respectively for the two simulations SOFT and STIFF (all methane inlets use the same coefficient). Fig. 8.27 to 8.32 display time variations of the air inlet mass fluxes, methane inlet mass fluxes as well

as the velocity and pressure probe signals for points located on the air inlet and one of the methane inlets. Fig. 8.33 displays the time variations of the mean heat release in the domain for both simulations. The reference simulation (SOFT) displays a limited activity at a frequency of 552 Hz while the STIFF simulation exhibits a strong unstable mode at 499 Hz. A time analysis of waves on the air and methane inlets is given in Fig. 8.34 and 8.35. The ingoing $\mathcal{L}^+$ and outgoing $\mathcal{L}^-$ wave amplitudes are obtained from the time velocity and pressure signal using the following relations :

$$\mathcal{L}^+ = \frac{\partial p}{\partial t} + \rho c \frac{\partial u}{\partial t} \tag{8.4}$$

$$\mathcal{L}^- = \frac{\partial p}{\partial t} - \rho c \frac{\partial u}{\partial t} \tag{8.5}$$

Fig. 8.34 and 8.35 show that for the SOFT simulation, the ingoing wave level remains small compared to the outgoing wave. For the STIFF simulation however, the amplitude of the ingoing wave is of the same order as the outgoing wave amplitude and is following its time evolution. This indicates a strong reflection and explains why the STIFF simulation can resonate.

Obviously, when the chamber starts resonating, the flames pulsates and the RMS fields are affected : Fig. 8.36 and 8.37 compares the RMS fields of temperature and H_2O for the SOFT and STIFF simulations. When the chamber resonates, the RMS values increase, as expected.

Finally, Figs. 8.38 and 8.39 display instantaneous fields of temperature corresponding to extreme positions of the flame in both simulations. As expected, for the SOFT simulation, the flame remains located near the dump while periodic flashbacks are observed for the STIFF simulation. This visual verification highlights the crucial importance of boundary conditions in any good LES of reacting flows.

Studying completely the instabilities in the PRECCINSTA experiment is beyond the present work but important conclusions may be drawn from the previous results :

- Like in the experiment, LES taking into account the methane injection become easily unstable.
- The whole flow field and especially the RMS fields are influenced by the acoustic level so that trying to match the mean and RMS fields in PRECCINSTA probably requires a very careful study of inlet impedances to use the same values in the LES and in the experiment and make sure that the level of resonance is matched. In the present case, it seems that for the $\phi = 0.83$ case, a totally non-reflecting (simulation SOFT) is the right choice. For other cases like $\phi = 0.75$, this is probably not true anymore. This also indicates that calculating PRECCINSTA must be done with a compressible solver.
- Predicting the exact frequency and amplitude of unstable modes in PRECCINSTA will definitely require the knowledge of the inlet impedances, something which has been overlooked until now. This is not a surprising conclusion and similar ideas are now common in gas turbine chambers where the impedance of the air inlet (on the compressor side) is clearly needed to predict the behavior of the combustor. This is left for further work.

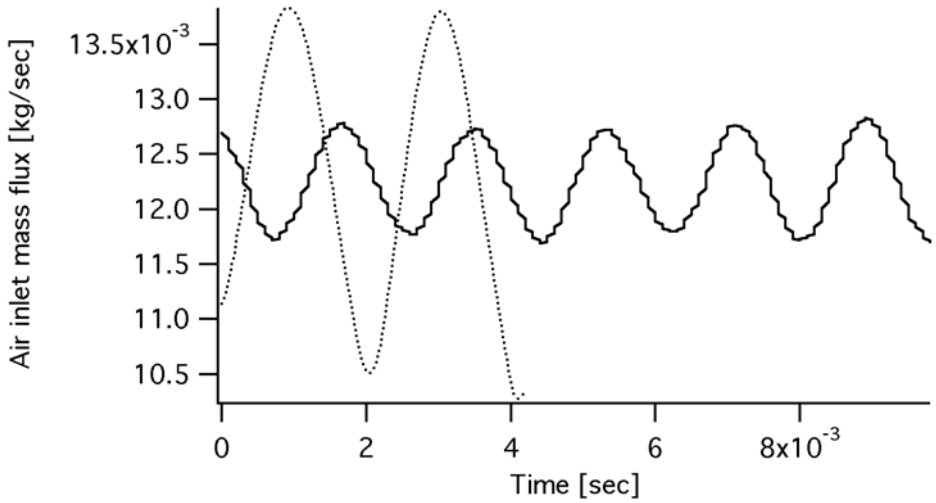


FIG. 8.27 - *Time variation of the air inlet mass flux. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

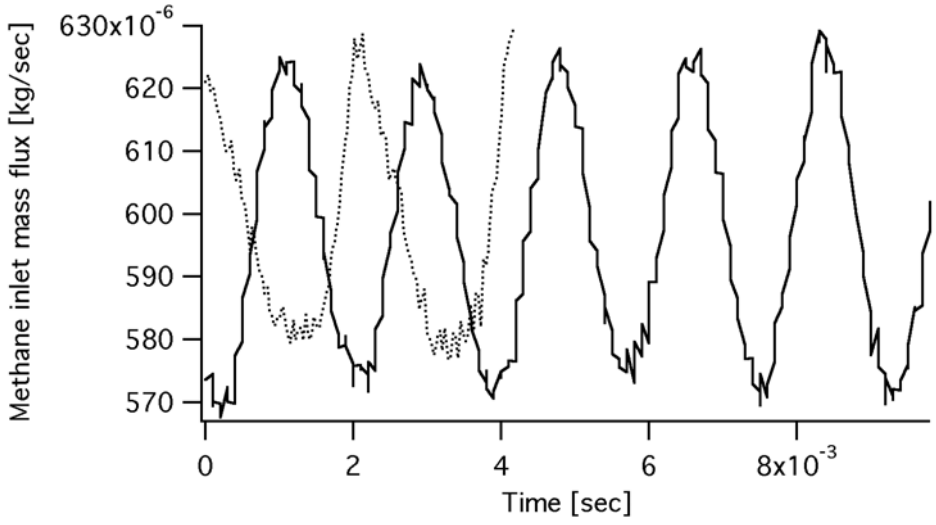


FIG. 8.28 - *Time variation of the methane inlet mass flux. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

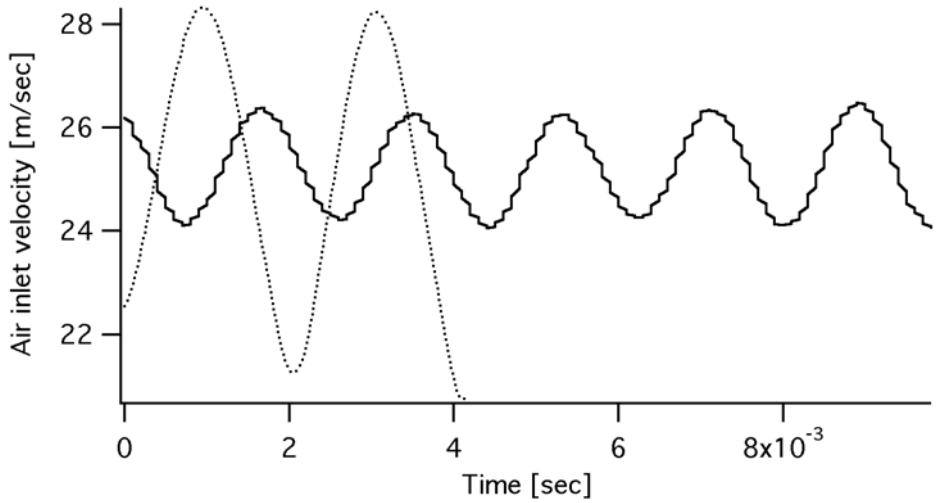


FIG. 8.29 - *Velocity probe signal for a point located on air inlet. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

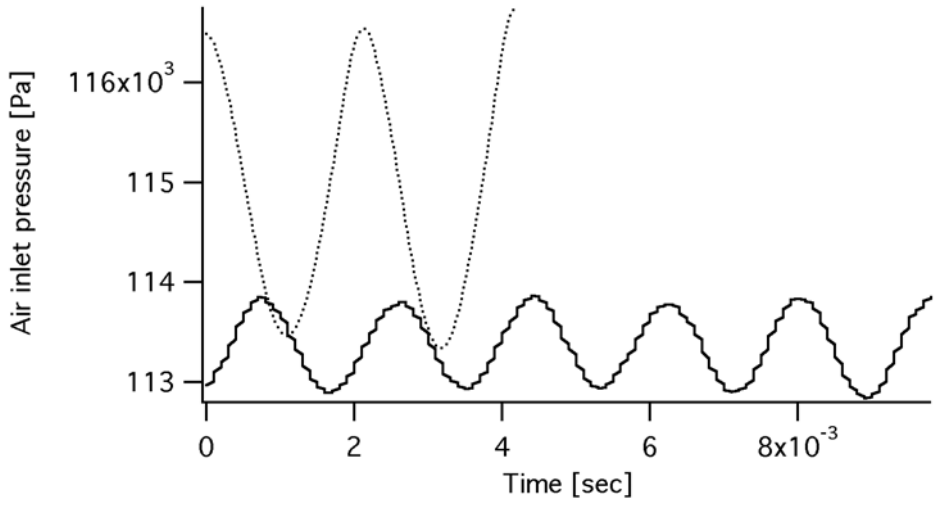


FIG. 8.30 - *Pressure probe signal for a point located on air inlet. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

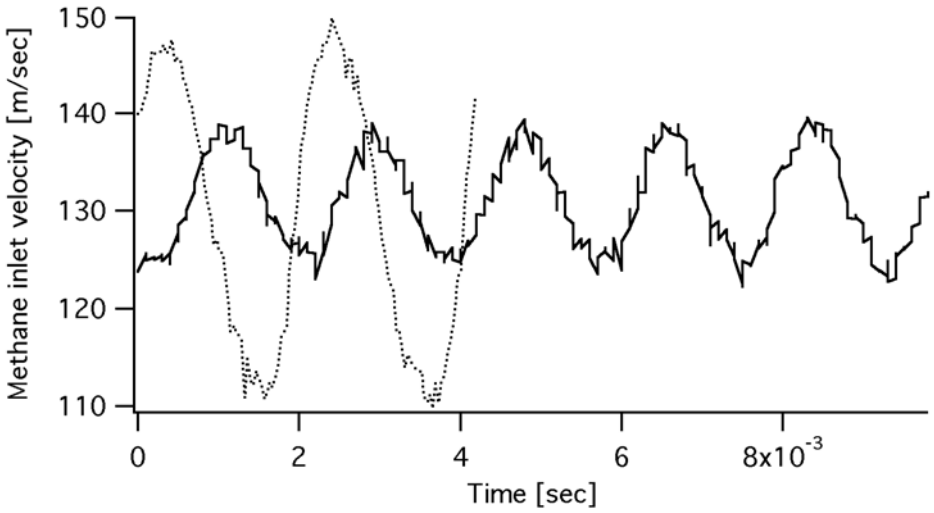


FIG. 8.31 - *Velocity probe signal for a point located on methane inlet. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

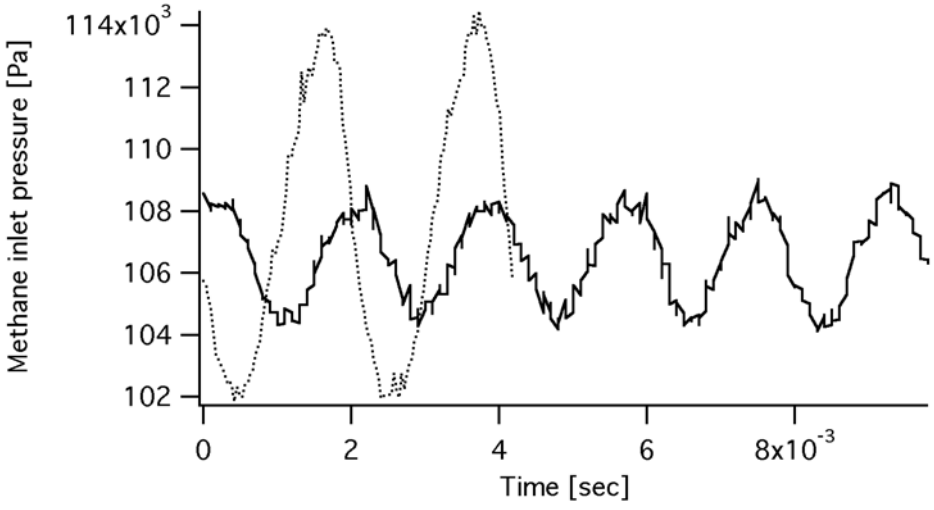


FIG. 8.32 - *Pressure probe signal for a point located on methane inlet. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

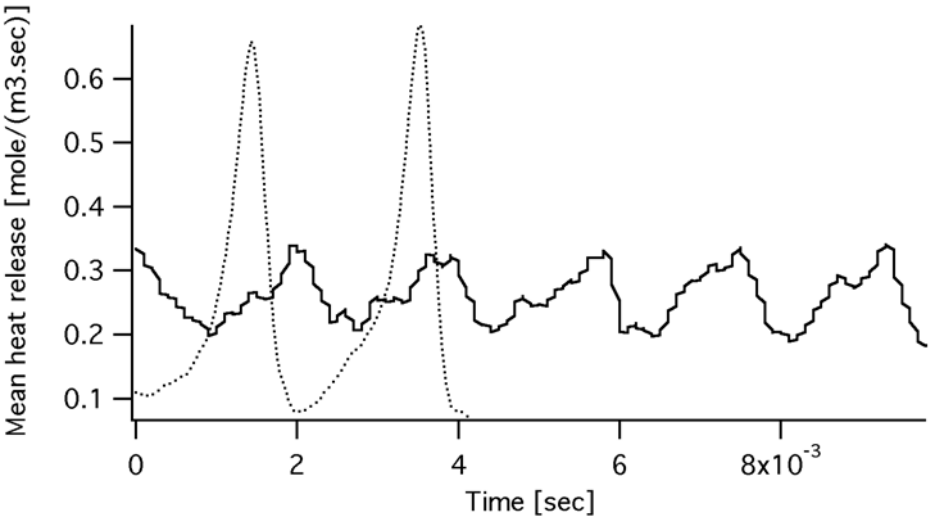


FIG. 8.33 - *Time variation of the mean heat release in the domain. (———) SOFT case; (·····) STIFF case.*

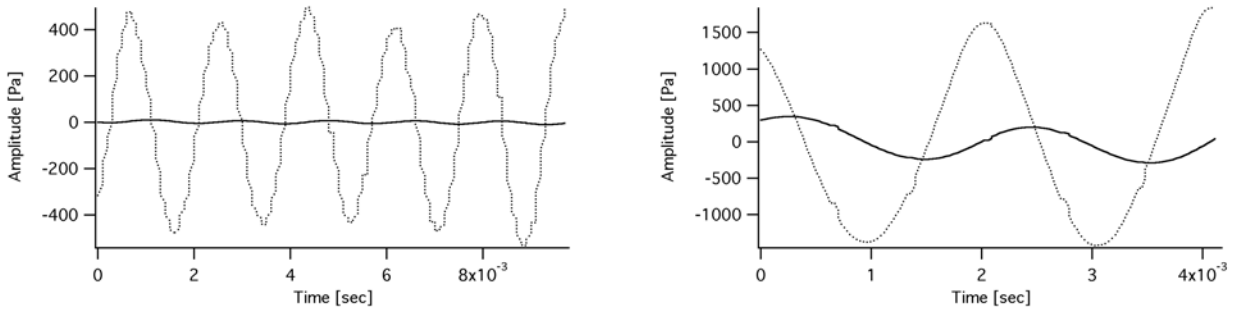


FIG. 8.34 - *Time analysis of ingoing and outgoing waves on the air inlet for the SOFT (left) and the STIFF (right) simulations. (———) ingoing wave; (·····) outgoing wave.*

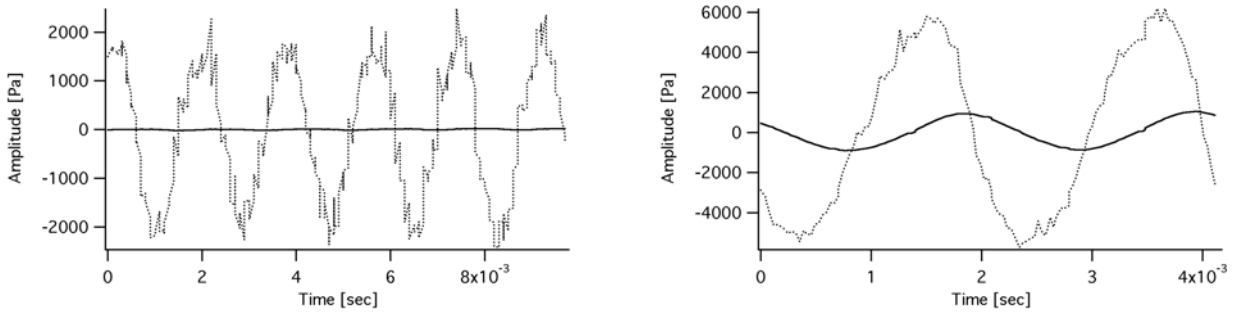


FIG. 8.35 - *Time analysis of ingoing and outgoing waves on the methane inlet for the SOFT (left) and the STIFF (right) simulations. (———) ingoing wave; (·····) outgoing wave.*

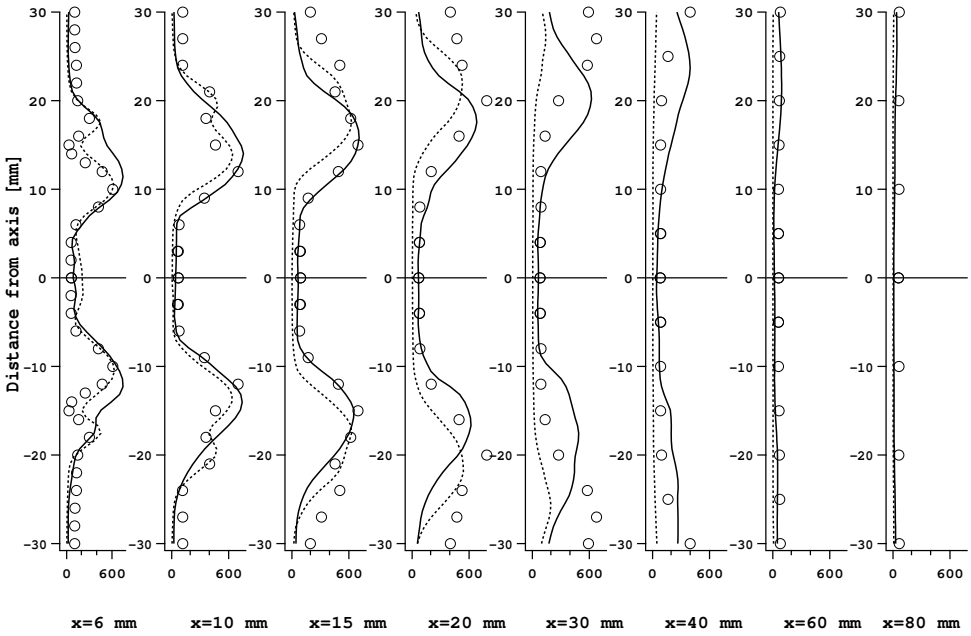


FIG. 8.36 - *RMS field of temperature for the STIFF (———) and the SOFT (·····) simulations.*

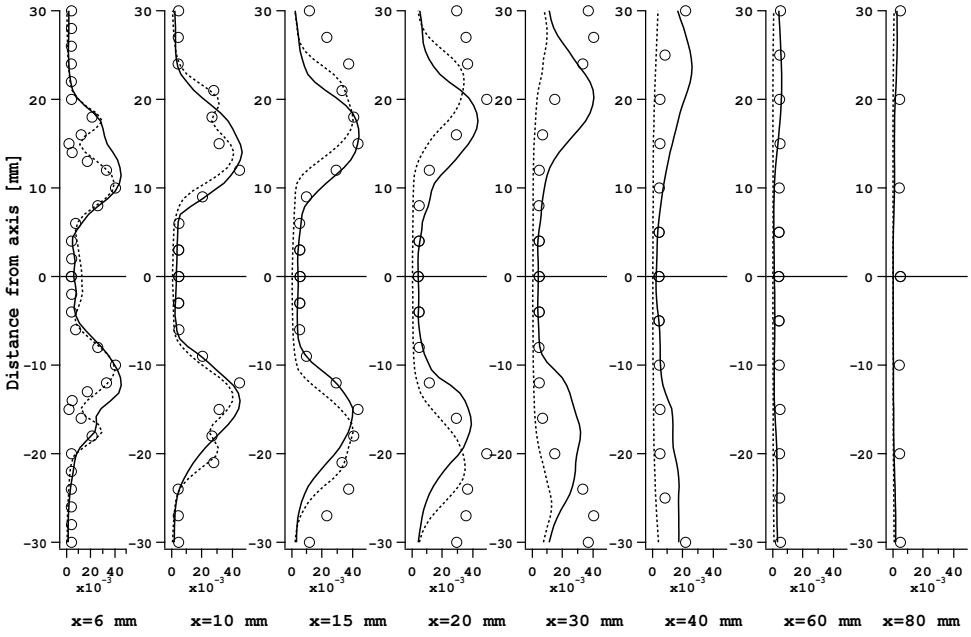


FIG. 8.37 - *RMS field of H_2O for the STIFF (———) and the SOFT (·····) simulations.*

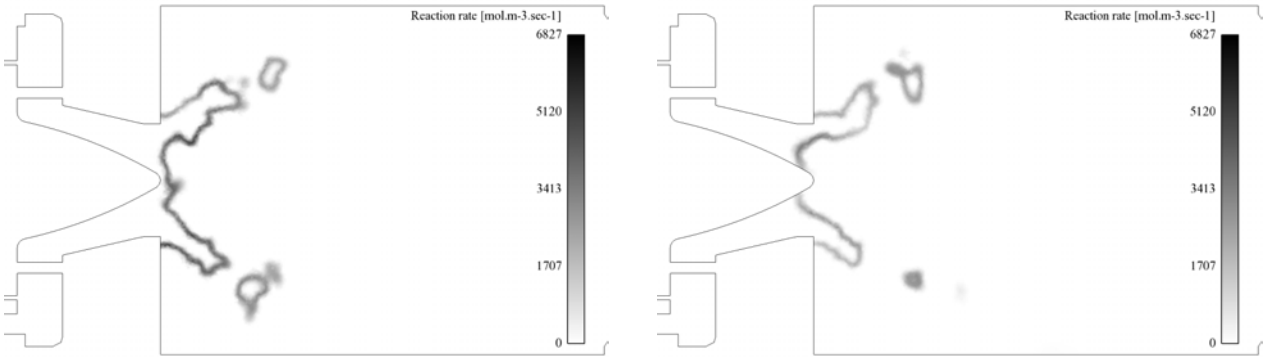


FIG. 8.38 - *Instantaneous fields of temperature corresponding to extreme (plenum side) positions of the flame for the SOFT (left) and the STIFF (right) simulations.*

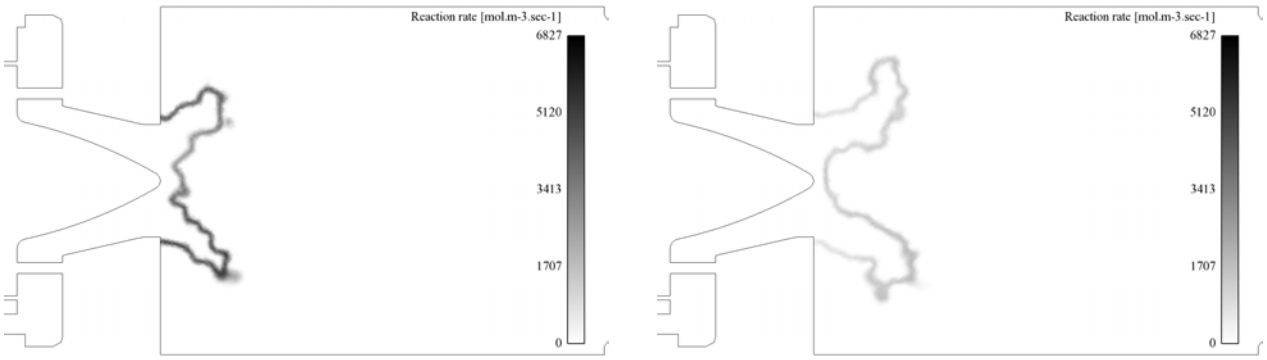


FIG. 8.39 - *Instantaneous fields of temperature corresponding to extreme (outlet side) positions of the flame for the SOFT (left) and the STIFF (right) simulations.*

8.5 Conclusion

This study has been motivated by two issues :

- the first issue was to investigate the importance of fuel injection and partial premixing on the stability of this combustor. It has been shown that LES is able to reproduce the mixing between fuel and air in a swirled injector. In the combustion chamber, scatter plots and probability density functions of mixture fraction are well reproduced by LES. Thus, it confirmed results from *Meier et al.* [88] showing that perfect premixing assumption was not valide.
- the second issue was to investigate the importance of heat losses on the structure and the stability of partially premixed flames. This is left for further work.

