

THESE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *Institut National Polytechnique de TOULOUSE*
Discipline ou spécialité : *Dynamique des Fluides*

Présentée et soutenue par *Anthony ROUX*
Le *2 Juillet 2009*

Simulation aux Grandes Echelles d'un statoréacteur

JURY

M. Massot	EM2C, Professeur	Rapporteur
D. Veynante	EM2C, Directeur de Recherche	Rapporteur
E. Dufour	MBDA, Docteur/ingénieur	Examinateur
G. Lavergne	ONERA, Professeur	Examinateur
G. Searby	IRPHE, Directeur de Recherche	Examinateur
N. Bertier	ONERA, Ingénieur de Recherche	Examinateur
S. Wey	DGA, Correspondant	Membre invité
T. Poinsot	IMFT, Directeur de Recherche	Co-directeur de thèse
L. Gicquel	CERFACS, Chercheur senior	Directeur de thèse

Ecole doctorale : *Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés*
Unité de recherche : *CERFACS*
Directeur de Thèse : *Laurent GICQUEL*
Co-Directeur de Thèse : *Thierry POINSOT*

Réf. CERFACS : TH-CFD-09-65

Résumé

La conception d'un statoréacteur bénificie aujourd'hui des progrès divers des outils numériques permettant par la même occasion d'alléger les différentes étapes préliminaires de tests en géométrie réelle nécessaires au développement de telle configuration. L'objectif de cette thèse est de développer une méthodologie s'appuyant sur la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) afin de contribuer à la validation de ce nouvel outil numérique pour la simulation de statoréacteur et ainsi de contribuer à la compréhension des phénomènes mis en jeu dans ces chambres de combustion. L'outil numérique est tout d'abord adapté pour la simulation des écoulements réactifs fortement turbulents avec un accent mis sur la gestion des chocs avec des schémas centrés et la discrétisation de la convection pour la simulation Eulérienne de la phase dispersée. La configuration cible est le "Statoréacteur de Recherche" étudié expérimentalement par l'ONERA. Sa simulation est réalisée de manière graduelle. Tout d'abord, il est montré que la simulation de la totalité de la configuration, y compris les diffuseurs d'entrée où se positionne un réseau de choc, est essentielle afin de considérer une géométrie acoustiquement close pour reproduire correctement les modes d'oscillation du statoréacteur. La pertinence du schéma cinétique est aussi étudiée et il est montré l'importance de bien reproduire l'évolution de la vitesse de flamme adiabatique pour une plage de richesse grande, en raison du régime de combustion partiellement prémélangé. Finalement, trois cas à richesse différente sont simulés et un excellent accord est trouvé avec l'expérience. La phénoménologie et les mécanismes pilotant la combustion sont alors étudiés pour ces trois cas.

Mots-clés : Simulations aux Grandes Echelles, Statoréacteur, Turbulence, Instabilitiés de combustion, Ecoulement Diphasique.

Abstract

Design of ramjets benefits today from the progress of numerical tools which relieve the various test stages of real engines that remain necessary for the development of such a kind of configuration. The objective of this dissertation is to develop a methodology based on the Large Eddy Simulation (LES) to contribute to the validation of this new type of advanced numerical tool for the simulation of ramjets and improve the understanding of combustion in these devices. The numerical tool is first adapted for the simulation of highly turbulent reacting flows with emphases on the management of shocks with centered schemes and the discretization of convection for the Eulerian simulation of the dispersed phase. The target configuration is the "Research ramjet" experimentally studied by ONERA. Simulation is carried out gradually. First, it is shown that the simulation of the entire configuration, including diffusers at the inlets where shocks appear is essential to consider an acoustically close geometry to properly reproduce the oscillation modes of combustion. The relevance of the kinetic scheme is also studied. It is shown that reproducing the evolution of the adiabatic flame speed for a wide range of equivalence ratio is critical because of the partially premixed combustion regime involved in this configuration. Finally, three different cases are simulated and excellent agreement is found with experimental data. The phenomenology and the different mechanisms governing combustion are studied for these three cases.

Keywords : Large-Eddy Simulation, Ramjet, Turbulence, Combustion instabilities, Two-Phase Flows.

Table des matières

Remerciements **9**

Introduction **11**

1 Introduction Générale **13**

1.1 La propulsion par statoréacteur 15

1.2 Etat de l'art 18

1.3 Motivations et objectifs de l'étude 26

1.4 Organisation du manuscrit 27

I Modèles physiques et numériques pour la simulation aux grandes échelles **29**

2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs **35**

2.1 Équations et variables conservatives 35

2.2 Variables thermodynamiques 36

2.3 Équation d'état des gaz parfaits 37

2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces 37

2.5 Diffusion de la chaleur 38

2.6 Coefficients de transport diffusif 38

2.7 Cinétique chimique 39

3 Équations de conservation pour la phase dispersée **41**

3.1 Approche Lagrangienne 41

3.2 Approche Eulérienne 42

3.3 Equations de conservation eulériennes 44
3.4 Modèles de fermeture 51

4 Équations pour la SGE diphasique réactive 61
4.1 Équations LES pour la phase gazeuse 61
4.2 Modèles de sous-maille 64
4.3 Équations LES pour la phase dispersée 65
4.4 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée 71
4.5 Modèle de combustion turbulente 72

5 Approche numérique 79
5.1 Le code AVBP 79
5.2 Discrétisation *cell-vertex* 79
5.3 Schémas numériques 83
5.4 Modèles de viscosité artificielle 83

6 Méthodes pour la capture de chocs 87
6.1 Problématique 87
6.2 Les Méthodes de capture de choc 88
6.3 Comparaison des méthodes 90

7 Outils de post-traitement et d'aide à la compréhension 95
7.1 Les cartes spectrales 95
7.2 Le solveur de Helmholtz 95
7.3 La Décomposition en Modes Propres (*POD*) 96
7.4 Exemple d'application des trois diagnostics 98

II Simulation aux Grandes Echelles d'un statoréacteur 107

8 Présentation de la configuration 113
8.1 Le programme "Statoréacteur de Recherche" 113

8.2 Configuration 117

9 Topologie de l'écoulement à froid 125

9.1 Structure de l'écoulement moyen 125

9.2 Structure de l'écoulement instantanné 131

10 Calculs réactifs de la géométrie simplifiée 133

11 Impact de la cinétique chimique 171

12 Phénoménologie de la combustion au sein du "Statoréacteur de Recherche" 213

12.1 Topologie de l'écoulement moyen 214

12.2 Résultats instationnaires 222

12.3 Processus de combustion dans le statofusée 228

12.4 Conclusion 255

III Stratégie numérique pour la simulation diphasique de statoréacteurs 257

13 Définition d'un schéma adapté à la simulation de la phase dispersée 263

13.1 Les schémas à résidus distribués ou *RDS* 263

13.2 Adaptation des schémas au formalisme Eulérien 268

13.3 Présentation de la méthode *FCT* 270

14 Expériences numériques 275

14.1 Convection 275

14.2 Tourbillons de Taylor-Green 279

14.3 Croisement de jets : la question des δ-chocs 281

14.4 Conclusion 281

15 Turbulence homogène isotrope chargée en particule 283

15.1 Description du cas test 283

15.2 Propiétés intégrales 285

15.3 Champs instantanés de la phase dispersée 287
15.4 Comparaison des trois schémas sur le maillage *Tetra2* 287
15.5 Conclusion 290

16 Application à une chambre académique : le banc MERCATO de l'ONERA 291
16.1 Contexte 291
16.2 Configuration 292
16.3 Paramètres numériques 293
16.4 Résultats moyens 295
16.5 Résultats instantanés 298
16.6 Conclusion 299

Conclusion 301

Bibliography 302

Appendix 321

A Adaptation des schémas *RDS* au formalisme Eulérien 321

B Article soumis aux Compte-rendus de mécanique 327

Remerciements

Chuck Norris peut diviser par zéro.[1]
AVBP aussi.