This study has also allowed us to exhibit the importance of acoustic boundary conditions and relaxation coefficients on the stability of this combustor. The conclusion was that the chamber started resonating as long as the air inlet and the methane inlet were not perfectly non-reflective.

Now that partial premixing has been proved, experimentally and numerically, this has to be tested on the unstable regime ($\Phi = 0.70$). LES failed to predict the unstable mode with perfect premixing assumption.

Troisième partie

Flamme turbulente non prémélangée

Table des matières

9 LES de la chambre de combustion TECFLAM **165**

9.1 The Tecflam combustion chamber 165

9.2 LES methodology for non-premixed reacting flows 170

9.3 Mesh, wall modelling and boundary conditions 170

9.4 Results 171

9.4.1 Velocity profiles 171

9.4.2 Temperature and mass fractions profiles 177

9.4.3 Combustion regime 182

9.5 Conclusions 183

Chapitre 9

LES de la chambre de combustion TECFLAM

The PRECCINSTA burner studied previously was partially premixed. In this chapter, we consider a burner exhibiting a diffusion regime to check the performences of the TFLES model. The PCM-FPI approach was not used for this configuration. This is left for further work. The main objective was the verification of the behaviour of TFLES in a diffusion flame.

9.1 The Tecflam combustion chamber

The Tecflam combustion chamber is described on the TNF workshop website [1]. The combustion chamber is fired with natural gas and experiments are performed at atmospheric pressure. Air and fuel flowrates are fixed respectively to 180 and 15 $m^3.h^{-1}$, resulting in a thermal load around 150 kW. Although it can be operated under premixed or non-premixed conditions, the present study deals only with the non-premixed case.

The plenum is the first important part of Tecflam combustion chamber (Figs 9.1 and 9.2). With a 298 mm diameter and around 53 mm height, its volume is approximately $10.30.10^{-2}\ \mathrm{m}^3$. Pure air is injected at atmospheric temperature and pressure conditions by three holes (35 mm diameter) located at the bottom of the plenum.

The air flow is swirled by 16 radial vanes (Fig. 9.3). The swirl number can be adjusted between 0.0 et 2.0 but is fixed at 0.9 in this study.

In the non-premixed version (Fig. 9.4), the swirled injector is a central bluff-body, surrounded by a 3 mm width annulus (fuel injection) , a 2 mm width wall, and a second 15 mm width annulus (swirled air injection). Methane is injected axialy and is not swirled before entering the combustion chamber.

[1] **http ://www.ca.sandia.gov/TNF/swirlflames.html**

The combustion chamber length is 1200 mm in the axial direction and has an inner diameter of $\mathrm{d_i} = 500$ mm. Its walls are cooled by a 80 C water flow (Fig. 9.5).

Experimental data shown in this study have been obtained by Laser Doppler Velocimetry (LDV) for velocity profiles [69, 70] and by Raman/Rayleigh scattering for temperature and main species mass fractions profiles [8,11–14,62,71,87] : CH_4, O_2, CO_2, H_2O, O_2, and N_2. Profiles are obtained by displacing the measurement point radially at several distances from the injector (See Figs. 9.6 and 9.7). Note that the authors also provide error margins for species measurements. For most species, these margins remain small (typically < 10 %) but can reach 50 % for CO.

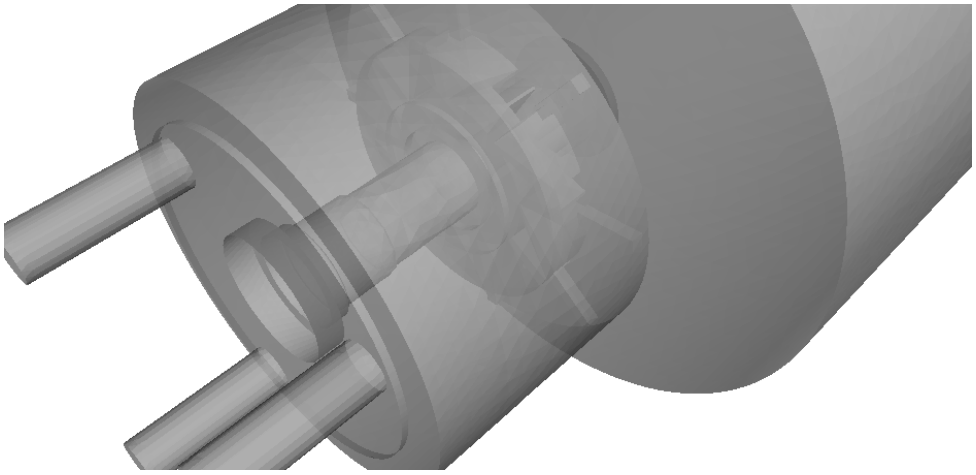


FIG. 9.1 - *Overview of the plenum.*

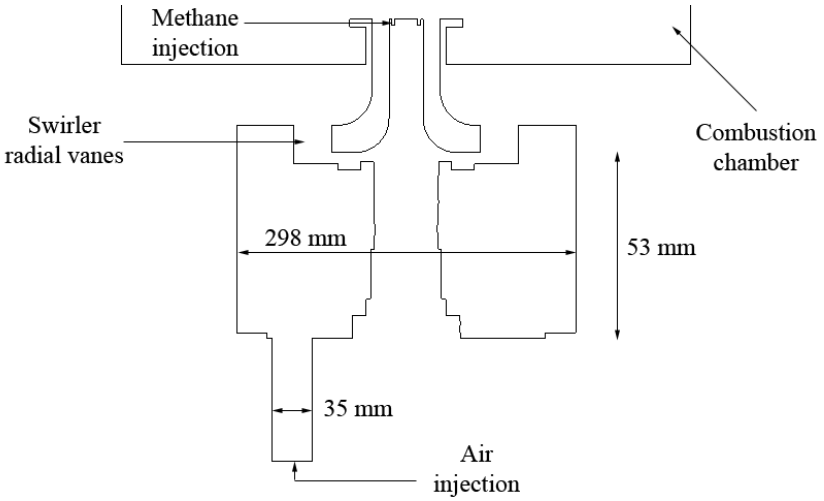


FIG. 9.2 - *Axial cut of the plenum.*

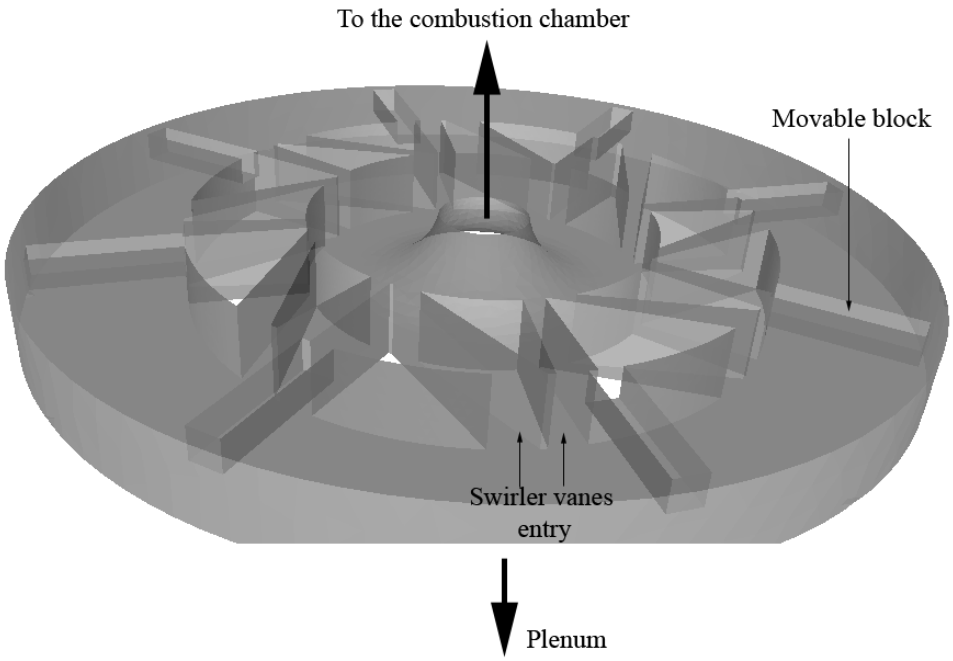
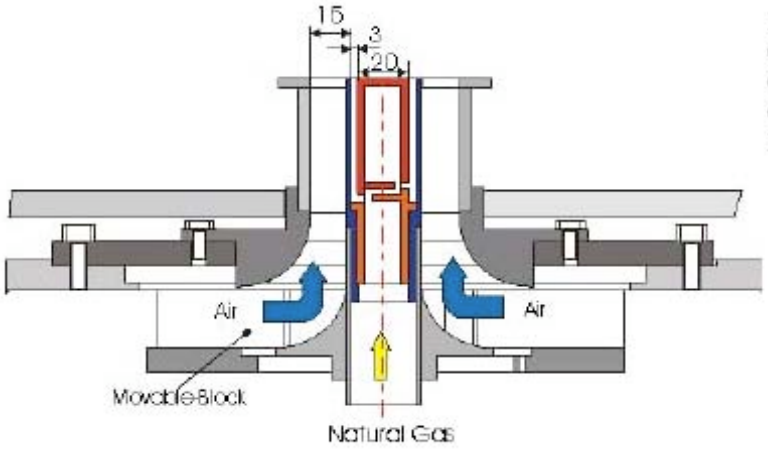


FIG. 9.3 - *Overview of the swirler.*



Fuel jet outer diameter = 26mm
Coflowing air inner diameter = 30mm
Coflowing air outer diameter = 60mm
Chamber diameter = 500mm
Mean chamber height = 1200mm

FIG. 9.4 - *Swirler and injector geometry*

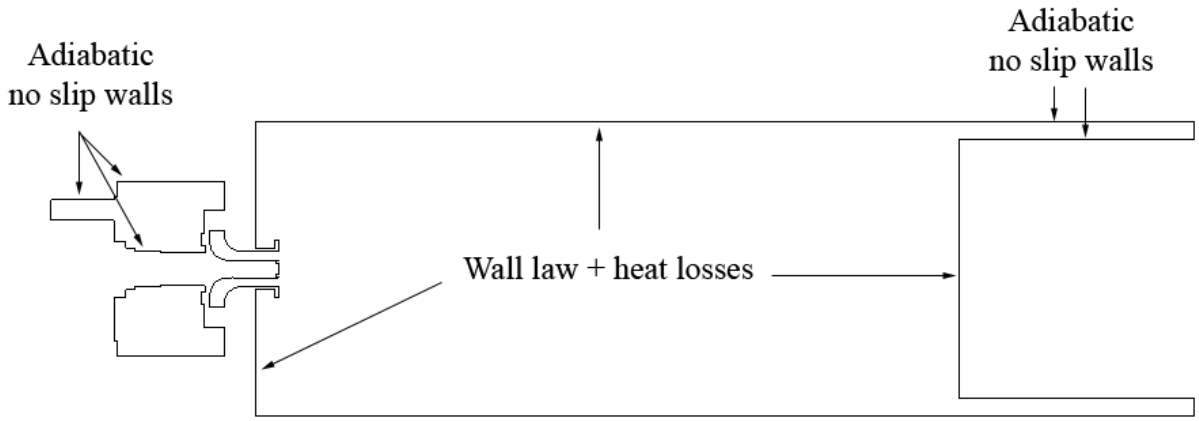


FIG. 9.5 - *Wall treatment*

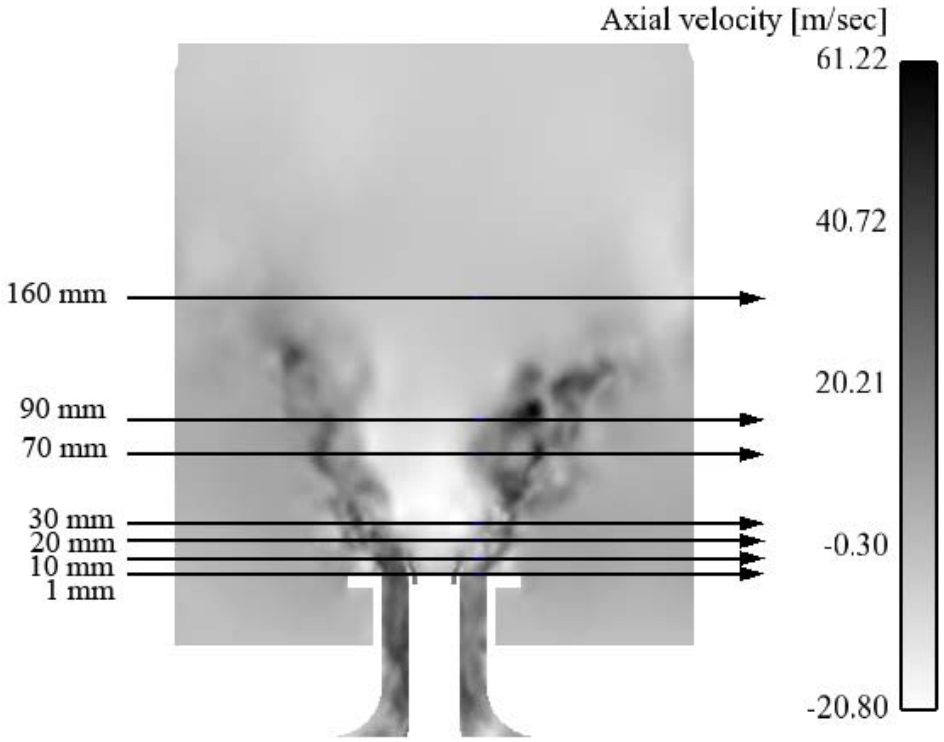


FIG. 9.6 - *Velocity profiles cutting planes.*

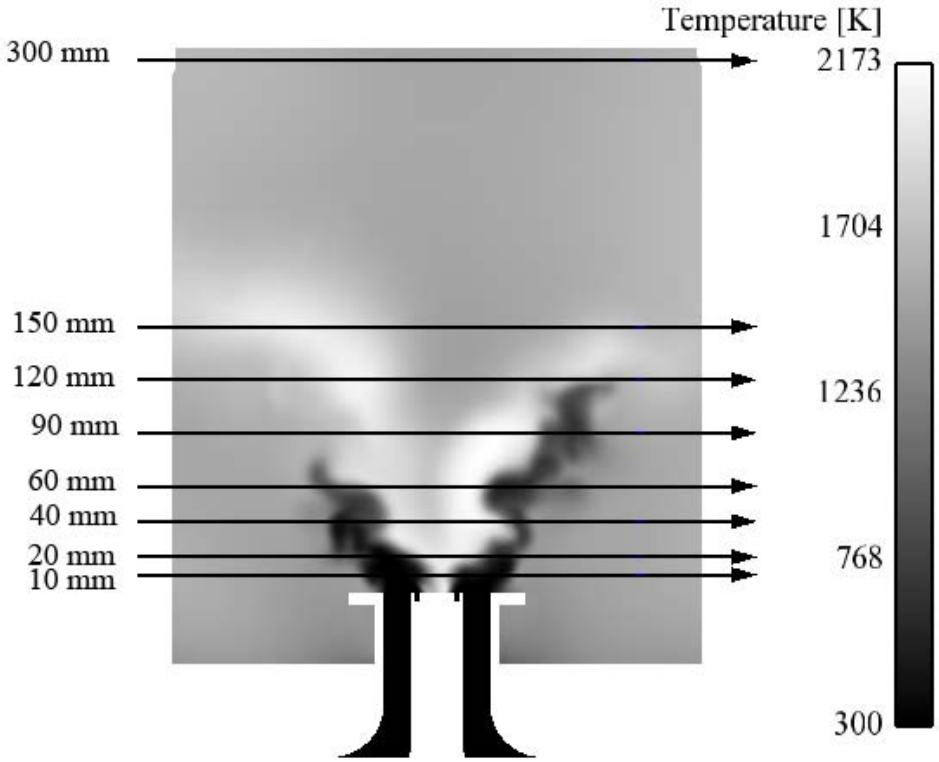


FIG. 9.7 - *Temperature and mass fractions profiles cutting planes.*

9.2 LES methodology for non-premixed reacting flows

The finite volume Lax-Wendroff [72] scheme provides second order in time with a one step Runge-Kutta integration and second order in space. The Smagorinsky model [143] is chosen to model the SGS viscosity. Chemical kinetics and flame-turbulence interaction are modeled by the two-steps reduced kinetic scheme with PEA described in section 4.3.3.2.1. The flame/turbulence interaction is modeled by the dynamically thickened flame/efficiency function model [2, 27, 74] described in section 4.1. Radiative heat losses are taken into account following the procedure detailed in section 2.8.

9.3 Mesh, wall modelling and boundary conditions

The mesh (Fig. 9.8) is fully unstructured. Its caracteristics are given in table 9.1. Three types of wall treatment are used in the computation : adiabatic no-slip walls inside the plenum and upstream of the swirler vanes, adiabatic law of the wall inside the swirler vanes, the injector, and the exhaust pipe and finally, law of the wall with heat losses inside the combution chamber.

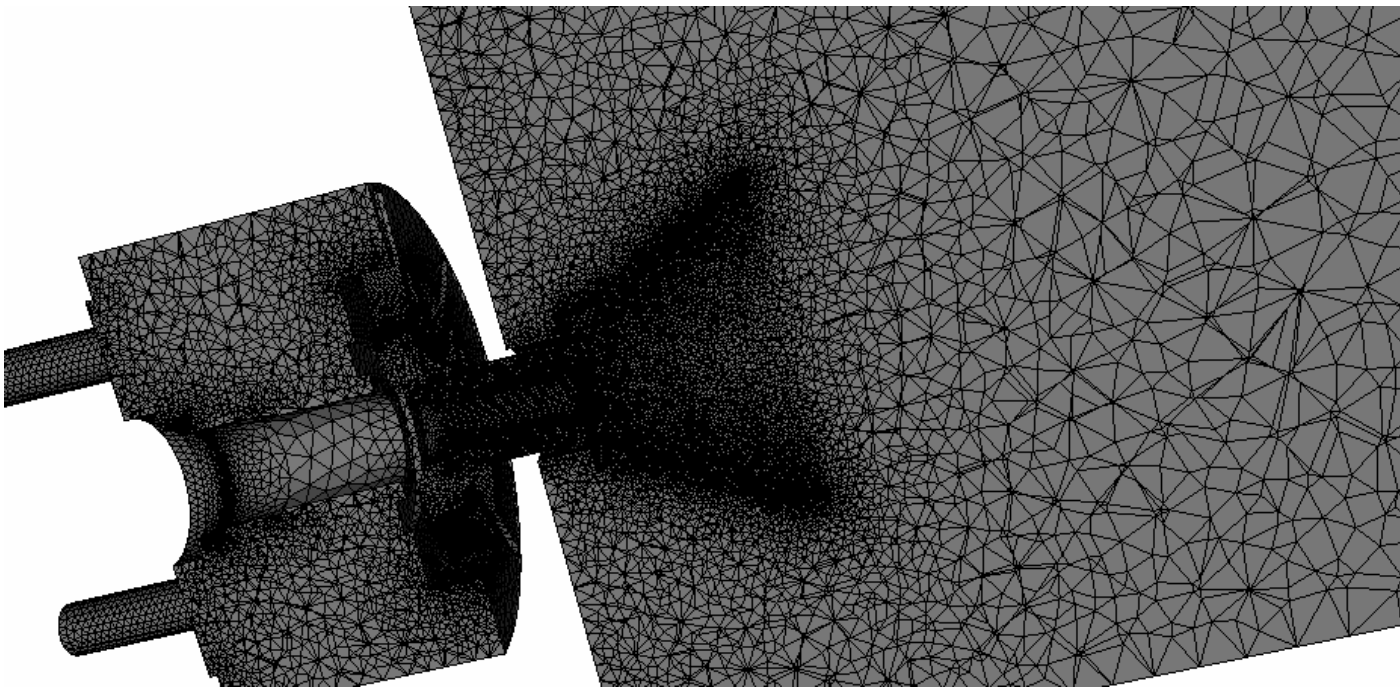


FIG. 9.8 - *Mesh overview in the plenum, the injector and the upstream part of the combustion chamber*

Heat transfer to the chamber walls is modelled using a law-of-the-wall function [133]. A heat resistance R_w is used for conduction through the walls such that the heat flux Q_w is :

$$Q_w = \frac{T_\infty - T_w}{R_w} \text{ with } R_w = \frac{d_w}{\lambda_w} \tag{9.1}$$

TAB. 9.1 - *Mesh caracteristics*

Cell number :	3 519 357
Node number :	728 753
Plenum & swirler	620 430 (18% of the total number of cells)
Flame zone	2 224 500 (63% of the total number of cells)
Outlet	677 190 (19% of the total number of cells)
Total volume of the domain :	$2,650.10^{-1}$ m^3
Smallest element volume :	$0,9818.10^{-11}$ m^3
Timestep :	$0,256.10^{-6}$ s

where d_w and λ_w are respectively the thickness and conductivity of the wall. T_∞ is the "cold" temperature seen by the wall (usually the outside air for an uncooled burner, $T_\infty = 300\ K$).