Cette thèse a été effectuée au sein de l'équipe CFD du CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) et financée par une bourse DGA. Je tiens donc à remercier Jean-Claude ANDRE pour m'avoir permis d'effectuer cette thèse dans les meilleures conditions.

Je tiens à remercier sincèrement tous les membres du jury pour m'avoir fait le plaisir et l'honneur d'accepter de juger mon travail. Merci à Marc MASSOT et Denis VEYNANTE d'avoir accepter d'être rapporteurs et avoir soulevé des questions intéressantes. Je remercie également Emmanuel DUFOUR, Gerard LAVERGNE et Nicolas BERTIER pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Enfin, je remercie Geoff SEARBY pour avoir tenu le rôle de président du jury et avoir lancé ma soutenance dans les meilleures conditions.

Mes remerciements suivants vont pour les personnes qui m'ont encadrées, en espérant qu'ils soient plus réussis que ceux donnés le jour de ma soutenance (ah émotion quand tu nous tiens ! ! !) : le formidable[2] Thierry "TP" POINSOT et son fameux "*hum, tu devrais regarder ça plutôt*" qui a ainsi su me recadrer aux bons moments (avec un certain temps de latence de ma part il est vrai) et m'apprendre tant de choses. Je garderai avec plaisir ses différents envois i-phone ! Il reste le non moins excellent Laurent GICQUEL. Je ne verserai pas une petite larme, mais il me plaît d'avoir été son premier "vrai" thésard[3]. J'ai apprécié nos différents échanges et sa manière de nous apprendre la vie : il suffit de lui poser une petite question et après nous avoir répondu qu'il ne sait pas, on est assailli d'informations toutes plus intéressantes les unes que les autres.

Une pensée particulière va pour Nicolas BERTIER avec qui j'ai eu le plaisir de passer quelque temps à l'ONERA Châtillon et collaborer les années suivantes. Il a su apporter un regard extérieur à mon travail et sans cette comparaison avec le code de l'ONERA, je n'aurais peut-être pas eu de tels résultats.

Je tiens également à remercier Marie LABADENS, la secrétaire de la CFD team qui a su faciliter mon quotidien. Il faut maintenant faire honneur à l'organe essentiel du CERFACS, C.S.G, trois lettres barbares qui représentent la force tranquille qui nous permet de lancer des calculs sur des machines performantes, avec des codes qui compilent, et surtout de stocker nos résultats (je sais j'ai abusé tout au long de ses quatre années) sur différents comptes CFD voire ALGO voire Electro-Mag... Merci donc à Isabelle, Fabrice, Patrick, Nicolas et Gérard, personne que j'ai du le plus embêter à force de lui demander

[1] www.chucknorrisfacts.fr

[2] oui je sais...

[3] bon pour Thierry, son 153-ème, c'est moins symbolique...

1 Go de rallonge, puis 1, puis 10, puis 10, puis 20, puis 100, puis 100... (je vous laisse imaginer la suite).

Ces trois, hum quatre, années passées au CERFACS ne se seraient pas si bien déroulées sans tous les post-doctorants, doctorants et stagiaires avec qui j'ai eu l'occasion de travailler, déjeuner, jouer au foot voire tout simplement faire une pause. Merci donc aux Algecos (! ! !) : Olivier, Jean-Michel (allez, Jean-Matthieu), Benoît, Marlène, Félix et j'en passe, le CERFACS, avec les autres ! Non je plaisante : Antoine, Pierre, Jorge, Camillo (pour les fourmis horribles), Benedetta, Marta et j'en passe... Merci aux vieux : Olivier "Papy" VERMOREL, encyclopédie vivante du football, Eleonore "RIBER" VERMORELLE, Simon MENDEZ sans oublier Gabriel[4] *Pablo* STAFFELBACH avec qui j'ai passé d'excellents moments ! Papy et Gaby ont fourni un boulot énorme pour rendre une version tagguée à temps (oui le 16 Juillet 2008 heu 2009 pour la 6.1 mais boulot énorme quand même)... si leur boulot a été apprécié, leur compagnie encore plus !