Air is injected through the bottom of the plenum by three 35 mm diameter holes. Pure methane is injected by an annulus (Fig. 9.2), whose inside and outside diameters are respectively 10 mm and 13 mm. In the experiment, the annulus length is about 40 mm (Fig. 9.4). Due to CPU cost and numerical difficulties induced by small cells, this part has been reduced to only 5 mm.

The output is an annulus, whose inside and outside diameters are respectively 220 mm and 250 mm, connected to an exhaust pipe (Fig. 9.5). A part of this pipe is represented in the computational domain. The outlet boundary treatment is characteristic and the atmospheric pressure is imposed in a non reflecting way.

9.4 Results

9.4.1 Velocity profiles

LES results are first compared to mean velocity profiles (Figs. 9.9, 9.10, 9.11), to RMS velocity profiles (Figs. 9.12, 9.13, 9.14), to mean temperature/mass fractions profiles (9.17, 9.18, 9.19, 9.20) and to RMS temperature/mass fractions profiles (9.22, 9.23).

The axial velocity field (Fig. 9.9) at injector outlet (x=1 and 10 mm) seems consistent with experimental data. Downstream, LES matches well the shape of experimental profiles. Nevertheless, the maximum axial velocity is slightly underestimated while the minimum axial velocity is overestimated.

Radial and azimuthal velocity profiles are well matched by LES (Figs. 9.10 and 9.11).

Axial, radial and azimuthal fluctuation of velocity profiles (Figs. 9.12, 9.13 and 9.14) are well matched by LES on firsts cuts, contrary to downstream ones where LES underestims RMS values. Mesh coarsening is probably a reason to the loss of results quality in the farest fields.

This hypothesis is confirmed by instantaneous thickening and efficiency fields, presented respectively

on Figs. 9.15 and 9.16. These figures also display an isoline of reaction rate showing where the most intense combustion takes place. They show that the thickening factor is large in the far field due to the lower mesh resolution. Nevertheless, they show that values of the thickening and efficiency functions remain small in the flame zone (less than 10 to 20 for thickening and less than 6 for efficiency).

The flame is always slightly lifted and no combustion takes place at the injector lips. The zone where thickening is applied remains limited around the reaction zone and the rest of the flow, especially the places where turbulent diffusion takes place, are not affected by the thickening.

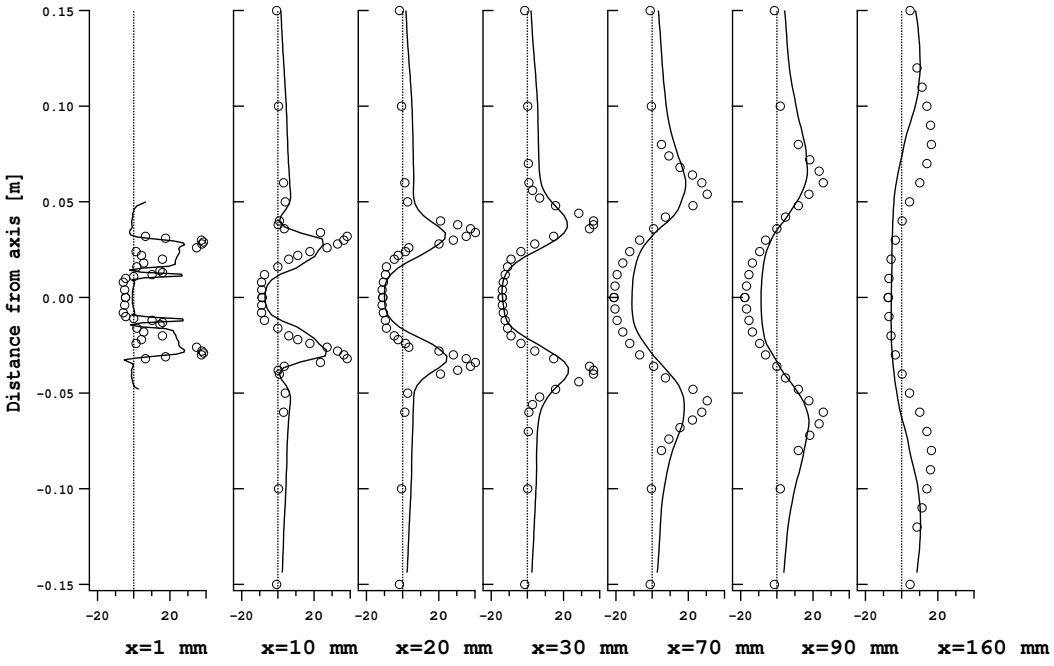


FIG. 9.9 - *Averaged axial velocity profiles. (○) Raman; (———) LES.*

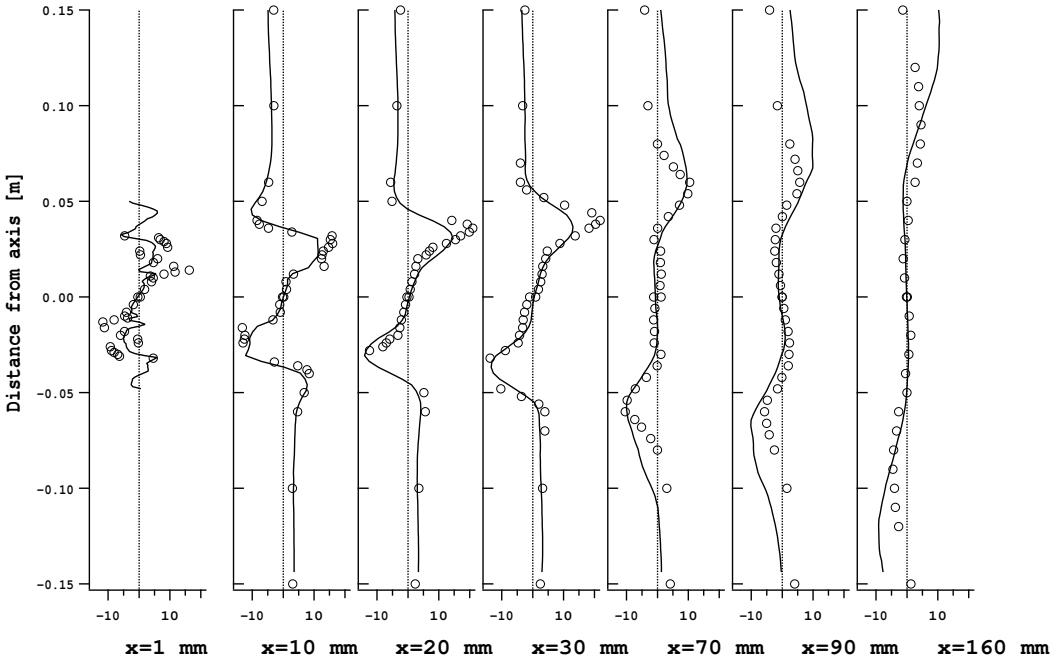


FIG. 9.10 - *Averaged radial velocity profiles. (○) Raman; (———) LES.*

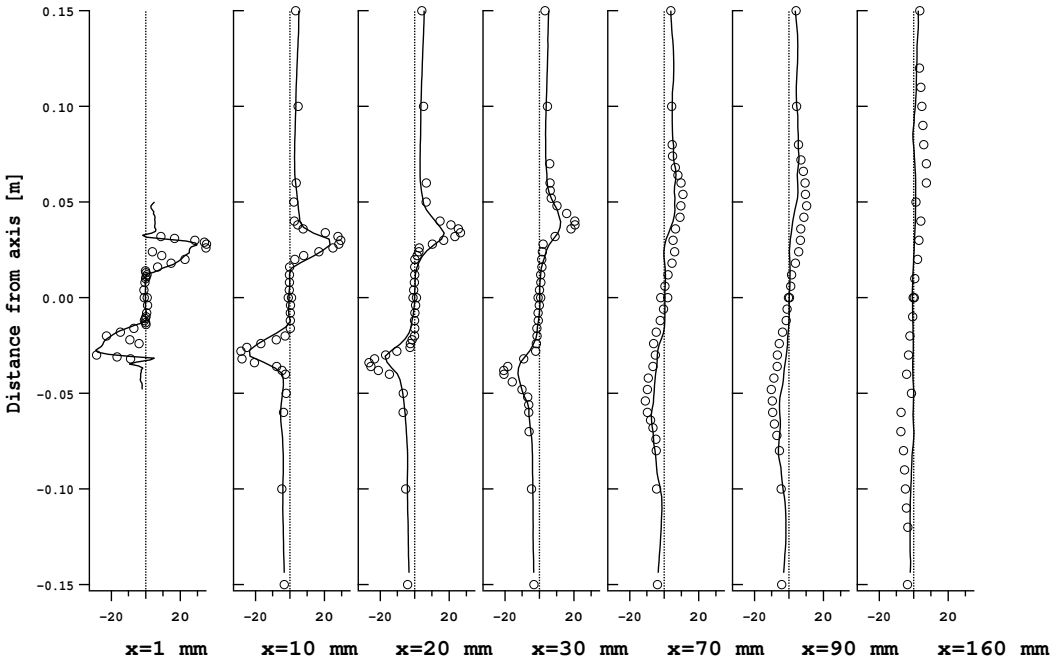


FIG. 9.11 - *Averaged azimuthal velocity profiles. (○) Raman; (———) LES.*

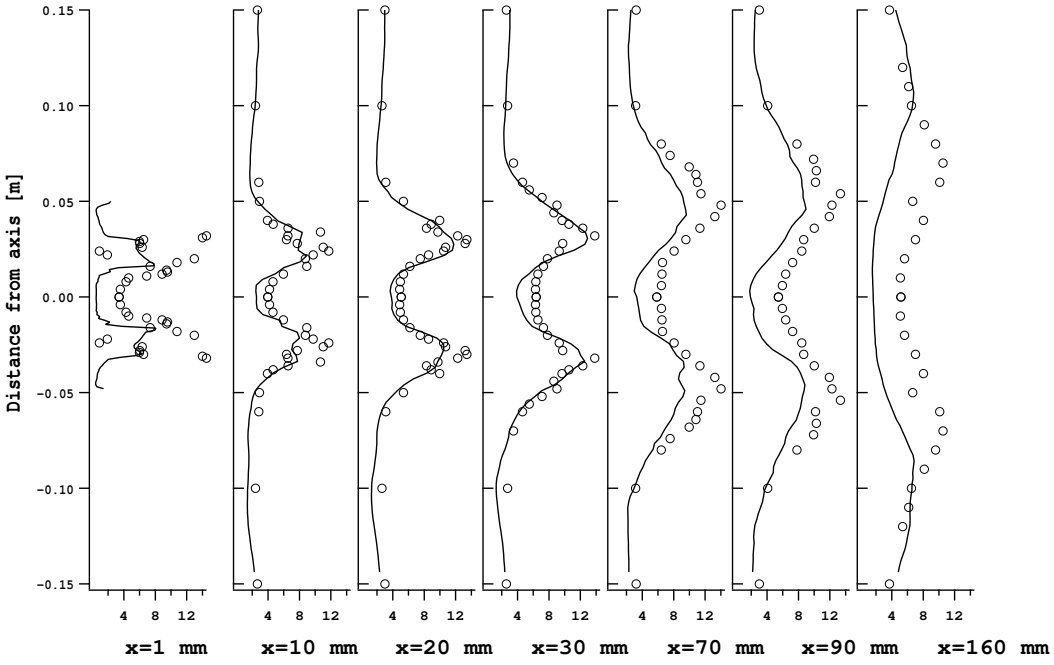


FIG. 9.12 - *Fluctuation of axial velocity profiles. (○) Raman; (———) LES.*

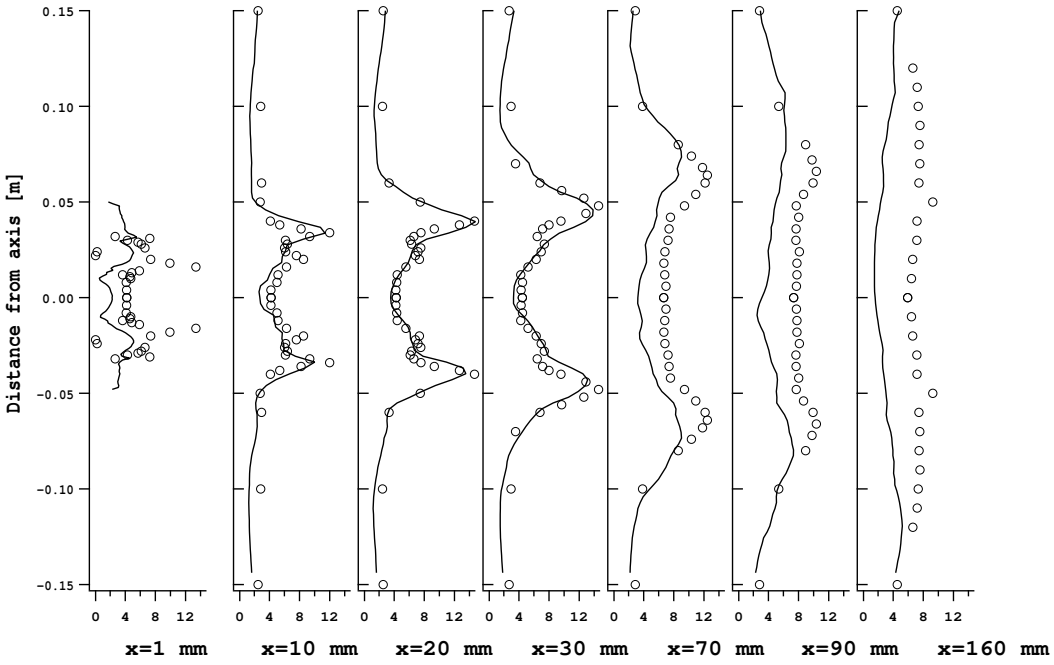


FIG. 9.13 - *Fluctuation of radial velocity profiles. (○) Raman; (———) LES.*

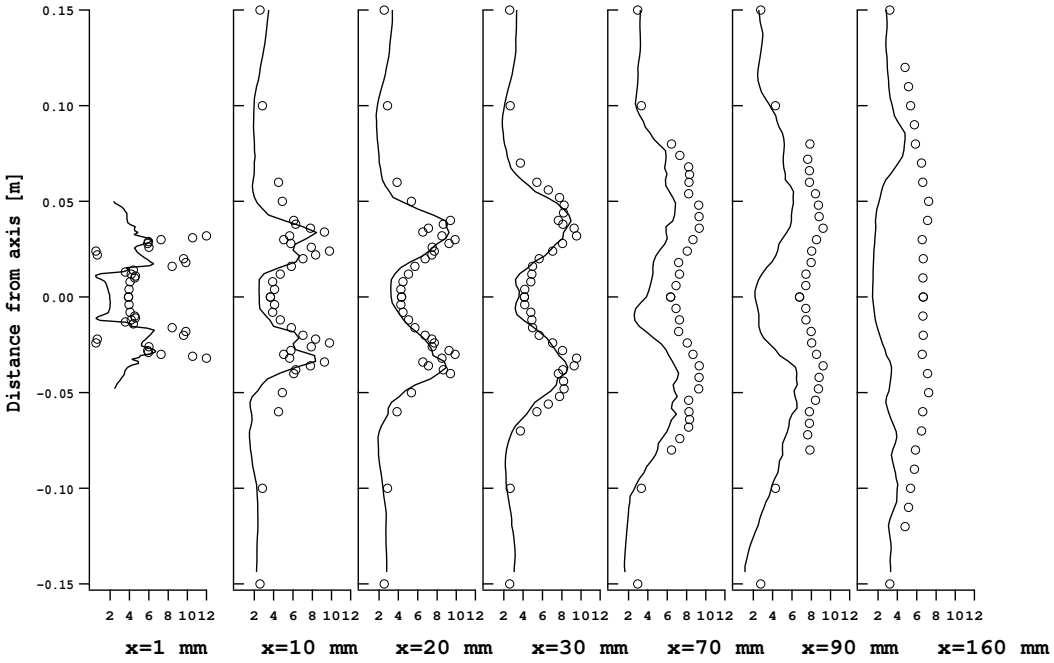


FIG. 9.14 - *Fluctuation of azimuthal velocity profiles. (○) Raman; (———) LES.*

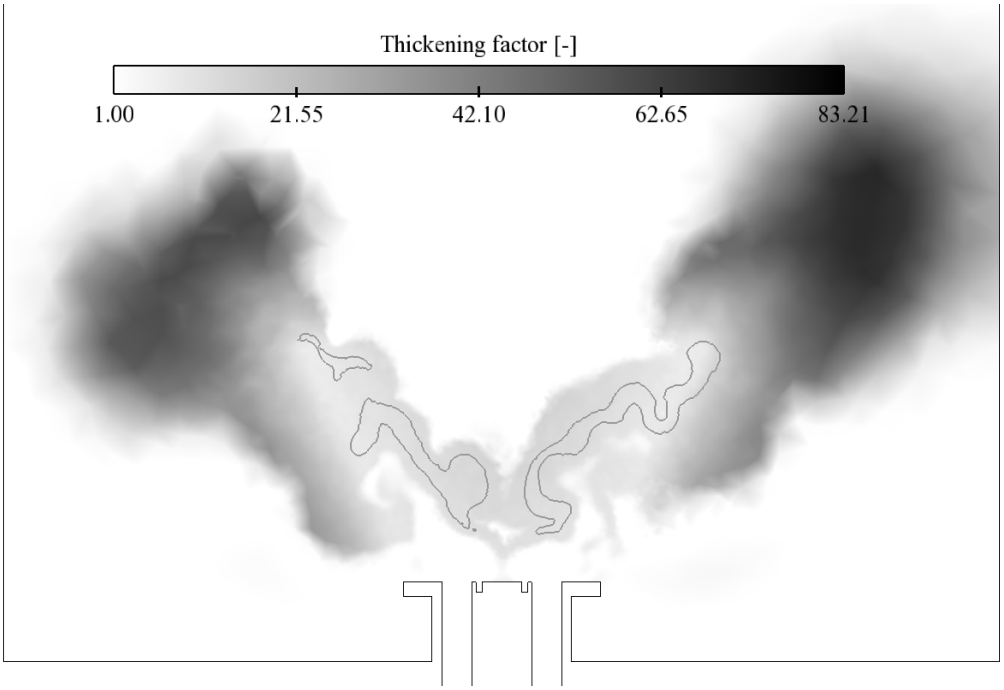


FIG. 9.15 - *Instantaneous field of thickening factor and isoline of reaction rate (100 $mol.m^{-3}.sec^{-1}$).*

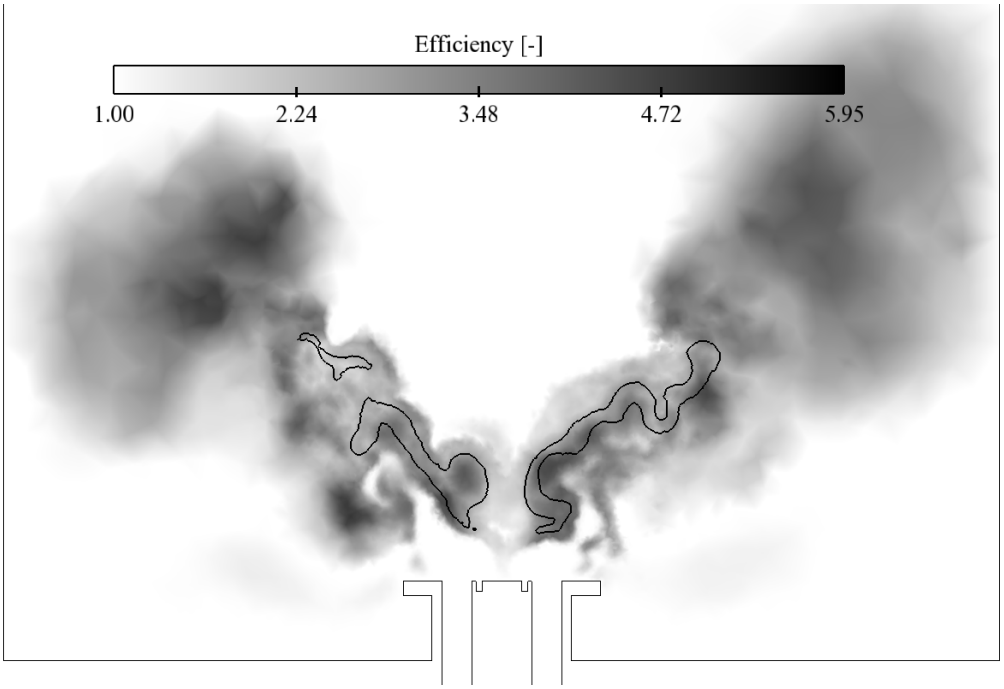


FIG. 9.16 - *Instantaneous field of efficiency function and isoline of reaction rate (100* $mol.m^{-3}.sec^{-1}$*).*

9.4.2 Temperature and mass fractions profiles

The temperature profile (Figs. 9.17 and C.3) is well predicted by LES close to the swirler (x $<$ 20 mm) sugggesting that the flame stabilization is well predicted. The outer recirculation zone seems slightly too hot, probably indicating that the distribution of heat losses through walls of the combustion chamber must be improved. Downstream, temperature profiles show larger differences with experimental ones.

Fig. C.3 represents averaged LES (left) and experimental (right) temperature fields. It confirms previous observations, that is to say a correct prediction of temperature in the flame zone, near the injector exit but more difficulties in the far field.

Profiles of main combustion products mass fractions (CO_2 and H_2O, respectively on Figs. 9.18 and 9.19) are well described by LES on firsts fields. Although fields located between 60 mm and 120 suffered inaccuracies, outlet gas composition corresponds to experimental values.

Fluctuation profiles of main combustion products (CO_2 and H_2O, respectively on Figs. 9.22 and 9.23) obtained by LES respect quite well the experimental profiles on the firsts profiles, but show more difficulties in the far field, where the coarsening of the mesh is again likely involved.

CO mass fractions (Fig. 9.20) is largely underestimated by LES with the reduced two-steps kinetic scheme. Although the second reaction gives the correct equilibrium between CO and CO_2 in burnt gases, it underestimates CO mass fractions in the flame zone as confirmed by the CO profiles in a laminar flamelet (Fig. 9.21).

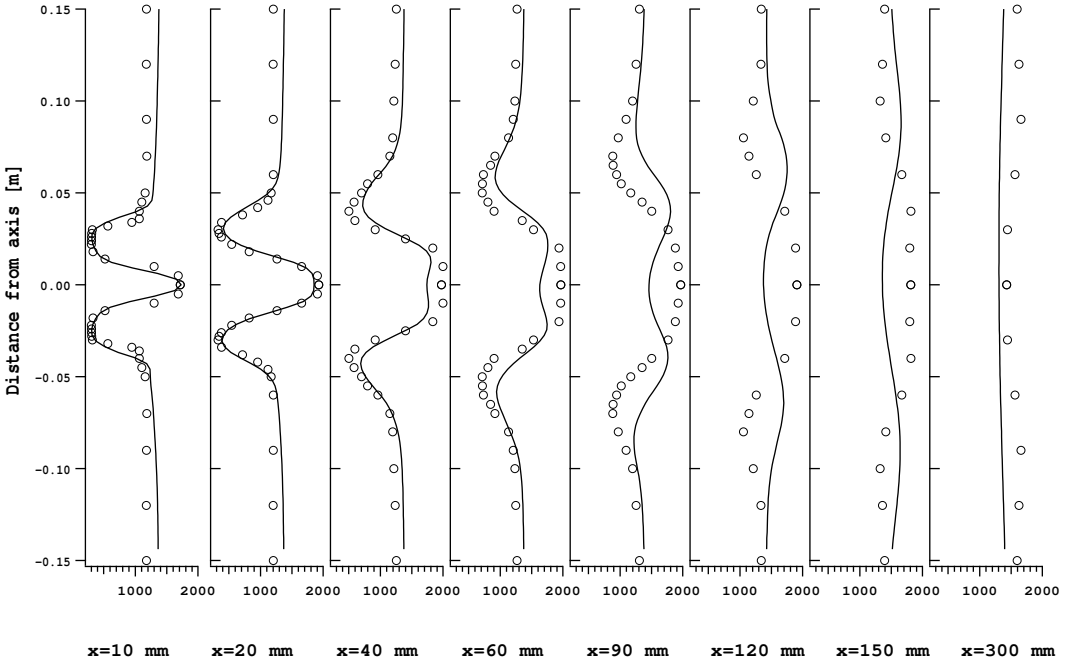


FIG. 9.17 - *Averaged temperature profiles. (○) LDV; (———) LES.*

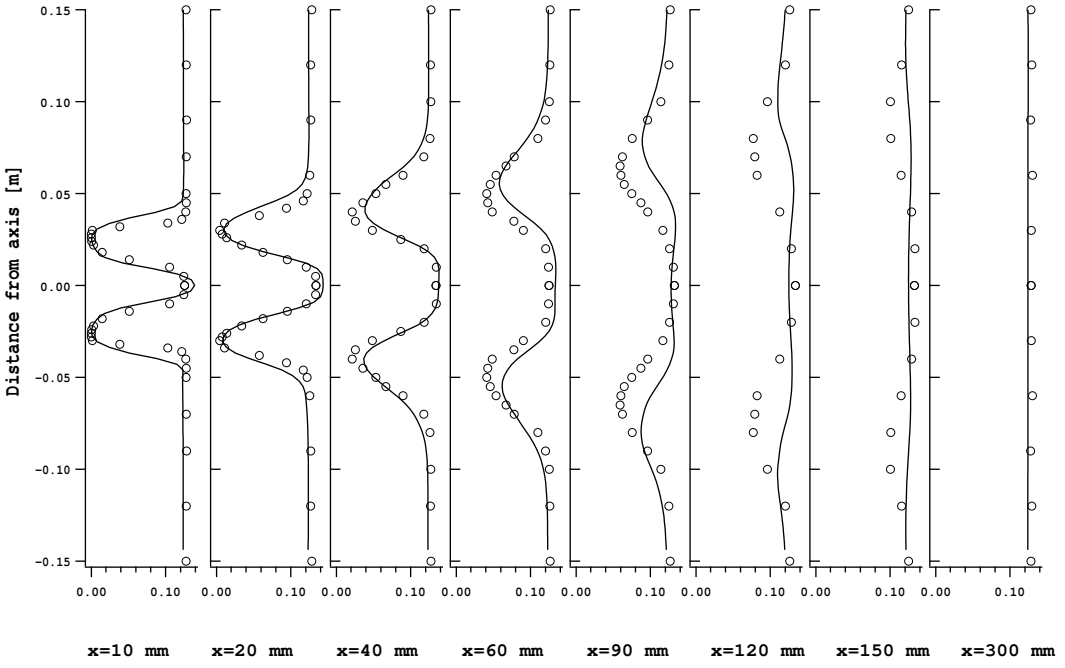


FIG. 9.18 - *Averaged CO_2 mass fractions profiles. (○) LDV; (———) LES.*

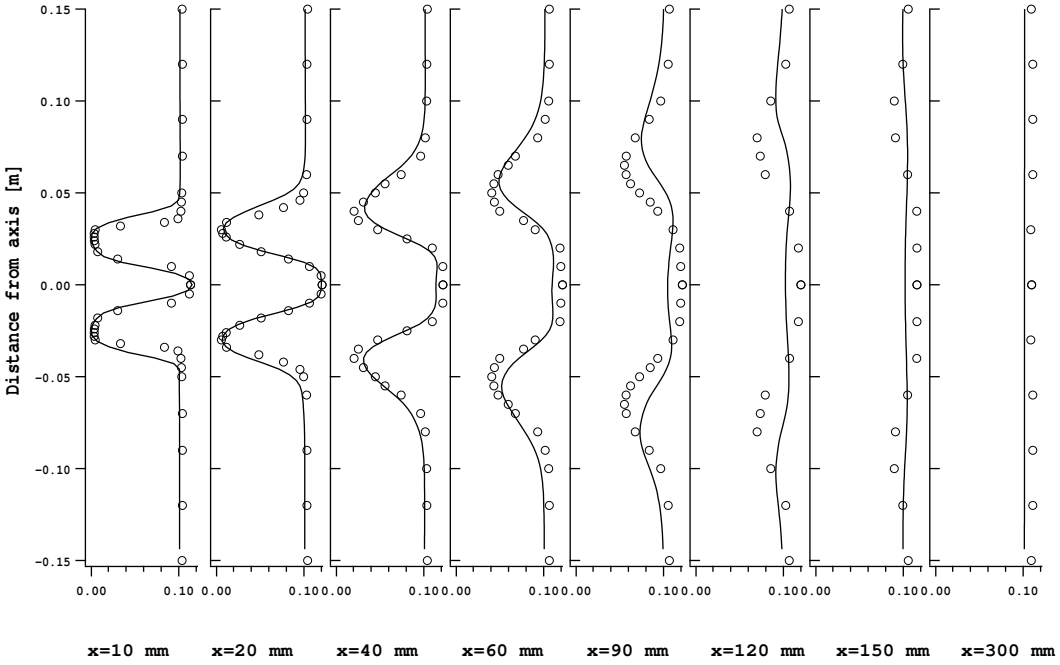


FIG. 9.19 - *Averaged H_2O mass fractions profiles. (○) LDV; (———) LES.*

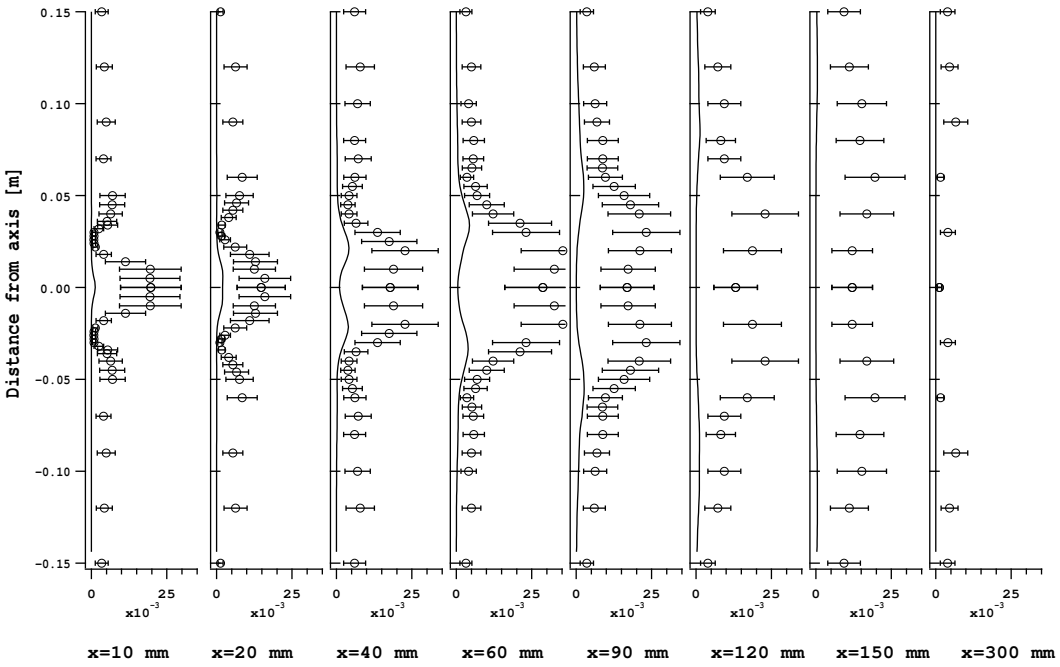


FIG. 9.20 - *Averaged CO mass fractions profiles with experimental error bars. (○) LDV; (———) LES.*

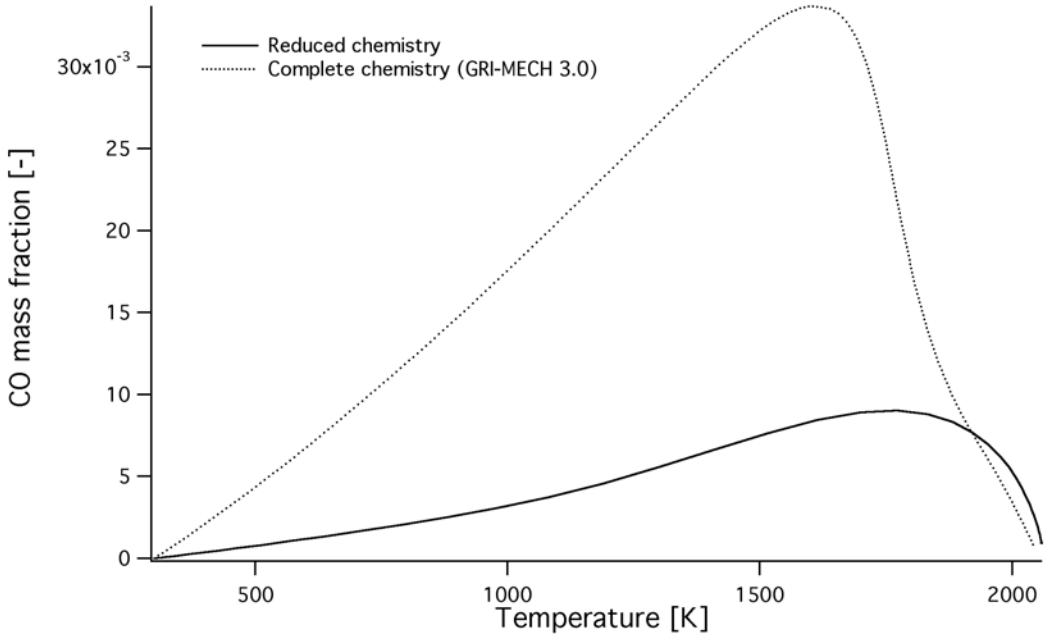


FIG. 9.21 - *CO mass fractions as a function of temperature for complete (⋯⋯) and reduced (———) chemistry.*

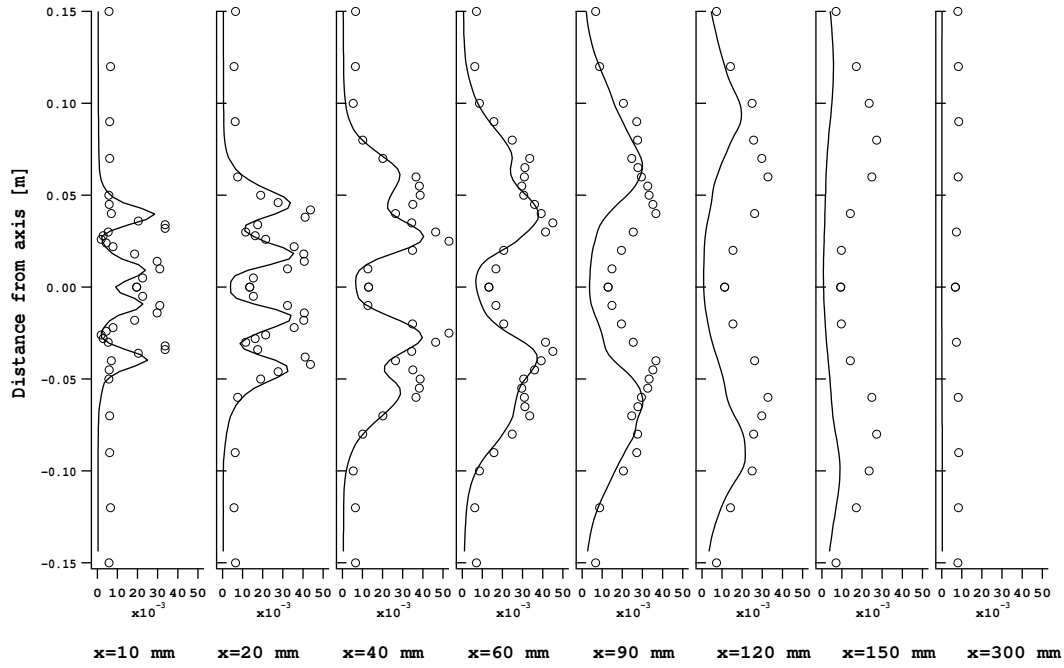


FIG. 9.22 - *RMS CO_2 mass fractions profiles. (○) LDV; (———) LES.*

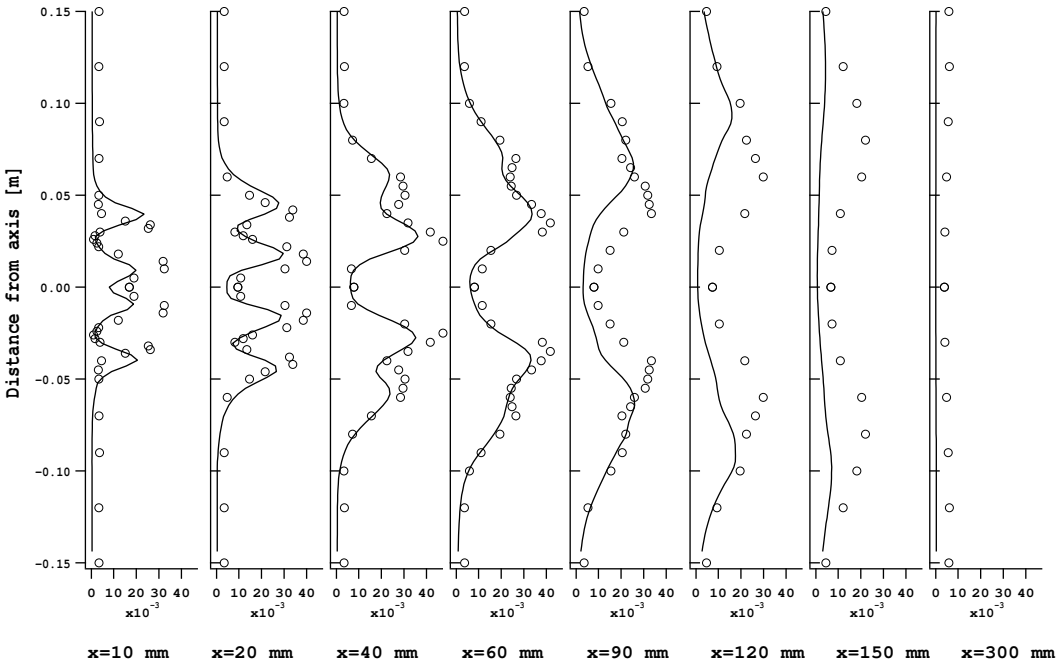


FIG. 9.23 - *RMS H_2O mass fractions profiles. (○) LDV; (———) LES.*

9.4.3 Combustion regime

Fig. 9.24 is a scatter plot of reaction rates as a function of mixture fraction and Fig. 9.25 is an histogram of reacting points as a function of mixture fraction on 40 instantaneous fields. Combustion occurs for Z values greater than 0.035 and lower than 0.075, justifying the use of the PEA chemistry. The main reaction zone is included between the pure mixing and the stoechiometric line, meaning that partial premixing is the main combustion mode for this regime.

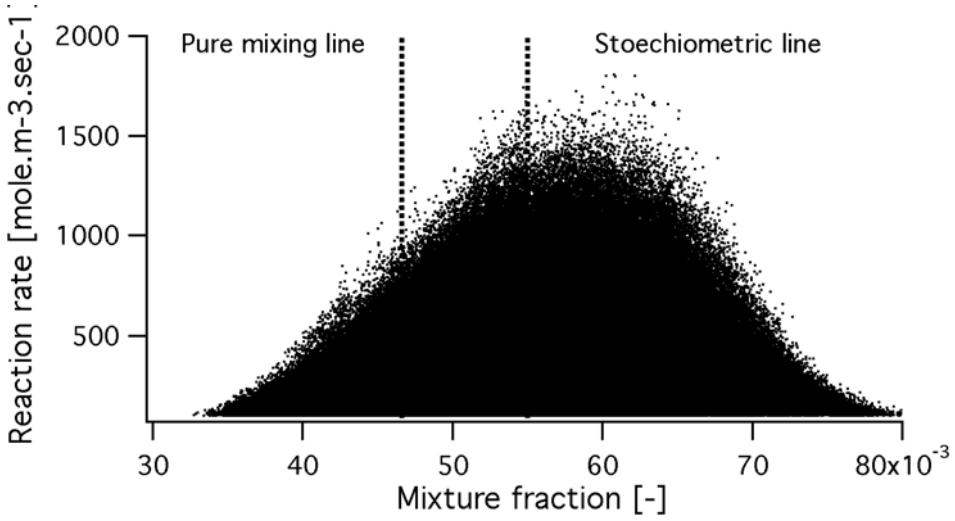


FIG. 9.24 - *Scatter plot of reaction rate as a function of mixture fraction on 45 instantaneous flow fields.*

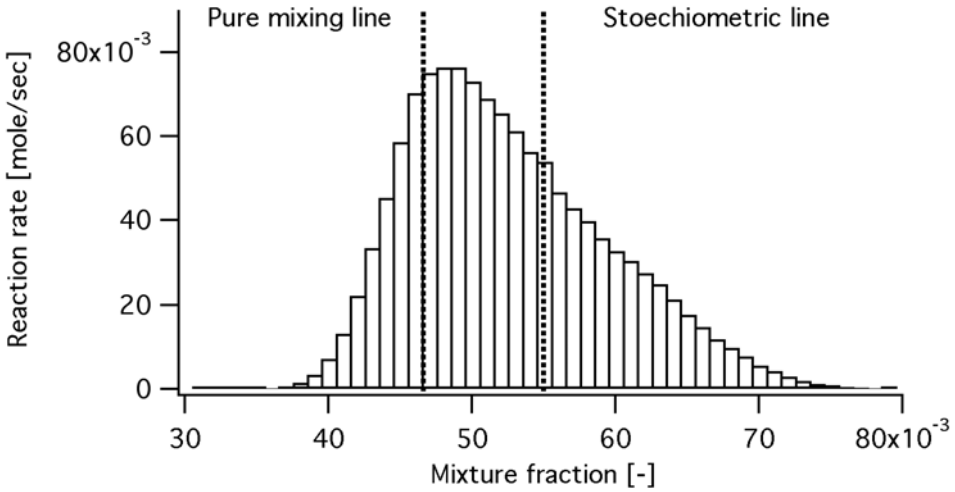


FIG. 9.25 - *Histogram of reaction rate as a function of mixture fraction on 45 instantaneous flow fields.*

Experimental results of Fig. C.4 confirm partially this hypothesis. Indeed, temperature is never grea-

ter than 2200 K on the presented instantaneous field and never greater than 2000 K on the averaged field. Equilibrium temperature of the stoechiometric methane/air mixture is of the order of 2232 K. This indicates that most of the combustion occurs for equivalence ratios lower than 1.0, that is to say in a partial premixing regime.

This a confirmed again by instantaneous fields (Fig. 9.26) showing that the reaction rate is not systematically, and never integrally, located on the stoechometric line.

Although the geometry corresponds to a diffusion flame, LES results show that combustion never occurs in pure diffusion regime. Some diffusion zones can be found but most of the time, fuel and air are partially premixed before entering the flame zone.