Que Chuck Norris me foudroie si j'ai oublié quelqu'un[5].

Finalement, on en arrive aux meilleurs ! Tout d'abord le carré des poètes avec Monsieur Guillaume "Dindon" BOUDIER et Monsieur Jacques "typiquement" LAVEDRINE, l'un qui n'est capillairement battu que par Tina Turner et l'autre qui bat sans équivoque Bernard Pivot et Armand Jeanot pour l'utilisation des mots les plus longs. Il y a aussi Claude SENSIAU bien sûr avec qui j'ai commencé mon stage et qui m'a mis 8 mois dans la tête à la fin de la thèse, vas, fils, je te pardonne ! De toi je retiendrai que le gène du créneau est dans le chromosome Y ! Oui Claude c'est de la mysoginie (c'est bien comme ça que ça s'écit Jacques ?). Et le petit os qui va avec, c'est Nicolas LAMARQUE, alias Jeckel, Tic, Joe et tant d'autres surnoms qui ont été parsemés dans AVBP au fil de nos travaux, avancées scientifiques et découvertes si surprenantes (on citera en particulier, si on ne compile pas, ça ne marche pas ou le "Allons-y gaiement !" comme il disait en programmant). Merci de m'avoir ouvert la voie des schémas numériques et de la plus belle des simulations : la convection de gaussiennes. Etant mon Téplus, Orléanais de souche (on peut en avoir plusieurs), on a tant de chose en commun, l'humour, l'amour de la belle musique, les douze travaux d'Astérix.. ah et oui du boulot, non Nico je n'oublie pas ! Merci pour ce bon temps passé, comme cette féria de Béziers et cette discussion à 6h du mat' avec des personnes pleines d'avenir ! (Désolé encore Lara...).

Et on termine avec les plus beaux (en plus des meilleurs) : Florent "Floflo" DUCHAINE et Matthieu "Mateusz" LEYKO, le premier qui m'a accompagné depuis toujours, soit depuis quatre ans, de bureau en bureau, on a voyagé mais on ne s'est pas quitté. Sportif confirmé, picoleur de talent (d'ailleurs lorsque ces deux talents se rencontrent, ce sont les tatamis qui trinquent !), je réalise la chance que j'ai eu de passer ces quelques années avec lui ! J'ai eu la joie de découvrir que son humour était hors-norme, d'abord discret puis pas assez ! Merci d'être avec Mel, je me souviens encore de ce petit crumble qui m'a fait oublié ces soixante kilomètres Maison-Chez toi-Aéroport-chez toi-chez moi-aéroport-chez moi-cerfacs ! Le second, également extraordinaire même si un peu polonais, a eu raison de laisser tomber les études de coffrage car il est brillant (Et pas seulement du front) ! Homme du 3D, non du 0D, il a su se sublimer pour laisser tomber les études trop compliquées comme FUELCHIEF pour revenir aux bases. J'ai adoré être avec lui, observer quelque fois son meilleur profil, passer du bon temps, partager un barbecue... tant de choses qui vont me manquer... Expérimentateur de talent, il a su allier études théoriques et utilisation détournée d'une gazinière pour observer flammes de diffusion, flammes liftées, extinction, flammes attachées, flammes de prémélange (là, j'étais moins fan...)...

[4]Tourne les boutons ! ! Les boutons tout ronds et je te chanterai une chanson...

[5]Saviez-vous qu'il avait compté jusqu'à l'infini ? Deux fois !

Finalement, on arrive à Thomas “Désolé” Schmitt, le plus supercritique de nous tous. Depuis SUPAERO en deuxième année, on a fait un petit bout de chemin ensemble, du Marathon Shell au CERFACS en passant par le Hellfest et le concert d'Immortal ou les défaites de Strasbourg... Finalement, un cycle s'est tourné : je l'ai connue en 2003, tout frais, tout fringuant avec un magnifique brushing, il s'est ensuite laissé poussé les cheveux et finalement, maintenant parisien, il est rentré dans les rangs... snif !

Quelques pensées iront aussi à Chuck Norris et Steven Seagal. Ils ont bercé cette thèse de leur plus merveilleux dons aux mondes : leurs films et leur traduction en franąis ! Un grand merci à Robin donc pour avoir débuté une collection de DVD à faire palir la médiathèque José Cabanis. Même si ça n'a pas toujours été facile, je pense en particulier à The Creeps, de Charles Band (un grand en passant) avec une histoire qui avait tout pour plaire mais qui finis en queue de boudin : un savant fou ramène à la vie Dracula, le loup-garou, la momie, et le monstre de Frankenstein mais en version nain... Weng-weng et Gros Pecs, je ne vous oublie pas !

Une autre pensée va pour tous les amis, par ordre de préférence, ou plutôt dans le désordre : JB, José, Vinh, Robin, Sandrine, Simon, HJ+SH+HJ, Anne-C, Gilles. MERCI pour ses soirées passées ensemble, à SUPAERO ou ailleurs !

Merci enfin à toute ma famille, Papa, Sonia, Cédric, Arthur (Chuis son tonton !) et Anne pour leur patience, leur soutien et toutes ses choses dont je n'ai jamais manqué. Finalement, un grand merci à ma Maman, qui ne m'a jamais quittée, c'est à elle que je dédie cette thèse.

Chapitre 1

Introduction Générale

Le statoréacteur à combustion subsonique (*ramjet*) est un moteur aérobie pour la propulsion supersonique. C'est l'un des moteurs les plus simples des moteurs à réaction. Il ne contient effectivement aucune partie mobile, d'où le préfixe *stato*. Ce moteur se révèle être très bien adapté pour la réalisation de missions aussi bien civiles (lanceurs récupérables, véhicules supersoniques) que militaires (missiles).

Un statoréacteur simplifié est décrit en Fig. 1.1 ainsi que le cycle thermodynamique suivi par un tel propulseur (Joule-Brayton). Lors du changement d'état lié au chemin $A \rightarrow B$, la vitesse en entrée d'air doit être réduite de manière isentropique tout en gardant une pression dite "bélier"[1] et une température élevée. Dans un second temps, le passage $B \rightarrow C$, le processus de combustion intervient (de manière isobare) avant que l'énergie produite ne soit convertie en énergie cinétique $C \rightarrow D$ dans la tuyère de sortie afin de produire la poussée nécessaire à la propulsion de l'engin.

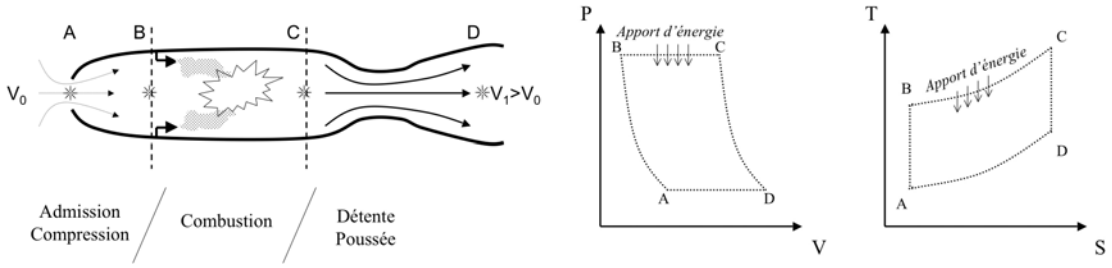


FIG. 1.1 - *Représentation simplifiée d'un statoréacteur et cycle de Joule-Brayton (diagramme P-V et T-S)*