Instantaneous reaction rate field analysis do not seem to show triple flame structures as described in [80]. The obvious conclusion here is that TECFLAM, even though it is designed as a diffusion burner, actually burns in a partially premixed mode. Since most gas turbine burners operate in similar conditions, this is good news for the TFLES model. At the same time, it also means that another truly diffusion type burner will be needed in the future to evaluate TFLES in a diffusion regime.

9.5 Conclusions

The results show that the dynamically thickened flame model (DTFLES) is capable of achieving very encouraging results on a turbulent non premixed burner, but also that this burner is actually operating as a partially premixed system. The mixing between two concentric jets and the resulting flame, mainly partially premixed and sometimes diffusion, is well described.

Nevertheless, a few things must be improved :

- All profiles (averaged and RMS) show differences with experimental results in the downstream profiles. This could be improved with a better order numerical scheme, a finer mesh or a better combustion model.
- The outer recirculation zone is too hot, meaning that heat losses at wall are not exactly well distributed.
- CO mass fractions are largely underestimated by LES with this reduced chemistry. Tabulated complex chemistry could be a solution and could also allow to compare LES and experiments on NO, OH, and CH_2O fields.These species are difficult to include in a reduced kinetic scheme and FPI model is a good method to predict them. This is left for further work.

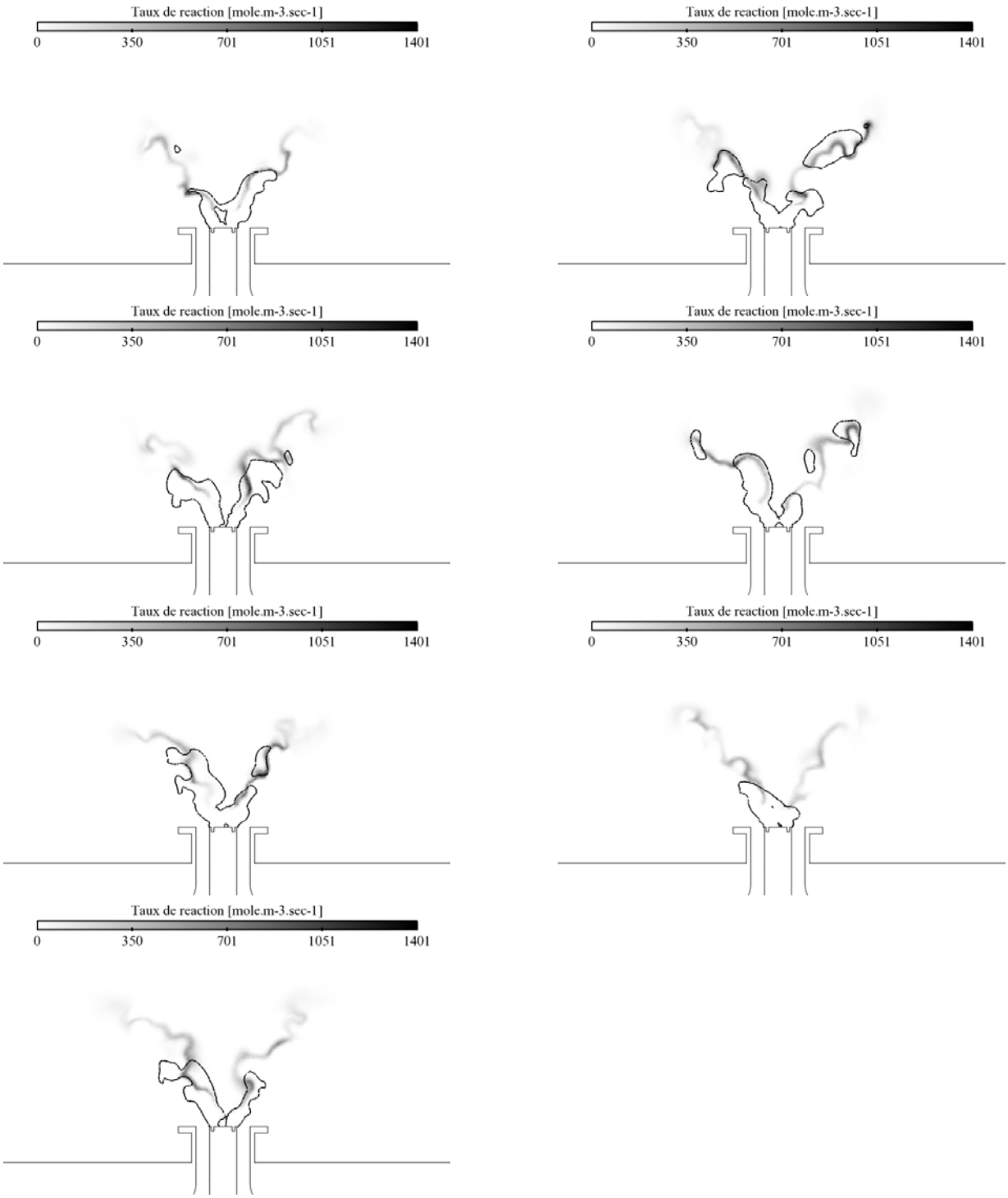


FIG. 9.26 - *Reaction rates instantaneous fields and isoline of stoechiometric mixture fraction* $z_{st} = 0,055$.

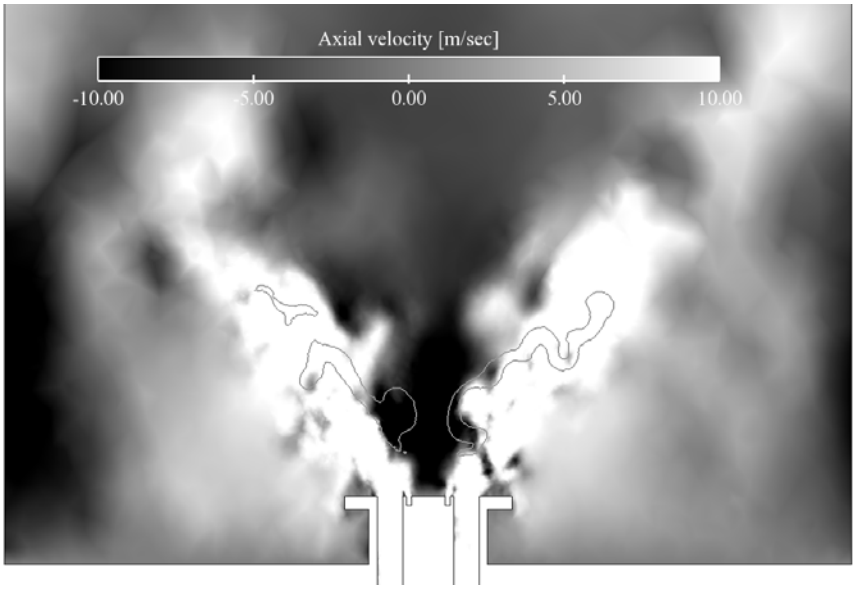


FIG. 9.27 - *Instantaneous snapshot of (saturated) axial velocity and iso-contour of reaction rate*

Conclusion

Chapitre 10

Conclusion

Cette étude a été l'occasion d'éprouver en général les capacités de la LES sur des flammes turbulentes partiellement et non prémélangées. Les analyses ne se sont pas limitées aux champs de vitesses habituels mais ont été poussées jusqu'à l'étude des champs de fractions massiques moyens et RMS.

En détail, différents modèles de combustion turbulente ont été testés, sous leur forme d'origine dans un premier temps, puis en faisant varier certains de leur paramètres dans un second temps.

- Sur les champs de vitesse moyens et RMS, des modélisations de la cinétique chimique turbulente très différentes comme PCM-FPI et TFLES-schémas réduits montrent des résultats très proches et en bon accord avec les résultats expérimentaux.
- Bien que la cinétique chimique réduite soit capable de donner les bons niveaux de fraction massique de CO en sortie de chambre de combustion, il y a un net avantage à la chimie complexe à l'intérieur de la chambre de combustion sur la fractions massique de CO. Les modèles de combustion turbulente PCM et TFLES, pour un même shéma cinétique réduit, sont très proches l'un de l'autre. Malgré tout, la flamme semble plus large dans le cas PCM que dans le cas TFLES.
- Il est inutile de raffiner les tables PCM-FPI au delà d'un certain nombre de points, dépendant en particulier de la chimie considérée. Dans le cas de la combustion méthane-air, 145 points sont suffisants pour discrétiser la flamme monodimensionnelle.
- La variation de la constante de dissipation scalaire a peu d'effet sur les températures et fractions massiques.
- La tabulation fractions massiques permet d'obtenir de bien meilleurs résultats que la tabulation des taux de réactions, en particulier pour la prédiction de CO.
- Les fonctions d'efficacité de *Colin* et de *Charlette* sont très différentes sur les cas étudiés. Les champs de fonction d'efficacité de *Charlette* sont systématiquement saturés dans les zones d'intérêt (zones réactives), supposant l'inutilité, **sur ce cas**, d'une fonction complexe. Une étude similaire doit être menée sur d'autres configurations turbulentes afin de statuer définitivement.

Puis, la LES a montré ces capacités à modéliser le mélange entre un oxydant et un carburant dans deux configurations turbulentes différentes, et les flammes qui en découlent. Les résultats, correspondant pour leur grande majorité aux résultats expérimentaux sont encourageants. Ils montrent en particulier

qu'avec une chimie réduite à deux étapes et uniquement 6 espèces (voire même une étape unique et 5 espèces), associé au modèle dynamique de combustion turbulente TFLES, la LES est capable de prédire avec une très bonne précision les fractions massiques des espèces majoritaires dans la flamme et en sortie de chambre de combustion. Avec l'utilisation d'un schéma à deux étapes incluant l'équilibre CO-CO2, il est même possible de prédire les fractions massiques de CO dans l'intégralité de la chambre de combustion. Cette conclusion, obtenue dans le cas de Preccinsta, n'a pas pu être confirmée sur Tecflam suggérant qu'elle n'est peut-être pas générale.

Par ailleurs, cette étude a permis de montrer que l'inclusion de pertes thermiques était nécessaire pour obtenir la bonne dynamique de flamme.

Enfin, une méthode de tabulation de la chimie complexe associée à un modèle de combustion turbulente à pdf présumée a été évalué sur un cas avec hypothèse de prémélange parfait et a montré qu'il permettait d'obtenir de bons résultats. Bien qu'il n'offre pas d'avantage flagrant par rapport au schéma réduit à deux étapes dans cette étude, il ouvre la porte vers des avantages majeurs tels que la prédiction de polluants (NOx en particulier) difficiles à inclure dans un schéma réduit.

Bibliographie

[1] ABDALLA, A. Y., BRADLEY, D., CHIN, S. B., AND C., L. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Oxydation communications 4* (1983), 113–130.

[2] ANGELBERGER, C., EGOLFOPOULOS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities. *Flow, Turb. and Combustion 65*, 2 (2000), 205–22.

[3] ANGELBERGER, C., VEYNANTE, D., EGOLFOPOULOS, F., AND POINSOT, T. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program* (1998), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 61–82.

[4] ASHURST, W. T., PETERS, N., AND SMOOKE, M. D. Numerical simulation of turbulent flame structure with non-unity lewis number. *Combust. Sci. Tech. 53* (1987), 339–375.

[5] BARLOW, R., KARPETIS, A., FRANK, J., AND CHEN, J.-Y. Scalar profiles and no formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combust. Flame 127* (2001), 2102–2118.

[6] BARLOW, R. S. Laser diagnostics and their interplay with computations to understand turbulent combustion. *Proc. Combust. Inst. 31* (2006), 49–75.

[7] BÉDAT, B., EGOLFOPOULOS, F., AND POINSOT, T. Direct numerical simulation of heat release and nox formation in turbulent non premixed flames. *Combust. Flame 119*, 1/2 (1999), 69–83.

[8] BERGMANN, V., MEIER, W., WOLFF, D., AND STRICKER, W. Application of spontaneous raman and rayleigh scattering and 2d lif for the characterization of a turbulent ch4/h2/n2 jet diffusion flame. *Applied Physics 66*, 4 (1998), 489–502.

[9] BILGER, R. W. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Phys. Fluids A 5*, 22 (1993), 436–444.

[10] BIRD, R. B., STEWART, W. E., AND LIGHFOOT, E. N. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960.

[11] BÖCKLE, S., KAZENWADEL, J., KUNZELMANN, T., AND SCHULZ, C. Laser-diagnostic multispecies imaging in strongly swirling natural gas flames. *Applied Physics B : Lasers and Optics 71* (2000), 741–746.

[12] BÖCKLE, S., KAZENWADEL, J., KUNZELMANN, T., SHIN, D.-I., AND SCHULZ, C. Single-shot laser-induced fluorescence imaging of formaldehyde with XeF excimer excitation. *Applied Physics B : Lasers and Optics 70* (2000), 733–735.

[13] BÖCKLE, S., KAZENWADEL, J., KUNZELMANN, T., SHIN, D.-I., SCHULZ, C., AND WOLFRUM, J. Simultaneous single-shot laser-based imaging of formaldehyde, oh and temperature in turbulent flames. In *Proc. Combust. Inst. 28* (2000), pp. 279–286.

[14] BÖCKLE, S., KAZENWADEL, J., SCHULZ, C., AND WOLFRUM, J. Laserspektroskopische bestimmung von no-konzentrations- und temperaturfeldern in turbulenten, nicht-vorgemischten drallflammen. Tech. rep., Arbeitsgemeinschaft TECFLAM, 1999.

[15] BÖHM, B., BRÜBACH, J., ERTEM, C., AND DREIZLER, A. Experiments for combustion-les validation. *Flow, Turb. and Combustion 80*, 4 (2007), 507–529.

[16] BOILEAU, M., PASCAUD, S., RIBER, E., CUENOT, B., GICQUEL, L., POINSOT, T., AND CAZALENS, M. Investigation of two-fluid methods for Large Eddy Simulation of spray combustion in Gas Turbines. *Flow, Turb. and Combustion 80*, 3 (2008), 291–321.

[17] BOILEAU, M., STAFFELBACH, G., CUENOT, B., POINSOT, T., AND BÉRAT, C. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame 154*, 1-2 (2008), 2–22.

[18] BOUDIER, G., GICQUEL, L. Y. M., POINSOT, T., BISSIÈRES, D., AND BÉRAT, C. Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proc. Combust. Inst. 31* (2007), 3075–3082.

[19] BOUDIER, G., GICQUEL, L. Y. M., POINSOT, T., BISSIÈRES, D., AND BÉRAT, C. Effect of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combust. Flame 155*, 1-2 (2008), 196–214.

[20] BUTLER, T. D., AND O'ROURKE, P. J. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion* (1977), The Combustion Institute, pp. 1503 – 1515.

[21] CAZALENS, M., ROUX, S., SENSIAU, C., AND POINSOT, T. Solving combustion instabilities problems for high pressure jet engine cores. *J. Prop. Power 24*, 4 (2008).

[22] CERFACS. *AVBP Handbook - http ://cerfacs.fr/∼ avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK*.

[23] CHARLETTE, F., VEYNANTE, D., AND MENEVEAU, C. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame 131* (2002), 159–180.

[24] CHASSAING, P. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000.

[25] CHEN, J. H., ECHEKKI, T., AND KOLLMAN, W. The mechanism of two-dimensional pocket formation in lean premixed methane air flames with implications for turbulent combustion. *Combust. Flame 116*, 1/2 (1999), 15–48.

[26] COLIN, O. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. Phd thesis, INP Toulouse, 2000.

[27] COLIN, O., DUCROS, F., VEYNANTE, D., AND POINSOT, T. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids 12*, 7 (2000), 1843–1863.

[28] COLIN, O., PERA, C., AND JAY, S. Detailed chemistry tabulation based on a fpi approach adapted and applied to 3d internal combustion engine calculations. In *Proceedings of European Combustion Meeting* (2007).

[29] COLIN, O., AND RUDGYARD, M. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys. 162*, 2 (2000), 338–371.

[30] DE GOEY, L. P. H., VAN OIJEN, J. A., BONGERS, H., AND GROOT, G. R. A. New flamelet based reduction methods : the bridge between chemical reduction techniques and flamelet methods. In *European Combustion Meeting* (Orléans (France), 2003).

[31] DOMINGO, P., VERVISCH, L., PAYET, S., AND HAUGUEL, R. DNS of a premixed turbulent V-Flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FPI-tabulated chemistry. *Combust. Flame 143*, 4 (2005), 566–586.

[32] DOMINGO, P., VERVISCH, L., AND VEYNANTE, D. Large-eddy simulation of a lifted methane-air jet flame in a vitiated coflow. *Combust. Flame 152*, 3 (2008), 415–432.

[33] DUCROS, F., COMTE, P., AND LESIEUR, M. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *J. Fluid Mech. 326* (1996), 1–36.

[34] ECHEKKI, T., AND CHEN, J. H. Unsteady strain rate and curvature effects in turbulent premixed methane-air flames. *Combust. Flame 106* (1996), 184–202.

[35] EL-ASRAG, H., AND MENON, S. Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames. *Proc. Combust. Inst. 31* (2007), 1747–1754.

[36] FERNANDEZ-TARRAZO, E., SANCHEZ, A., LINAN, A., AND WILLIAMS, F. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combust. Flame 147*, 1-2 (2007), 32–38.

[37] FERNÁNDEZ-TARRAZO, E., SÁNCHEZ, A. L., LIÑÁN, A., AND WILLIAMS, F. A. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combust. Flame 147* (2006), 32–38.

[38] FERZIGER, J. H., AND PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1997.

[39] FIORINA, B., BARON, R., GICQUEL, O., THÉVENIN, D., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ildm. *Combust. Theory and Modelling 7* (2003), 449–470.

[40] FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Premixed turbulent combustion modeling using a tabulated detailed chemistry and pdf. *Proc. Combust. Inst. 30* (2004), in press.

[41] FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counter-flow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame 140* (2005), 147–160.

[42] FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Premixed turbulent combustion modeling using a tabulated detailed chemistry and PDF. *Proc. Combust. Inst. 30*, 1 (2005), 867–874.

[43] FIORINA, B., GICQUEL, O., AND VEYNANTE, D. Numerical simulation of a turbulent flame using tabulated chemistry based on self-similar properties of turbulent premixed flames. *Proc. Comb. Institute 32*, in press (2008).

[44] FRENKLACH, M., WANG, H., GOLDENBERG, M., SMITH, G. P., GOLDEN, D. M., BOWMAN, C. T., HANSON, R. K., GARDINER, W. C., AND LISSIANKI, V. Gri-mech : an optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion. Tech. Rep. GRI-Report GRI-95/0058, Gas Research Institute, 1995.

[45] FUREBY, C., AND GRINSTEIN, F. F. Monotonically integrated large-eddy simulation of free shear flows. *AIAA Journal 37*, 5 (1999), 544–556.

[46] GALPIN, J. *Modélisation LES de la combustion avec une prise en compte des effets de cinétique détaillée et en perspective d'application moteur*. PhD thesis, INSA Rouen, 2007.

[47] GALPIN, J., NAUDIN, A., VERVISCH, L., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND DOMINGO, P. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combust. Flame 155*, 1-2 (2008), 247–266.

[48] GALPIN, J., NAUDIN, A., VERVISCH, L., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND DOMINGO, P. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combust. Flame 155* (2008), 247–266.

[49] GIAUQUE, A., SELLE, L., POINSOT, T., BUECHNER, H., KAUFMANN, P., AND KREBS, W. System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using LES and measurements. *J. Turb. 6*, 21 (2005), 1–20.

[50] GICQUEL, O., DARABIHA, N., AND THÉVENIN, D. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proc. Combust. Inst. 28* (2000), 1901–1908.

[51] GILES, M. Non-reflecting boundary conditions for euler equation calculations. *AIAA Journal 28*, 12 (1990), 2050–2058.

[52] GORE, J., LIM, J., TAKENO, T., AND ZHU, X. A study of the effects of thermal radiation on the structure of methane/air counter-flow diffusion flames using detailed chemical kinetics. In *Book of Abstracts of the 5th ASME/JSME Joint Thermal Engineering Conference* (1999), p. 50.

[53] GROSSHANDLER, W. RADCAL :a narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment. Tech. Rep. 1402, NIST, 1993.

[54] GUPTA, A. K., LILLEY, D. G., AND SYRED, N. *Swirl flows*. Abacus Press, 1984.

[55] HAWORTH, D. C., AND POINSOT, T. J. The influence of lewis number and nonhomogeneous mixture on premixed turbulent flame structure. In *Proc. of the Summer Program* . Center for Turbulence Research, Stanford Univ./NASA-Ames, 1990, pp. 281–298.

[56] HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley, New York, 1988.

[57] HIRSCHFELDER, J. O., CURTISS, C. F., AND BIRD, R. B. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969.

[58] IHME, M., AND PITSCH, H. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model 1. a priori study and presumed pdf closure. *Combust. Flame 155*, 1-2 (2008), 70–89.

[59] IHME, M., AND PITSCH, H. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model 2. application in les of sandia flames d and e. *Combust. Flame 155*, 1-2 (2008), 90–107.

[60] JAMESON, A., SCHMIDT, W., AND TURKEL, E. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference* (Palo Alto, 1981), A. p. 81-1259, Ed.

[61] JONES, W. P., AND LINDSTEDT, R. P. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame 73* (1988), 222–233.

[62] KECK, O., MEIER, W., STRICKER, W., AND AIGNER, M. Establishment of a confined swirling natural gas/air flame as a standard flame : Temperature and species distributions from laser raman measurements. *Combust. Sci. Tech. 174* (2002), 117–151.

[63] KEE, R. J., RUPLEY, F. M., AND MILLER, J. A. Chemkin-ii : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Tech. rep., Sandia National Laboratories, 1991.

[64] KEMPF, A. Les validation from experiments. *Flow, Turb. and Combustion 80* (2008), 351–373.

[65] KIM, S. H., AND PITSCH, H. Conditional filtering method for large eddy simulation of turbulent nonpremixed combustion. *Phys. Fluids 17*, 10 (2005), 105103.1–105103.12.

[66] KLIMENKO, A. Y., AND BILGER, R. W. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci. 25*, 6 (1999), 595 – 687.

[67] KOLMOGOROV, A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR 30* (1941), 301.

[68] KUO, K. K. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.

[69] LANDENFELD, T., KREMER, A., HASSEL, E., AND JANICKA, J. Ansätze zur modellierung eingeschlossener drallflammen. Tech. rep., Arbeitsgemeinschaft TECFLAM, 1997.

[70] LANDENFELD, T., KREMER, A., HASSEL, E., JANICKA, J., SCHÄFER, T., KAZENWADEL, J., SCHULZ, C., AND WOLFRUM, J. Laser-diagnostic and numerical study of strongly swirling natural gas flame. In *Proc. Combust. Inst. 27* (1998), pp. 1023–1029.

[71] LANDENFELD, T., KREMER, A., HASSEL, E., JANICKA, J., SCHÄFER, T., KAZENWADEL, J., SCHULZ, C., AND WOLFRUM, J. Laserdiagnostic and numerical studies of strongly swirling natural-gas flames. In *Proc. Combust. Inst. 27* (1998), pp. 1023–1030.

[72] LAX, P. D., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Commun. Pure Appl. Math. 13* (1960), 217–237.

[73] LÉGIER, J.-P. *Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001.

[74] LÉGIER, J.-P., POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the Summer Program* (2000), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 157–168.

[75] LÉGIER, J.-P., VAROQUIÉ, B., LACAS, F., POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulation of a non-premixed turbulent burner using a dynamically thickened flame model. In *IUTAM Symposium on Turbulent Mixing and Combustion*, A. P. Eds and S. Candel, Eds. Kluwer Academic Publishers, 2002, pp. 315 – 326.

[76] LESIEUR, M., AND METAIS, O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Ann. Rev. Fluid Mech. 28* (1996), 45 – 82.

[77] LIEUWEN, T., AND ZINN, B. T. The role of equivalence ratio oscillations in driving combustion instabilities in low nox gas turbines. *Proc. Combust. Inst. 27* (1998), 1809–1816.

[78] LINAN, A., AND WILLIAMS, F. A. *Fundamental aspects of combustion*. Oxford University Press, 1993.

[79] LINDSTEDT, R., AND VAOS, E. Transported pdf modeling of high-reynolds-number premixed turbulent flames. *Combust. Flame 145* (2006), 495–511.

[80] LYONS, K. Toward an understanding of the stabilization mechanisms of lifted turbulent jet flames : Experiments. *Prog. Energy Comb. Sci. 33* (2007), 211–231.

[81] MAAS, U., AND POPE, S. B. Simplifying chemical kinetics : intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame 88* (1992), 239–264.

[82] MAHESH, K., CONSTANTINESCU, G., APTE, S., IACCARINO, G., HAM, F., AND MOIN, P. Large eddy simulation of reacting turbulent flows in complex geometries. In *ASME J. Appl. Mech.* (2006), vol. 73, pp. 374–381.

[83] MARE, F. D., JONES, W. P., AND MENZIES, K. Large eddy simulation of a model gas turbine combustor. *Combust. Flame 137* (2004), 278–295.

[84] MARTIN, C. Eporck user guide V1.8. Tech. Rep. TR/CFD/04/84, CERFACS, May 2004.

[85] MARTIN, C. *Etude énergétique des instabilités thermo-acoustiques et optimisation génétique des cinétiques réduites - TH/CFD/05/84*. Phd thesis, INP Toulouse, 2005.

[86] MARTIN, C., BENOIT, L., SOMMERER, Y., NICOUD, F., AND POINSOT, T. Les and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal 44*, 4 (2006), 741–750.

[87] MEIER, W., KECK, O., NOLL, B., KUNZ, O., AND STRICKER, W. Investigations in the tecflam swirling diffusion flame : Laser raman measurements and cfd calculations. *Applied Physics 71* (2000), 725–731.

[88] MEIER, W., WEIGAND, P., DUAN, X., AND GIEZENDANNER-THOBEN, R. Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame. *Combust. Flame 150*, 1-2 (2007), 2–26.

[89] MENEVEAU, C., AND KATZ, J. Scale-invariance and turbulence models for large eddy simulation. *Ann. Rev. Fluid Mech. 32* (2000), 1–32.

[90] MENEVEAU, C., AND POINSOT, T. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame 86* (1991), 311–332.

[91] MOIN, P., AND MAHESH, K. Dns : a tool in turbulence research. *Ann. Rev. Fluid Mech. 30* (1998), 539–578.

[92] MOUREAU, V., LARTIGUE, G., SOMMERER, Y., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND POINSOT, T. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys. 202*, 2 (2005), 710–736.

[93] MOUREAU, V., MINOT, P., PITSCH, H., AND BÉRAT, C. A ghost-fluid method for large-eddy simulations of premixed combustion in complex geometries. *J. Comput. Phys. 221*, 2 (Février 2007), 600–614.

[94] NAVARRO-MARTINEZ, S., AND KRONENBURG, A. Les-cmc simulations of a turbulent bluff-body flame. *Proc. Combust. Inst. 31* (2007), 1721–1728.

[95] NICOUD, F., BAGGETT, J., MOIN, P., AND CABOT, W. New approximate boundary conditions for les. part 1 : Finding the answer via an optimal control strategy. In *APS/DFD meeting* (New York, 1999), vol. 44 of *Bull. Amer. Phys. Soc.*

[96] NICOUD, F., AND DUCROS, F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turb. and Combustion 62*, 3 (1999), 183–200.

[97] NICOUD, F., AND POINSOT, T. Boundary conditions for compressible unsteady flows. In *Absorbing Boundaries and Layers, Domain Decomposition Methods. Applications to Large Scale Computation*, L. Tourrette and L. Halpern, Eds. Editions Novascience, New-York, 2001.

[98] O'ROURKE, P. J., AND BRACCO, F. V. Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames. *J. Comput. Phys. 33* (1979), 185–203.

[99] PETERS, N. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001.

[100] PETERS, N., AND ROGG, B. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer Verlag, Heidelberg, 1993.

[101] PIOMELLI, U., AND CHASNOV, J. R. Large eddy simulations : theory and applications. In *Turbulence and Transition Modelling*, H. Hallback, D. Henningson, A. Johansson, and P. Alfredsson, Eds. Kluwer Academic Publishers, 1996, pp. 269 – 336.

[102] PITSCH, H. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech. 38* (2006), 453–482.

[103] PITSCH, H., AND STEINER, H. Large eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). *Phys. Fluids 12* (2000), 2541–2554.

[104] POINSOT, T. Using direct numerical simulation to understand turbulent premixed combustion (plenary lecture). *Proc. Combust. Inst. 26* (1996), 219–232.

[105] POINSOT, T., ANGELBERGER, C., EGOLFOPOULOS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulations of combustion instabilities. In *1st Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena* (Santa Barbara, Sept 12-15., 1999), pp. 1–6.

[106] POINSOT, T., CANDEL, S., AND TROUVÉ, A. Application of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci. 21* (1996), 531–576.

[107] POINSOT, T., AND HAWORTH, D. DNS and modelling of the interaction between turbulent premixed flames and walls. In *Proc. of the Summer Program* (1992), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 307–324.

[108] POINSOT, T., AND LELE, S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys. 101*, 1 (1992), 104–129.

[109] POINSOT, T., TROUVÉ, A., AND CANDEL, S. Applications of direct numerical simulations of premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci. 21 :531* (1996), 576.

[110] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2001.

[111] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.

[112] POINSOT, T., VEYNANTE, D., AND CANDEL, S. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *J. Fluid Mech. 228* (1991), 561–605.

[113] POINSOT, T., VEYNANTE, D., YIP, B., TROUVÉ, A., SAMANIEGO, J.-M., AND CANDEL, S. Active control methods and applications to combustion instabilities. *J. Phys. III July* (1992), 1331–1357.

[114] POPE, S. B. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Comb. Sci. 19*, 11 (1985), 119–192.

[115] POPE, S. B. Computations of turbulent combustion : progress and challenges. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion* (1990), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 591–612.

[116] POPE, S. B. Lagrangian PDF methods for turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.* (1994), 23–63.

[117] POPE, S. B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combust. Theory and Modelling 1* (1997), 41–63.

[118] POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.

[119] PRIÈRE, C., GICQUEL, L. Y. M., GAJAN, P., STRZELECKI, A., POINSOT, T., AND BÉRAT, C. Experimental and numerical studies of dilution systems for low emission combustors. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J. 43*, 8 (2005), 1753–1766.

[120] PRIÈRE, C., GICQUEL, L. Y. M., KAUFMANN, A., KREBS, W., AND POINSOT, T. Les of mixing enhancement : LES predictions of mixing enhancement for jets in cross-flows. *J. Turb. 5* (2004), 1–30.

[121] PROSSER, R. Improved boundary conditions for the direct numerical simulation of turbulent subsonic flows i : Inviscid flows. *J. Comput. Phys. submitted* (2004).

[122] PROSSER, R. Improved boundary conditions for the direct numerical simulation of turbulent subsonic flows i : Inviscid flows. *J. Comput. Phys. 207* (2005), 736–768.

[123] RAMAN, V., AND PITSCH, H. A consistent les/filtered-density function formulation for the simulation of turbulent flames with detailed chemistry. *Proc. Combust. Inst. 31* (2007), 1711–1719.

[124] RIBERT, G., CHAMPION, M., GICQUEL, O., DARABIHA, N., AND VEYNANTE, D. Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry. *Combust. Flame 141* (2005), 271–280.

[125] RIBERT, G., GICQUEL, O., DARABIHA, N., AND VEYNANTE, D. Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed flames. *Combust. Flame 146* (2006), 649–664.

[126] RILEY, J. Review of large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *J. Fluids Eng. 128* (March 2006), 209–215.

[127] ROUX, A., GICQUEL, L. Y. M., SOMMERER, Y., AND POINSOT, T. J. Large eddy simulation of mean and oscillating flow in a side-dump ramjet combustor. *Combust. Flame 152*, 1-2 (2007), 154–176.

[128] ROUX, S. *Influence de la modélisation du mélange air/carburant et de l'étendue du domaine de calcul dans la simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion. Application à des foyers aéronautiques.* Phd thesis, INP Toulouse, 2007.

[129] ROUX, S., LARTIGUE, G., POINSOT, T., MEIER, U., AND BÉRAT, C. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combust. Flame 141* (2005), 40–54.

[130] RUTLAND, C. J., AND TROUVÉ, A. Pre-mixed flame simulations for non-unity Lewis numbers. In *Proc. of the Summer Program* . Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1990, pp. 299–309.

[131] SAGAUT, P. *Introduction à la simulation des grandes échelles*, mathématiques & applications ed. Springer, 1998.

[132] SCHMITT, P. *Simulation aux grandes échelles de la combustion étagée dans les turbines à gaz et son interaction stabilité-polluants-thermique*. Phd thesis, INP Toulouse, 2005.

[133] SCHMITT, P., POINSOT, T. J., SCHUERMANS, B., AND GEIGLE, K. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *J. Fluid Mech. 570* (2007), 17–46.

[134] SCHÖNFELD, T., AND POINSOT, T. Influence of boundary conditions in LES of premixed combustion instabilities. In *Annual Research Briefs* . Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999, pp. 73–84.

[135] SCHÖNFELD, T., AND RUDGYARD, M. Steady and unsteady flows simulations using the hybrid flow solver avbp. *AIAA Journal 37*, 11 (1999), 1378–1385.

[136] SELLE, L. *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme-acoustique dans un écoulement vrillé*. Phd thesis, INP Toulouse, 2004.

[137] SELLE, L., BENOIT, L., POINSOT, T., NICOUD, F., AND KREBS, W. Joint use of compressible large-eddy simulation and helmoltz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner. *Combust. Flame 145*, 1-2 (2006), 194–205.

[138] SELLE, L., LARTIGUE, G., POINSOT, T., KOCH, R., SCHILDMACHER, K.-U., KREBS, W., PRADE, B., KAUFMANN, P., AND VEYNANTE, D. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame 137*, 4 (2004), 489–505.

[139] SELLE, L., NICOUD, F., AND POINSOT, T. The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators. *AIAA Journal 42*, 5 (2004), 958–964.

[140] SENGISSEN, A., GIAUQUE, A., STAFFELBACH, G., PORTA, M., KREBS, W., KAUFMANN, P., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proc. Combust. Inst. 31* (2007), 1729–1736.

[141] SENGISSEN, A., KAMPEN, J. F. V., HULS, R., STOFFELS, G., KOK, J. B. W., AND POINSOT, T. Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combust. Flame 150* (2007), 40–53.

[142] SINGER, M. A., AND POPE, S. B. Exploiting isat to solve the equations of reacting flow. *Combust. Theory and Modelling 8*, 2 (2004), 361 – 383.

[143] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev. 91* (1963), 99–164.

[144] SOMMERER, Y., GALLEY, D., POINSOT, T., DUCRUIX, S., LACAS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulation and experimental study of flashback and blow-off in a lean partially premixed swirled burner. *J. Turb. 5* (2004).

[145] STAFFELBACH, G., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Highly parallel Large Eddy Simulations of multiburner configurations in industrial gas turbines. In *Lecture Notes in Computational Science and Engineering - Complex effects in Large Eddy Simulation* (2006), Springer, Ed., vol. 56, pp. 326–336.

[146] STAFFELBACH, G., GICQUEL, L. Y. M., AND POINSOT, T. Highly parallel large eddy simulation of multiburner configurations in industrial gas turbines. *The Cyprus International Symposium on Complex Effects in Large Eddy Simulation* (2005).

[147] STAFFELBACH, G., AND POINSOT, T. High performance computing for combustion applications. In *Super Computing 2006* (Tampa, Florida, USA, 2006).

[148] STEIN, O., AND KEMPF, A. Les of the sydney swirl flame series : a study of vortex breakdown in isothermal and reacting flows. *Proc. Combust. Inst. 31* (2007), 1755–1763.

[149] STRUIJS, R. *A multi-dimensional upwind discretization method fot the Euler equations on unstructured grids*. Phd thesis, Technical University of Delft, 1994.

[150] STULL, D. R., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Tech. Rep. NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.

[151] SUTHERLAND, J., AND KENNEDY, C. Improved boundary conditions for viscous, reacting, compressible flows. *J. Comput. Phys. 191* (2003), 502–524.

[152] THOMPSON, K. W. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *J. Comput. Phys. 68* (1987), 1–24.

[153] TROUVE, A. Simulation of flame-turbulence interactions in premixed combustion. In *Annual Research Briefs* . Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1991, pp. 273–286.

[154] TROUVÉ, A., AND POINSOT, T. The evolution equation for the flame surface density. *J. Fluid Mech. 278* (1994), 1–31.

[155] TRUFFIN, K., AND POINSOT, T. Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners. *Combust. Flame 142*, 4 (2005), 388–400.

[156] VAN OIJEN, J. A., LAMMERS, F. A., AND DE GOEY, L. P. H. Modeling of premixed laminar flames using flamelet generated manifolds. *Combust. Sci. Tech. 127* (2001), 2124–2134.

[157] VERVISCH, L., HAUGUEL, R., DOMINGO, P., AND RULLAUD, M. Three facets of turbulent combustion modelling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet flame. *J. Turb. 5* (2004), 004.

[158] VERVISCH, L., AND POINSOT, T. Direct numerical simulation of non premixed turbulent flames. *Ann. Rev. Fluid Mech. 30* (1998), 655–692.

[159] VEYNANTE, D., FIORINA, B., DOMINGO, P., AND VERVISCH, L. Using self-similar properties of turbulent premixed flames to downsize chemical tables in high-performance numerical simulations. *Combust. Theory and Modelling in press* (2008).

[160] VEYNANTE, D., AND VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci. 28* (2002), 193 – 266.

[161] WESTBROOK, C., AND DRYER, F. Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Tech. 27* (1981), 31–43.

[162] WILLIAMS, F. A. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

[163] XIAO, K., SCHMITT, D., AND MAAS, U. Pdf simulation of turbulent non-premixed ch4/h2-air flames using automatically reduced chemical kinetics,. In *27th Symp. (Int.) on Combustion* (1998), T. C. Institute, Ed., vol. 2, pp. 1073–1080.

Annexes

Annexe A

Quelques enjeux de la recherche en combustion

La recherche en combustion est essentiellement motivée par un objectif : la réduction de la consommation de carburant fossile. Cet objectif à trois origines principales, détaillées brièvement par la suite :

- la réduction des coûts, ou **aspect économique** (section A.1) : les utilisateurs de moteurs en général, et de turbines en particulier, souhaitent que celles-ci consomment le moins de carburant possible, pour des raisons financières évidentes. Les utilisateurs mentionnés peuvent être les compagnies aériennes, les fournisseurs d'électricité, les transporteurs routiers et maritimes, les usagers civils, ...
- la réduction des émissions polluantes, ou **aspect écologique** (section A.2) : les gouvernements imposent des quotas d'émission polluantes de plus en plus drastiques, que ce soit dans les domaines aéronautiques, automobiles ou de transformation d'énergie, dans l'objectif de réduire les émissions polluantes. Ceci est accru par la prise de conscience écologique grandissante des populations.
- l'indépendance des pays par rapport aux pays producteurs de pétrole, ou **aspect géopolitique** (section A.3) : certaines études indiquent la réduction des réserves naturelles de pétrole. Les pays producteurs de pétrole deviennent donc de plus en plus puissants dans les rapports internationaux. Bon nombre de pays souhaitent donc limiter leur dépendance au pétrole en réduisant leur consommation.

A.1 Aspect économique

Le prix du baril de pétrole est en augmentation continue depuis une dizaine d'années environ. Cette augmentation s'est accrue ces trois dernières années, s'est emballée considérablement en 2007 et 2008 et s'est inversée ces derniers mois, permettant au baril de pétrole de retrouver une valeur qui est la sienne (Fig. A.1). Néanmoins, l'augmentation simultanée des coûts de raffinerie et de transport ne permet pas au prix du carburant de diminuer proportionnellement au prix du baril.

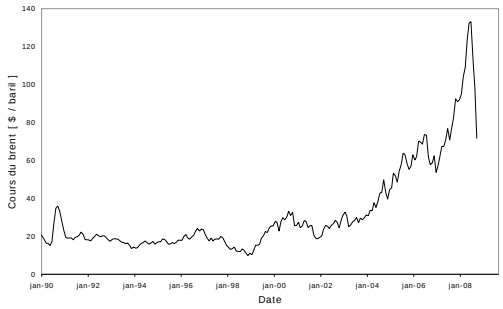


FIG. A.1 - *Cours du brent de janvier 1990 à mai 2008 [dollar / baril]*

Les effets de l'augmentation des prix du pétrole se ressentent à «l'ordre 1» :
- augmentation du prix du combustible automobile
- augmentation des prix de l'énergie (électricité, gaz, fuel domestique, ...)
- augmentation des prix des transports (les surcharges carburants, dans le cas du transport aérien, en sont l'exemple marquant)

Cette augmentation se ressent aussi à des ordres supérieurs, parfois inattendus :
- augmentation des prix des produits agricoles[1]
- changement des habitudes touristiques [2][3]
- augmentation des actes de vandalisme [4]

[1]Cette augmentation est biaisée dans le cas des céréales : ne partie de l'agriculture mondiale s'est retournée vers la production de biocarburants, provoquant un déficit de production mondiale et donc une augmentation des prix.

[2]L'institut des voyages de Voyages-sncf.com a réalisé une étude sur les vacances des Français pour l'été 2008, publiée le 07 juillet 2008. 48% des personnes interrogées estiment que l'augmentation du prix de l'essence va avoir une incidence sur leur choix de mode de transport pour les vacances d'été.

[3]L'association internationale du transport aérien (Iata) table pour 2008 sur un bénéfice net cumulé de 4,5 milliards de dollars, et non plus sur 5 milliards comme annoncé en décembre ou encore 7,8 milliards en septembre 2007. L'Iata met en avant le renchérissement du prix du pétrole et le ralentissement de l'économie mondiale.

[4]Une enquête menée en juillet/août 2007 par Data-deliver, cabinet d'études et de conseil en transport & logistique auprès des transporteurs français a montré que 99% des entreprises de transport sont victimes de vols de carburant, et que un transporteur sur deux considère que c'est un problème important pour son entreprise !

A.2 Aspect écologique

La notion de pollution de l'air (ou atmosphérique) décrit, comme les autres pollutions, une altération de la qualité et de la pureté de l'air par une ou plusieurs substances ou particules présentes à des concentrations et durant des temps suffisants pour créer un effet toxique ou écotoxique. Le terme "polluant" désigne un altéragène, biologique, physique ou chimique, biodégradable, dégradable ou stable. On compte aujourd'hui des dizaine de milliers de molécules différentes, polluants avérés ou suspectés, et qui pour beaucoup agissent en synergies entre eux et avec d'autres paramètres (UV solaire, ozone, humidité de l'air, acides,...). Les effets de ces synergies sont encore très mal connus. La pollution est locale (voitures, transport aérien, usines, ...) ou globale (effet du CO_2 sur l'effet de serre).

A.2.1 Histoire



FIG. A.2 - *C'est avec la révolution industrielle que la pollution de l'air est devenue la plus visible et manifeste.*



FIG. A.3 - *Pollution : le smog à Moscou*

La pollution de l'air a quelques sources anciennes. On sait par exemple que l'air intérieur de nombreuses habitations traditionnelles, enfumé par des feux de bois mal conçus, nuit à la santé. De même, les poussières, fumées et vapeurs émises par les mines de plomb, de cuivre et de mercure de la Rome antique ont laissé des traces jusque dans la glace du pôle nord.

Mais c'est au XIXe siècle qu'une pollution importante et chronique a recouvert les villes de la révolution industrielle.

A.2.2 Principales sources de pollution

La pollution de atmosphérique résulte principalement des gaz et particules rejetés dans l'air par les véhicules à moteur, les installations de chauffage, les centrales thermiques et les installations industrielles : oxydes de carbone, de soufre et d'azote, poussières, particules radioactives, produits chimiques, ...

On distingue deux types de sources : anthropiques (émissions des chaudières, moteurs, usines, ...) et naturelles (volcanisme, érosion éolienne, émissions naturelles de méthane ou d'ozone,...). Cette distinction est parfois difficile à établir : la dégradation anthropique des sols peut favoriser des émissions

de méthane qu'on jugera ou non naturel. De même, l'aridification anthropique induite par le drainage, le surpâturage, la salinisation et la dégradation des sols favorise des envols de poussière qu'il est difficile de différencier des envols naturels à partir des déserts originels.