Cette poussée peut s'évaluer en faisant un bilan de dynalpie qui exprime la variation d'énergie entre l'entrée et la sortie du système. La dynalpie s'exprime comme $h* = u + Pv + v^2/2$ où u est l'énergie interne massique, P la pression et v la vitesse. Cette relation peut également s'exprimer à partir de l'enthalpie massique par $h^* = h + v^2/2$. L'application du premier principe donne alors $h_s^* - h_e^* = w_u + q$ où les indices s et e désignent respectivement l'entrée et la sortie du système fermé, w_u le travail utile et q la quantité de chaleur massique. L'application de cette relation à un statoréacteur donne, en considérant que le travail des forces sur les parois s'annule (hypothèse de symétrie de la configuration) et que les sections d'entrée et de sortie sont égales :

[1] Ce terme est traduit en anglais par "ram" ce qui vaut le nom de ramjet au statoréacteur

$$F = \underbrace{[\dot{m}V]_s}_{\text{Poussée brute}} - \underbrace{[\dot{m}V]_e}_{\text{Traînée de captation}} + \underbrace{(P_s - P_e)S}_{\text{Correction de pression}} \tag{1.1}$$

où F représente la poussée délivrée par le statoréacteur. Trois termes se distinguent dans le bilan aéropropulsif : le premier est la *poussée brute* correspondant aux conditions en sortie de tuyère avale, le second est la *traînée de captation* liée aux conditions amont et enfin le dernier terme prend en compte le fait que la tuyère n'est pas adaptée (égalité des pressions d'entrée et de sortie). La poussée est ainsi proportionnelle au carré de la vitesse et rend le statoréacteur efficace. Toutefois, on remarque que le système a besoin d'une vitesse initiale pour comprimer l'air (et donc d'un propulseur auxiliaire). De plus, le fonctionnement d'un statoréacteur ne devient intéressant en terme de bilan d'énergie qu'à partir de Mach 2 environ comme le montre la Fig. 1.2 qui représente la vitesse de croisière exprimée en nombre de Mach en fonction de la poussée spécifique pour deux carburants différents (hydrocarbure et hydrogène) et différents systèmes propulsifs. La famille des statoréacteurs s'insère entre les turbomachines et les statoréacteurs à combustion supersonique. La limite haute de la vitesse de croisière est due au passage du domaine supersonique à l'hypersonique où les pertes dégradent fortement les performances du moteur. Afin de palier à ce problème, la solution est alors non plus de diminuer la vitesse jusqu'au subsonique mais de la ralentir jusqu'à un nombre de Mach proche de deux. On parle alors de statoréacteur à combustion supersonique ou *superstatoréacteur*[2]. Les processus de combustion deviennent alors de plus en plus complexes.

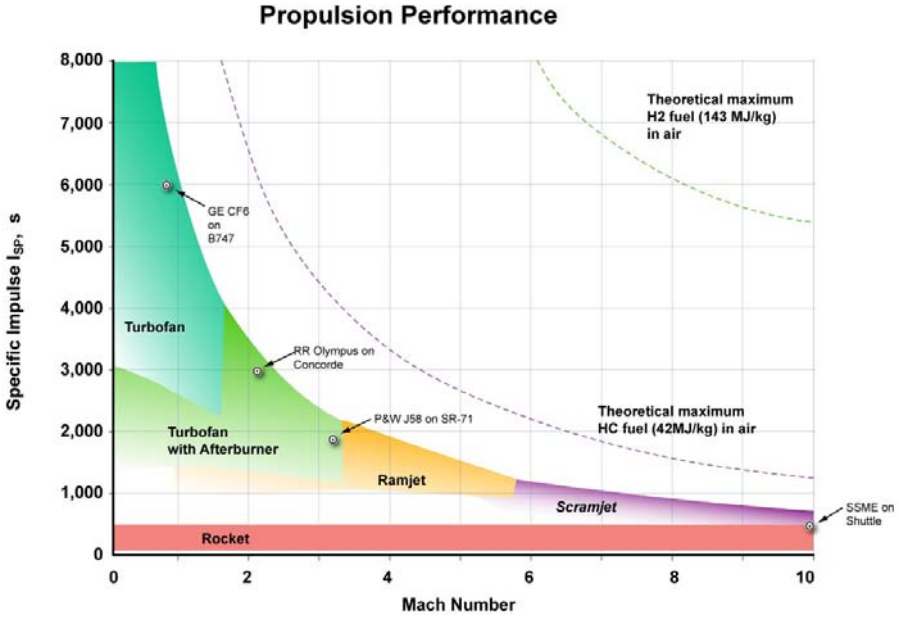


FIG. 1.2 - *Régime de fonctionnement de différents propulseurs : impulsion spécifique en fonction du régime de croisière. (Crédits : Kashif Khan)*

[2]"scramjet" en anglais

1.1 La propulsion par statoréacteur

La propulsion par statoréacteur a été inventée par le français René Lorin en 1907 et décrite pour la première fois dans la revue *l'aérophile* dans un article intitulé "Propulseur par réaction directe". Toutefois, le premier prototype n'est apparu que bien plus tard. En effet, la mise en fonctionnement de ce type de propulseur nécessitait une vitesse amont trop importante à l'époque (plusieurs centaines de km/h) afin d'obtenir la compression nécessaire pour le mettre en marche.

Les premiers développements réels apparurent au début des années 1930 (Fry, 2004) avec les travaux de Leduc en France, Sanger en Allemagne, Stechkine en U.R.S.S (1929) et Marquardt aux Etats-Unis (1927). Le premier appareil équipé d'un statoréacteur de 1.5 m de diamètre est le *Leduc 010*. Celui-ci fut présenté au salon du Bourget et affichait les folles caractéristiques de 1000 km/h à 30.000 m d'altitude. Les travaux français furent toutefois ralentis par la guerre tandis que russes, allemands et américains poursuivaient de nombreux développements.



FIG. 1.3 - *Le Leduc 010 sur le Languedoc 31. Ce dernier permettait de propulser le prototype à une vitesse suffisante pour mettre en marche le statoréacteur.*

Dans les années 50, des nations comme l'U.R.S.S., la Grande Bretagne ou les Etats-Unis mirent au point des statoréacteurs équipant des missiles et permettant d'atteindre des nombres de Mach proches de 3. En France, des études se multipliaient pour équiper des avions de chasse avec ce système et aboutit au premier vol en 1957 du Griffon II développé par Nord-Aviation (Fig. 1.4). Sa propulsion était alors assurée par un ensemble turbo/statoréacteur. En 1959, il atteignit une vitesse record de 1643 km/h, puis une altitude de 16400 m. Ses performances furent telles à l'époque que les américains décidèrent de participer au financement des essais de l'avion. La dernière marche à franchir fut toutefois fatale : les ingénieurs ne trouvèrent pas le moyen de réduire les gaz en mode statoréacteur (fonctionnement on/off). Des difficultés ont également été rencontrées, en lien avec des interactions entre les deux blocs moteur lors du passage au transsonique. La stabilisation de la combustion dans le statoréacteur était également limitante. En effet, à faible richesse, celle-ci n'était plus assurée ce qui explique que ce bloc a toujours été utilisé en accélération.

Si le Griffon ne passa jamais le stade expérimental et reste le seul avion équipé d'un réel bloc propulsif basé sur un statoréacteur, de nombreux développements suivirent pour l'équipement des missiles (Stataltex de l'ONERA, SA-6 en U.R.S.S ou encore l'ASM-P de l'Aérospatiale). Ce dernier fut développé dans les années 80 et bénéficia des dernières avancées technologiques en particulier pour la régulation



FIG. 1.4 - *Le Griffon II avec ses pilotes, Chalard et Turcat. Le diamètre du système propulsif est d'environ 1,5 m (Crédits : Docavia n° 28).*

du régime de fonctionnement.