A.2.2.1 Les véhicules à moteur

Les véhicules à moteur, de plus en plus nombreux, rejettent des gaz toxiques (gaz carbonique, monoxyde de carbone,...) jusque dans la haute atmosphère (avions et fusées). La plupart des moteurs font appel aux énergies fossiles (pétrole, houille, gaz naturel), à l'origine d'une pollution qui s'est considérablement aggravée dans le monde depuis le début du XXe siècle.

A.2.2.2 La production d'énergie

Les besoins en énergie augmentent et leur satisfaction entraîne une pollution croissante sur la planète, notamment en Chine qui est devenue en 2006[5] le pays le plus émetteur de CO_2 avec la délocalisation d'une grande partie de la production des pays riches. En effet, la chine utilise le charbon à 69 % pour sa production énergétique, ce qui est un taux 42 fois plus élevé que la moyenne mondiale. Elle reste cependant derrière les USA en terme de CO_2 émis par habitants. En 2007, une centrale au charbon y serait mise en route tous les 3 jours, chacune développant la puissance d'un réacteur nucléaire.

A.2.2.3 Les industries

La fabrication de la plupart des articles domestiques entraîne la libération de substances chimiques toxiques dans l'atmosphère. C'est le cas, notamment pour la fabrication d'objets en matières plastiques.

A.2.3 Les produits polluants

La majorité des polluants atmosphériques sont cités dans les paragraphes suivants. Ils sont d'origines diverses, et ne sont donc pas tous en rapport avec le sujet de cette étude, mais beaucoup sont liés avec la combustion de carburants fossiles (pétrole, gaz, charbon, houille, ...).

A.2.3.1 Précurseurs de l'ozone

L'ozone est dit polluant "secondaire" : il n'est pas émis directement dans l'air mais résulte d'une réaction photochimique impliquant des précurseurs. Il est une des causes du smog (Fig. A.3) et se développe plus intensément en période de temps chaud et ensoleillé : les concentrations en ozone sont ainsi plus élevées durant la période estivale.

[5] Selon une étude du « Netherlands Environmental Assessment Agency » publiée le 22 juin 2007 ; En 2006 la chine a produit 6. 200 mmillions de tonnes of CO_2, plus que les 5.800 millions de tonnes produites par les USA

- **Les oxydes d'azote**, notés d'une façon générale par le sigle NOx regroupent le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO_2). Les NOx sont essentiellement produits par les combustions à haute température et à haute pression, de deux origines principales :
  - les moteurs d'automobile, et en particulier les moteurs diesel qui, du fait de leur fonctionnement à plus haute pression, émettent 2 à 3 fois plus de NOx que les moteurs à essence.
  - les moteurs d'avion : un avion qui décolle produit en moyenne 14 kg d'oxyde d'azote, l'équivalent de 2000 voitures diesel qui font 25 km.
- **Les composés organiques volatils** sont des hydrocarbures qui peuvent être émis par des facteurs anthropogéniques (production d'essence, émanation de solvant,...) et aussi par la végétation.

A.2.3.2 Gaz à effet de serre

- **Gaz issus de la combustion de carburants fossiles**
  - Dioxyde de carbone : Bien que le gaz carbonique ne soit pas toxique en soi, et favorise en fait la croissance des plantes, les environnementalistes ont mis en évidence dans les années 1990 que l'excès de dioxyde de carbone est une forme de pollution, en raison de son action dans le processus de réchauffement climatique. C'est notamment pourquoi le Protocole de Kyoto de 1999 a établi un calendrier de réduction des émissions de ce gaz.
  - Monoxyde de carbone (CO) : C'est un des produits de la combustion incomplète. Il est dangereux pour les animaux car il se fixe sur l'hémoglobine du sang, empêchant le transport d'oxygène dans l'organisme. De plus, il est inodore, le temps de ressentir un léger mal de tête et il est déjà trop tard sans intervention extérieure. Il se dilue très facilement dans l'air ambiant, mais en milieu fermé, sa concentration le rend toxique, voire mortel ; chaque année, on relève des dizaines de cas d'intoxication mortelle, à cause d'appareils de combustion (ou de groupes électrogènes) placés dans une pièce mal aérée (manque d'oxygène entrant, manque de sortie pour le CO).
  - Dioxyde de soufre (SO_2) : C'est l'un des principaux déchets rejetés lors de la combustion d'origine fossile. Ces origines peuvent être anthropiques (chauffage domestique, transports, industrie, métallurgie) mais également naturelles : marécages, océans, volcanisme. Il est un agent irritant du tractus respiratoire. Le dioxyde de soufre est aussi un composant de la formation des pluies acides, nuisibles aux écosystèmes tels que les forêts et les lacs. En 2006, la Chine est le premier pays du monde pour les émissions de dioxyde de soufre, qui ont progressé de 27 % entre 2000 et 2005[6].
- **CFC et assimilés**
  Dès les années 1980, il a été démontré que les chlorofluorocarbones (CFC, dits « fréons ») ont des effets potentiellement négatifs : destruction de la couche d'ozone dans la stratosphère ainsi qu'importante contribution à l'effet de serre. Le protocole de Montréal a mis un terme à la production de la grande majorité de ces produits.
  Les sources de pollution au CFC sont les suivantes :
  - utilisés dans les systèmes de réfrigération et de climatisation pour leur fort pouvoir caloriporteur, ils s'en échappent à l'occasion de fuites des appareils ou sont libérés lors de la destruction des appareils hors d'usage.
  - utilisés comme propulseur dans les bombes aérosols, une partie est libérée à chaque utilisation.

[6] « 2006 : année de la pollution en Chine », dans L'Express du 10/01/2007

Les bombes aérosols utilisent désormais comme gaz de propulsion de l'air comprimé, ou du dioxyde de carbone (CO_2).

– **Méthane**
Le méthane (CH4) est nuisible par sa grande contribution à l'effet de serre. Il a un potentiel de retenir la chaleur de près de 300 fois celle du CO_2.
Les sources de pollution au méthane sont les suivantes :
  – Fermentation (biogaz)
  – Gaz de digestion des animaux d'élevage (ruminants notamment)
  – Culture de riz
  – Gaz naturel

A.2.3.3 Particules

Les particules solides en suspension dans l'air sont principalement constituées :

– de poussière (provenant de l'érosion des sols ou d'activité volcanique)
– de pollen (à certaines périodes de l'année)
– de résidus de combustion incomplète (dues aux moteurs Diesel, à l'activité industrielle, au chauffage au bois résidentiel, ...)
– des procédés industriels, comme le sciage du bois d'œuvre

Le poids de ces particules et leur taille, de l'ordre du micromètre à la centaine de micromètres de diamètre, leur permettent de se diffuser au gré des vents. Une fois émises, elles peuvent rester en suspension pendant plusieurs jours. Elles peuvent pénétrer profondément dans les poumons d'autant plus facilement que leur taille est réduite (particules fines, de taille inférieure à 2,5 μm). Dépendant de leur constitution, de leur concentration et des durées d'exposition, les particules peuvent causer des allergies, des difficultés respiratoires ou des lésions pouvant occasionnellement entraîner des cancers.

La pluie, en lessivant l'atmosphère, ramène de nombreux polluants au sol. Mais une partie pourra, une fois déshydratée, repartir dans l'air. Certains polluants plus légers que l'eau, ou liposolubles, sont provisoirement fixés par les océans, dans le biofilm. Ils peuvent néanmoins repasser dans le compartiment atmosphérique par évaporation ou par les embruns emportés par le vent.

A.2.4 Synthèse sur les grandes sources de pollution aérienne

La principale cause est l'activité anthropique, mais certains événements naturels peuvent perturber la composition de l'air de façon non négligeable et durable (éruption volcanique ou certains feux naturels à très grande échelle).

La pollution due aux activités humaines se décompose principalement en :

– rejets de l'industrie : les industries de la chimie et de la pétrochimie rejettent de nombreux types de produits, résidus de processus de transformation. Les installations du secteur de la sidérurgie et de la métallurgie émettent également de nombreux polluants en grande quantité, notamment dans

des processus de combustion incomplète (cokeries, agglomérations,...) ou de refonte de matériaux utilisés (aciéries électriques)
- rejets liés à l'incinération et à la dégradation naturelle ou contrôlée (compostage, fermentation,. . .) des ordures ou d'autres produits
- rejets liés à la production d'énergie, de chaleur et de froid
- rejets liés aux activités agricoles et d'élevage
- rejets liés aux transports.

A.2.5 Règlementation

La plupart des pays se sont dotés de lois sur l'air concernant les émissions polluantes. A titre d'exemple, le règlement européen prévoit que les émissions de CO_2 des automobiles soient, en moyenne par constructeur, ramenées à 130 g/km en 2012, grâce à l'amélioration des rendements moteurs. Des mesures supplémentaires sont envisagées sur d'autres segments (climatisation, pneus) pour atteindre les 120 g/km à cette date. Cette mesure contraignante se justifie d'autant plus qu'en 1998, les principales associations de constructeurs avaient signé un accord volontaire avec les autorités européennes pour atteindre la norme de 140 g/km en 2008 et 120 g/km en 2010. De même, L'annexe VI de la convention marpol traite de la pollution de l'air par les navires[7].

[7]Convention Marpol, http ://www.imo.org/

A.3 Aspect géopolitique

La géopolitique du pétrole est intimement liée aujourd'hui à la perception de l'atteinte du pic pétrolier par les grandes puissances, ce qui inclut la prise de conscience des limites géologiques de la ressource. Durant le XXe siècle, les motivations ont été différentes, compte tenu de la nature politique des deux premiers chocs pétroliers.

Ce thème est crucial puisqu'à la fois international et multinational :
- Il est inhérent aux relations internationales depuis que les efforts de prospection menés durant la fin du XIXe siècle ont révélé des gisements mirifiques au Moyen-Orient. [8] [9] [10]
- L'économie mondiale, dont cinq compagnies pétrolières figurent parmi le top 10^{11}, est désormais liée au sort de multinationales qui ont placé leurs intérêts concernant l'or noir en compétition.

A.3.1 Les enjeux

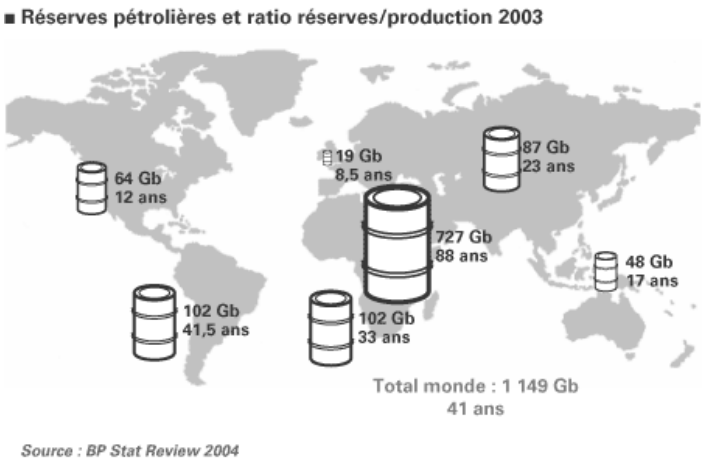


FIG. A.4 - *Carte établie en 2003 par BP Statistical Review des réserves pétrolières mondiales .*

[8] Les difficultés de transport liées au gaz confinent cet hydrocarbure à des considérations de géostratégies locales, telle celle de la Russie, par exemple.

[9] La montée de la consommation de pétrole de la Chine confirme l'arrivée du dernier acteur parmi les participants déjà connus du Grand Jeu réactivé sur les ensembles géographiques du Moyen-Orient et d'Asie centrale où se trouve le gisement de Bakou.

[10] Les enjeux ne se restreignent pas au Moyen-Orient, la péninsule de Bakassi ayant été cédée par le Nigeria au Cameroun à l'issue du règlement d'une revendication territoriale soulignée par la présence de pas moins de huit compagnies pétrolières ayant assuré la prospection offshore.

[11] ces cinq figurent parmi les six (en) supermajors du marché énergétique.

A.3.1.1 Le contrôle des gisements

Le pétrole est une donnée largement prise en compte par les stratèges géopolitiques. En effet, la dépendance des pays envers ce produit est telle qu'une difficulté d'approvisionnement (coût, diminution de la production, ...) peut, en soi, justifier un conflit. D'autre part, une guerre qui rompt des approvisionnements en pétrole peut ainsi forcer l'implication de puissances, qui seraient restées neutres sinon. Par ailleurs, l'approvisionnement en pétrole des belligérants a plusieurs fois influé sur le sort des armes, comme pendant les deux guerres mondiales.

A.3.1.2 Le contrôle des détroits

La géostratégie des détroits par lesquels passent les pétroliers constitue le second enjeu, celui du transport pétrolier.

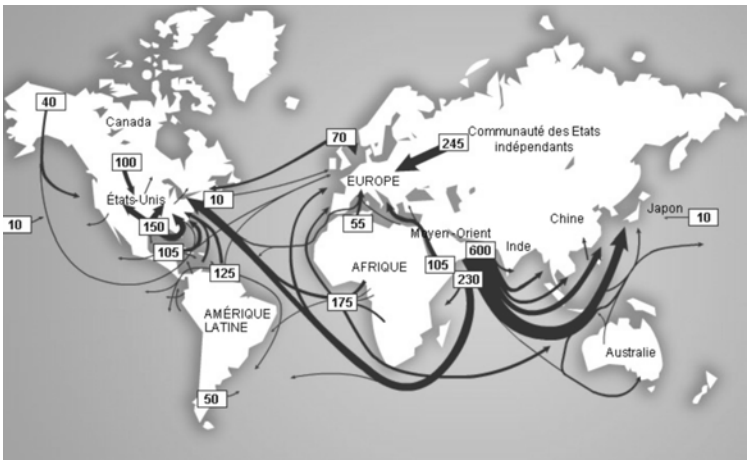


FIG. A.5 - *Carte des principaux flux de pétrole dans le monde en 2003 (en millions de tonnes).*

Le détroit d'Ormuz est à la fois dans la zone d'influence de l'Iran comme dans celle des pays de la péninsule arabique, pour lesquels les États-Unis ont délégué une flotte mouillant en permanence dans le golfe Persique, la cinquième de l'US Navy (Fig. **??**). La tension est si palpable que même les îlots bordant le détroit font l'objet de conflits d'intégrité territoriale.

Les approvisionnements de l'Occident dépendent très largement du canal de Suez ; ceux de l'Amérique du canal de Panama.

Enfin ceux du Japon et de la Chine passent par le détroit de Malacca, pour lequel les voies maritimes se sont avérées peu sûres puisque ces eaux sont parmi les dernières du globe où se pratique la piraterie.

Par ailleurs, ce détroit débouche sur la mer de Chine méridionale, pour laquelle un conflit territorial à épisodes implique six riverains pour l'accès aux ressources naturelles (le pétrole fait partie de ces intérêts).

A.3.1.3 La sécurisation de l'approvisionnement

Nombre de pays disposent de réserves stratégiques de pétrole et/ou de produits raffinés, pour subvenir aux besoins de leurs forces armées en cas de conflit.

Annexe B

Conditions aux limites

B.1 Généralités

Les conditions limites sont un point crucial dans tout code de mécanique des fluides. Elles deviennent critiques en LES dans les codes résolvant l'acoustique [105, 134].

L'intégration temporelle Runge-Kutta multi-étapes est utilisée dans AVBP. Cependant, pour des raisons de simplicité, l'exemple illustratif décrit une intégration une étape. Connaissant le vecteur solution U^n au temps t, la solution U^{n+1} au temps $t + \Delta t$ s'écrit de façon générale :

$$U^{n+1} = U^n - \mathcal{R}\Delta t \tag{B.1}$$

L'exposant n est utilisé pour rappeler que le code explicite ne se sert que des données à l'itération n. En chaque noeud du bord, le résidu $\mathcal{R}$ calculé par le schéma est corrigé par les conditions aux limites. Il est important de noter que, pour que le problème soit mathématiquement bien posé, le nombre nécessaire et suffisant de variables à corriger est dicté par le type de conditions aux limites (traitement d'entrée ou de sortie, voir [111] - Chap.9). Le résidu peut l'être de deux façons différentes :

Méthode non caractéristique : En imposant directement les variables conservatives cibles au travers des résidus.

Méthode caractéristique : En effectuant une décomposition en ondes pour modifier les résidus [149]. C'est le principe de la méthode NSCBC[1] développée par *Poinsot* et *Lele* [108] et étendue aux écoulements multi-espèces par *Moureau* et *Lartigue* [92].

Nous allons nous attacher à expliquer plus en détail comment est construite cette deuxième méthode dans le chapitre B.2. Nous ne détaillerons pas la première méthode. Le lecteur qui chercherait de plus amples informations est invité à se reporter au "Handbook" d'AVBP[2].

[1] NSCBC pour Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition

[2] http ://www.cerfacs.fr/∼avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK/handbook.pdf

B.2 Conditions aux limites caractéristiques

The underlying key concept of characteristic boundary conditions is the following : waves that are leaving the domain are well-computed by the numerical scheme (in a sense, they only contain "upwind" information) and must be left unchanged, while waves entering the domain cannot be computed by the numerical scheme (they transport "downwind" information) and must therefore be replaced by user-defined values. These values are given by the physics of the boundary conditions.

The procedure of Boundary Condition treatment is summarised on Fig. B.1. This sketch will help to understand all implementation details exposed in sections B.2.1 to B.2.3.

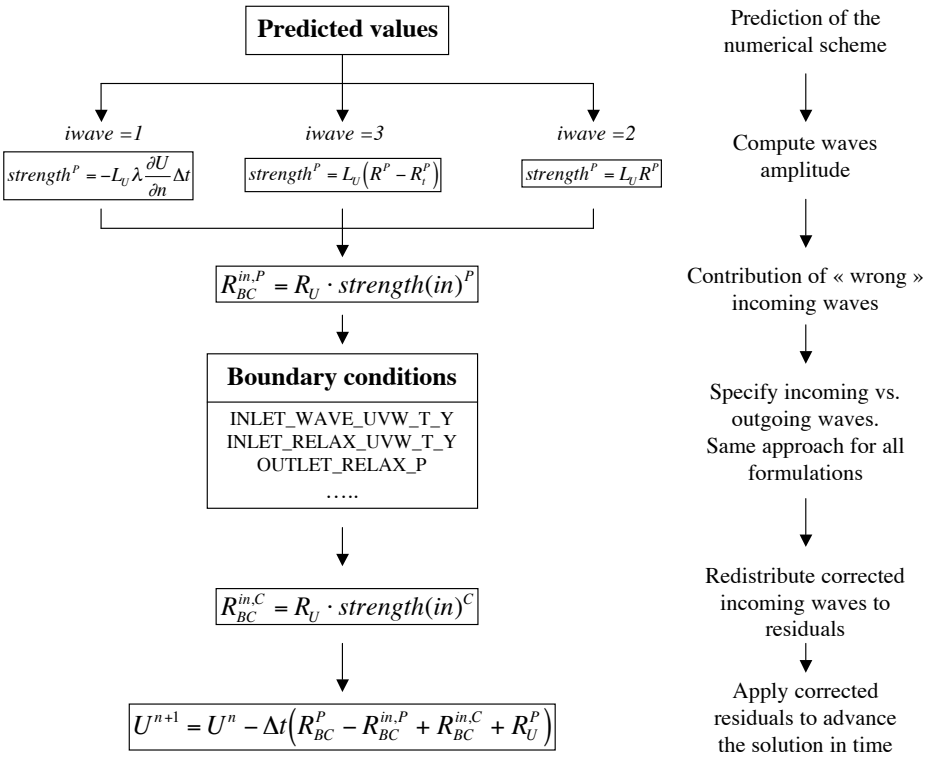


FIG. B.1 - *Scheme of the global procedure for characteristic boundary conditions.*

B.2.1 Building the characteristic boundary condition

The explicit time advancement scheme of AVBP leads to the predicted value U_{pred}^{n+1} :

$$\partial U = U_{pred}^{n+1} - U^n = -\mathcal{R}^P \Delta t \tag{B.2}$$

The total residual $\mathcal{R}^P$ can be split into two parts :

$$\partial U = -\Delta t (\mathcal{R}_{BC}^P + \mathcal{R}_U^P) \tag{B.3}$$

$\mathcal{R}^P_{BC}$ which will be modified by the BC treatment and $\mathcal{R}^P_U$ which will be left unchanged. The objective of the BC treatment is to construct the final value of U at time $n+1$: U^{n+1}

$$U^{n+1} = U^n - \Delta t(\mathcal{R}^C_{BC} + \mathcal{R}^P_U) \tag{B.4}$$

where $\mathcal{R}^C_{BC}$ is the part of the residual which has been corrected using $\mathcal{R}^P_U$, U^n, the type of BC and the target values. The correction is made in the following way :

$$\mathcal{R}^C_{BC} = \mathcal{R}^P_{BC} - \mathcal{R}^{in,P}_{BC} + \mathcal{R}^{in,C}_{BC} \tag{B.5}$$

i.e. by substituting the contribution on the residuals of the predicted "wrong" (see section B.1) incoming waves $\mathcal{R}^{in,P}_{BC}$ by their correct values given by the boundary condition $\mathcal{R}^{in,C}_{BC}$. A fondamental issue is now : how to choose the residual part to update $\mathcal{R}^P_{BC}$?

In AVBP there are two main methods to update $\mathcal{R}^P_{BC}$ linked to the spatial and temporal formulation described in the next sections. Other ways to choose the part of update do exist, using :

- the advection terms of the bicharacteristic equations [56].
- a Fourier decomposition of the solution at the boundary [51]
- viscous and reacting terms [151]
- a decomposition between the convective and the acoustic part to build the waves [121, 122]

They won't be presented here because they are not used in AVBP now. More details and comparisons between these methods can be found in [97] and in AVBP handbook.

B.2.2 Spatial formulation[3]

In the spatial formulation, which is the initial form of the NSCBC method [113], the ∂W are defined from spatial gradients :

$$\partial W = \texttt{strength} = -\lambda \frac{\partial W}{\partial n} \Delta t \tag{B.6}$$

where λ is a vector containing the eigenvalues of the normal jacobian, i.e. the propagation speed of the waves. This means that the variations of characteristic variables in the spatial formulation are proportional to normal gradients of variables. Following the development of *Poinsot* [113] we can introduce the $\mathscr{L}$ notation :

$$\mathscr{L} = \lambda \frac{\partial W}{\partial n} \tag{B.7}$$

To build the boundary condition, as detailed in section B.2.1, variations of characteristic variables ∂W must be obtained from residuals. The computation of the `strength` from the residuals $\mathcal{R}^P$ is then performed using the **normal residual approach**. This corresponds to the NSCBC formulation [113] in which spatial derivatives normal to the boundary are used to update $\mathcal{R}^P_{BC}$. To do this, the residual $\mathcal{R}^P$

[3] $iwave = 1$ or 3

must be split in two parts :

$$\mathcal{R}^P = \overbrace{\mathcal{R}^P_n}^{\text{normal part}} + \overbrace{\mathcal{R}^P_t + \mathcal{R}^P_{Diffusion} + \mathcal{R}^P_{Chemistry}}^{\text{non normal part}} \tag{B.8}$$

The NSCBC method assumes that only the normal part must be updated :

$$\mathcal{R}^P_{BC} = \mathcal{R}^P_n \tag{B.9}$$

while the non normal part is unchanged :

$$\mathcal{R}^P_U = \mathcal{R}^P_t + \mathcal{R}^P_{Diffusion} + \mathcal{R}^P_{Chemistry} \tag{B.10}$$

So variations of conservative variables linked to the normal residual can be written as

$$\partial U = -\mathcal{R}^P_n \Delta t \tag{B.11}$$

The normal part of the residuals can be defined in the following way :

$$\mathcal{R}^P_n = N_U \frac{\partial U}{\partial n} \tag{B.12}$$

where $N_U = A_U n_x + B_U n_y + C_U n_z$ is the normal jacobian in conservative variables. Thanks to the wave decomposition, N_U is :

$$N_U = R_U D L_U \tag{B.13}$$

where, as usual, D is the eigenvalues diagonal matrix. The values of predicted strength are obtained by :

$$\texttt{strength}^P = \partial W = -L_U \partial U = -L_U R_U D L_U \frac{\partial U}{\partial n} \Delta t = -L_U \lambda_i \frac{\partial U}{\partial n} \Delta t \tag{B.14}$$

Characteristic variables variations are therefore calculated using spatial normal derivates of conserved variables. The BC are applied to impose the ingoing waves $\texttt{strength(in)}^C$ and the solution is projected back to the residuals according to eq. B.5 :

$$\mathcal{R}^C_{BC} \Delta t = (\mathcal{R}^P_{BC} - \mathcal{R}^{in,P}_{BC} + \mathcal{R}^{in,C}_{BC}) \Delta t \tag{B.15}$$

where :

$$\begin{aligned} \Delta t \mathcal{R}^P_{BC} &= R_U \texttt{strength}^P \\ \Delta t \mathcal{R}^{in,P}_{BC} &= R_U \texttt{strength(in)}^P \\ \Delta t \mathcal{R}^{in,C}_{BC} &= R_U \texttt{strength(in)}^C \end{aligned} \tag{B.16}$$

The final value for U^{n+1} is then :

$$U^{n+1} = U^n - \Delta t \mathcal{R}^C_{BC} - \Delta t \left[\mathcal{R}^P_t + \mathcal{R}^P_{Diffusion} + \mathcal{R}^P_{Chemistry} \right]$$

Note that this method does not enforce strictly the value of U^n on the boundary since the tangential, viscous and chemical terms are not accounted for when assessing the corrected value of the incoming waves.

O. Colin in his PhD thesis [26] developed an alternative method for calculating the normal part of the residuals (*iwave* = 3). The idea is to subtract the transverse part of the residual from the total residual.

$$\mathcal{R}_{BC}^P = \mathcal{R}_n^P = \mathcal{R}^P - \mathcal{R}_t^P \tag{B.17}$$

This transverse residual $\mathcal{R}_t^P$ can be calculated on the boundary using the "complete" centered numerical scheme. On the contrary, gradients normal to the wall used for *iwave* = 1, are calculated with a "truncated" and less precise scheme, since, on the boundary, we have access only to cells inside the domain.

B.2.3 Temporal formulation[4]

In the NSCBC method of the previous section, wave computations require spatial derivatives and computing them can be difficult and noisy. An alternative solution is to use time variations to evaluate $\mathcal{R}_{BC}^P$: in the temporal formulation originally introduced by *Thompson* [152], the ∂W are defined as

$$\partial W = \frac{\partial W}{\partial t}\Delta t = \texttt{strength} \tag{B.18}$$

Characteristic variables variations are then calculated as a temporal variation (not a temporal derivative) of primitive (or conserved) variables. The computation of the variations of characteristic variables `strength` from the residuals $\mathcal{R}^P$ (as detailed in section B.2.1) is then performed using the **full residual approach**. In this case the total residual $\mathcal{R}^P$ is used for $\mathcal{R}_{BC}^P$ so that $\mathcal{R}_U^P = 0$ in eq. B.3. The predicted variations in conservative variables are now

$$\partial U = -\mathcal{R}^P \Delta t \tag{B.19}$$

where $\mathcal{R}^P$ is the actual residual calculated by AVBP before the application of boundary conditions. This means that only time changes are used to compute waves and there is no need for normal spatial gradients. Now predicted variations of characteristic variables can be computed from the variations of conservative variables using the left passage matrix L^U.

$$\texttt{strength}^P = \partial W = L_U \partial U = -L_U \mathcal{R}^P \Delta t \tag{B.20}$$

All waves going out of the domain are left unchanged in $\texttt{strength}^P$ while corrected incoming waves $\texttt{strength(in)}^C$ are computed. Having modified $\texttt{strength(in)}^P$, the corrected $\mathcal{R}_{BC}^C$ is obtained, as for the spatial formulation, by :

$$\mathcal{R}_{BC}^C \Delta t = (\mathcal{R}_{BC}^P - \mathcal{R}_{BC}^{in,P} + \mathcal{R}_{BC}^{in,C})\Delta t \tag{B.21}$$

[4] $iwave = 2$

where :

$$\begin{aligned} \Delta t\mathcal{R}_{BC}^{P} &= R_U\texttt{strength}^{P} \\ \Delta t\mathcal{R}_{BC}^{in,P} &= R_U\texttt{strength(in)}^{P} \\ \Delta t\mathcal{R}_{BC}^{in,C} &= R_U\texttt{strength(in)}^{C} \end{aligned} \tag{B.22}$$

and U^{n+1} can finally be obtained by Eq. B.4 :

$$U^{n+1} = U^n - \mathcal{R}_{BC}^{C}\Delta t \tag{B.23}$$

B.3 Lois de paroi

Le principe de fonctionnement des lois de paroi adiabatiques et non-adiabatiques sont présentés respectivement dans les Chap. B.3.1 et B.3.2. Pour plus de détail, nous invitons le lecteur à se reporter à la thèse de *Patrick Schmitt* [132] qui a implémenté et testé ce traitement, ainsi qu'à l'article paru dans *J. Fluid. Mech.* [133]. Il s'agit d'une loi basée directement sur les approches RANS classiques. Cette loi a été testée en détail dans des canaux turbulents en termes de frottements, de flux de chaleur et de profils de vitesse [132].

B.3.1 Lois de parois adiabatiques

La loi de paroi adiabatique fonctionne selon le principe suivant. Le cisaillement à la paroi $\tau_{wall} = \rho u_\tau^2$ est calculé de façon itérative sur chacune des faces du mur avec :

- La hauteur de la cellule y_{wall} perpendiculaire au mur.
- La vitesse moyenne u_2 des premiers point dans l'écoulement[5].
- La viscosité ν_{wall} et la densité ρ_{wall} au mur.

Les variables adimensionnées par la distance au mur et la vitesse dans la couche limite sont définies par :

$$y^+ = \frac{y_{wall}\, u_\tau}{\nu_{wall}} \qquad u^+ = \frac{u_2}{u_\tau} \tag{B.24}$$

Ensuite, la vitesse de frottement est calculée suivant la valeur de y^+, soit par une relation linéaire (Eq. B.25), soit par une loi de paroi logarithmique (Eq. B.26).

$$y^+ \leq 11.445 \quad : \qquad u^+ = y^+ \tag{B.25}$$

$$y^+ > 11.445 \quad : \qquad u^+ = \kappa^{-1}\ln(Ey^+) \tag{B.26}$$

$$\text{avec} \quad \kappa = 0.41 \qquad \text{et} \qquad E = 9.2$$

[5]La vitesse u_2 est en fait la moyenne de tous les points de la cellule collée contre le mur qui ne sont pas sur le mur lui-même.

De plus, le flux de chaleur normal et la vitesse normale au mur sont fixés à zéro. Ainsi, la partie "Dirichlet" de cette condition limite est équivalente à un mur glissant, ce qui implique un traitement particulier des coins [132].

B.3.2 Lois de parois non adiabatiques

On peut faire évoluer la condition de loi de paroi adiabatique présentée au chapitre B.3.1 afin d'imposer des pertes thermiques. La température au mur T_{wall} permet tout d'abord de calculer les propriétés thermodynamiques $(\nu_{wall}, \rho_{wall}, C_{p,wall})$. Ensuite, en utilisant la température moyenne T_2 des premiers points dans l'écoulement[6], on peut définir la température adimensionnée :

$$T^+ = \frac{\rho_{wall}\, C_{p,wall}\, u_\tau (T_{wall} - T_2)}{q_{wall}} \tag{B.27}$$

$$\text{avec} \quad q_{wall} = \frac{T_{ref} - T_{wall}}{R_{wall}} \tag{B.28}$$

Ayant déjà déterminé la vitesse de frottement u_τ, la température au mur est calculée suivant la valeur de y^+ selon une loi similaire à celle pour la vitesse (Eq. B.25 & B.26).

$$y^+ \leq 11.445 \quad : \qquad T^+ = Pr\, y^+ \tag{B.29}$$

$$y^+ > 11.445 \quad : \qquad T^+ = \kappa^{-1} Pr_t \ln(F y^+) \tag{B.30}$$

$$\text{avec} \quad \kappa = 0.41 \qquad \text{et} \qquad F = 2.96$$

Il est important de noter que lorsque $R_{wall} \to \infty$, le comportement de la loi de paroi tend vers la loi adiabatique, et lorsque $R_{wall} \to 0$, il tend vers une loi isotherme. Cette approche permet d'éviter de specifier la température aux parois et constitue une première approche vers un calcul dual combustion / thermique dans les parois.

[6] La température T_2 est en fait la moyenne de tous les points de la cellule collée contre le mur qui ne sont pas sur le mur lui-même.

Annexe C

Images en couleur

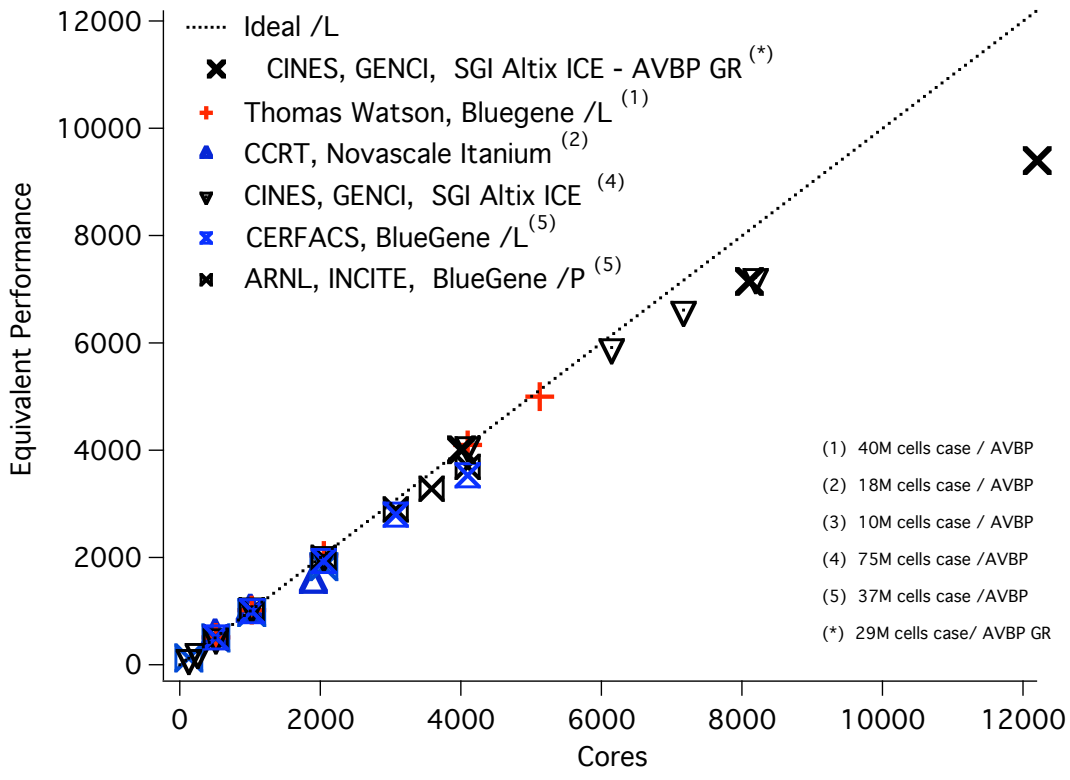


FIG. C.1 - *Speedup du code* AVBP *sur deux maillages à respectivement 5 millions et 40 millions de cellules [145, 146].*

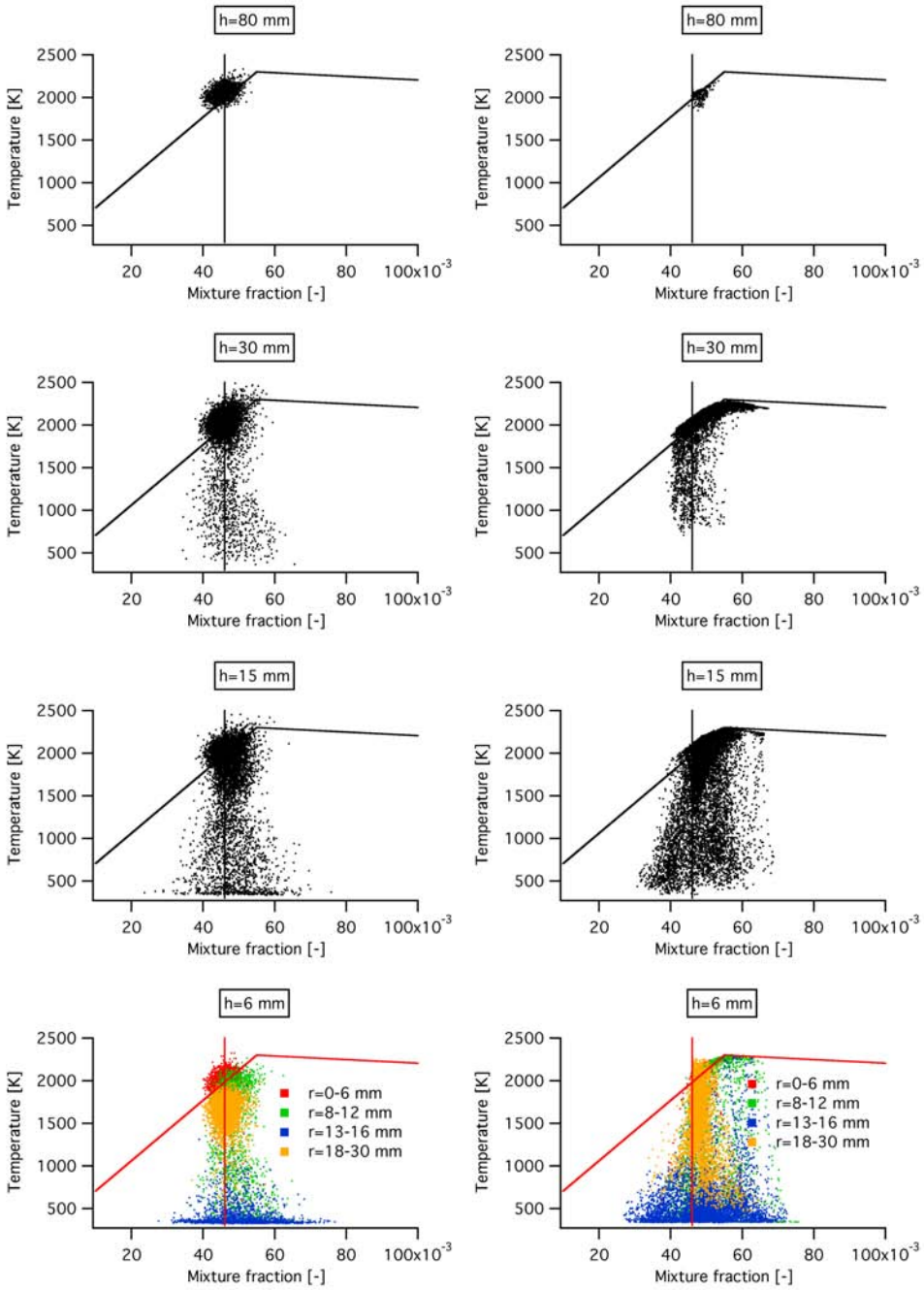


FIG. C.2 - *Version couleur de la figure 8.8.*

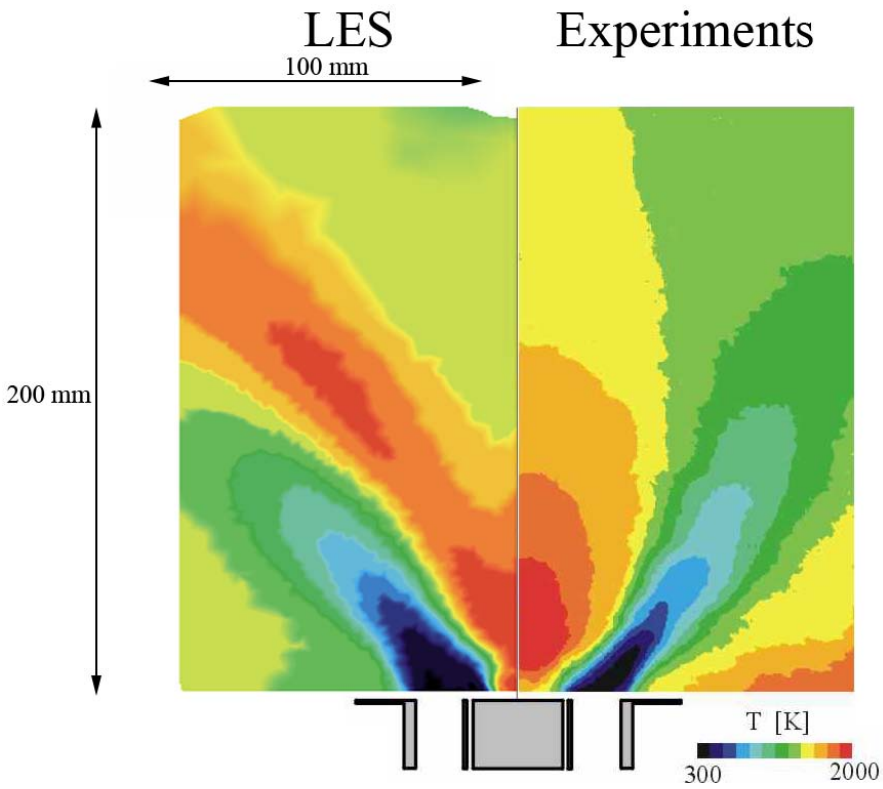


FIG. C.3 - *Averaged LES (left) and experimental (right) temperature fields.*

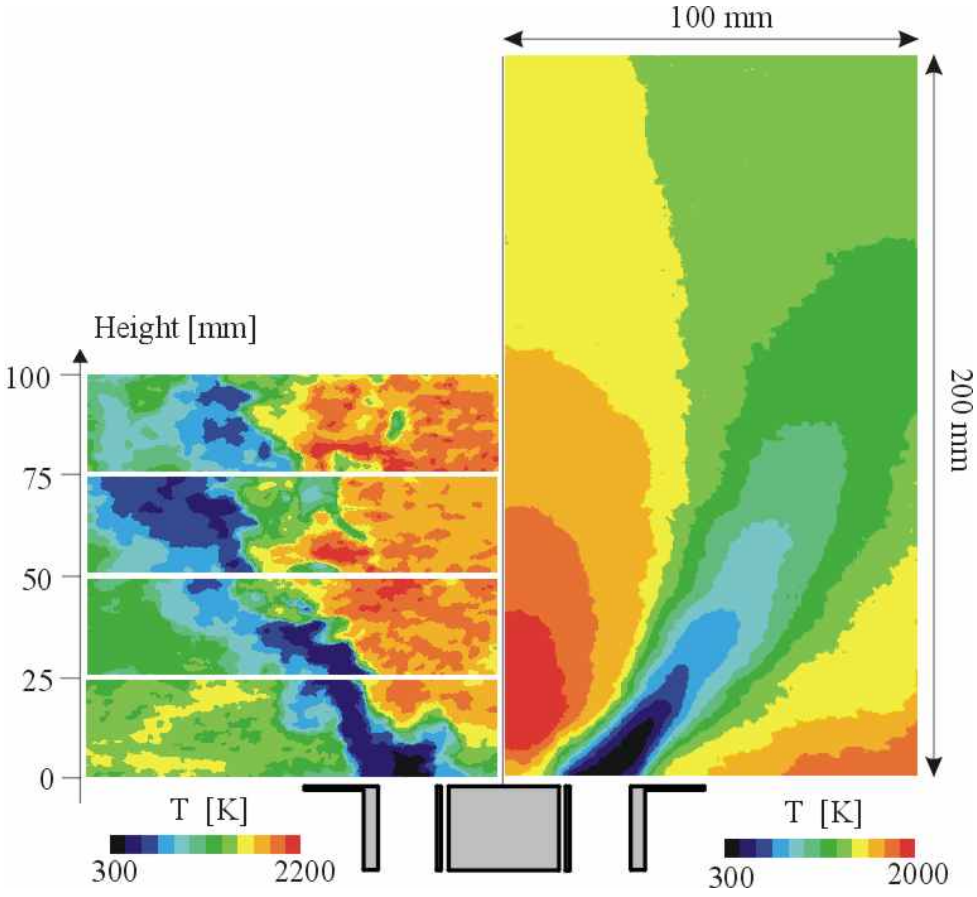


FIG. C.4 - *Experimental temperature fields. Instantaneous (left) and averaged (right).*