D'un point de vue militaire, certains missiles sont équipés de statoréacteurs. En particulier, on peut citer l'exemple du missile *ASMP* (Air-Sol Moyenne Portée) et son successeur l'*ASMP-A* (ASMP Amélioré) développés par EADS[3], missiles nucléaires aéroportés à vocation stratégique et d'ultime avertissement, embarqués sur des avions Mirage 2000N et Super-Etendard.

1.1.1 Design d'un statoréacteur

Ce type de motorisation est léger et simple à construire. Toutefois, des problèmes de conception se posent, en particulier vis-à-vis de la combustion et de sa stabilisation. A ses débuts, le statoréacteur n'utilise qu'une entrée d'air directement alignée avec la chambre principale (Fry, 2004). La stabilisation de la flamme est alors assurée par des accroche-flammes.

Les problèmes de compacité résultant de ce type de configuration ainsi que les problèmes d'intégration du bloc à l'avion en même temps que le propulseur initial menèrent au développement de nouvelles chambres de combustion assurant de manière différente la stabilisation de la flamme. En particulier, une alternative possible est d'utiliser des chambres tourbillonnaires (au même titre que la plupart des turboréacteurs où la flamme est stabilisée dans une zone de recirculation créée par un mouvement de rotation issu de l'injecteur (Lefebvre, 1999)) ou des entrées à prises d'air latérale. Ces prises d'air créent un élargissement brusque et définissent deux zones : le dôme (Fig. 1.6), situé entre les

[3]ex-Aérospatiale/Matra

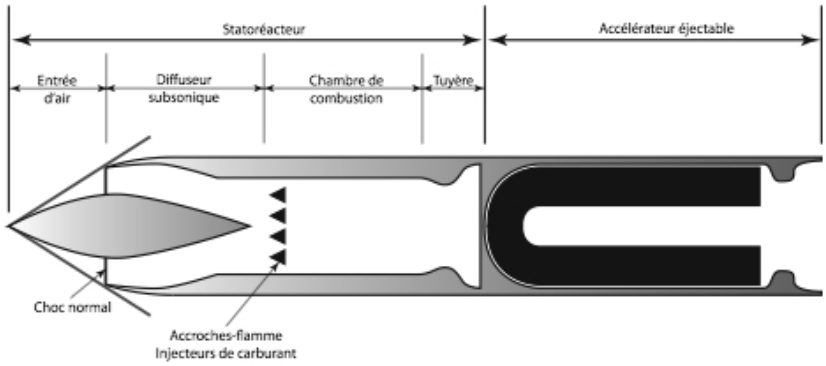


FIG. 1.5 - *Statoréacteur conventionnel avec accroche-flamme (Crédits : Fry (2004); Reichstadt et al. (2007)).*

entrées d'air et le fond de chambre, et le fût principal en aval. Ce concept est une véritable révolution car en plus de la simplification de la géométrie, il permet d'aligner les différents blocs propulsifs. L'expansion brusque crée différentes zones de recirculation qui permettent de stabiliser la flamme.

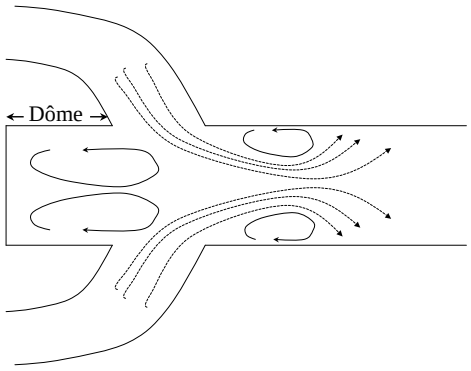


FIG. 1.6 - *Statoréacteur à prise d'air latérale.*

1.1.2 Classification des statoréacteurs

Différentes classes de statoréacteurs peuvent être distinguées en fonction du carburant utilisé et de l'endroit où ce dernier est injecté :

- Le carburant peut tout d'abord être pur et injecté sous trois phases : gazeuse (en particulier pour l'hydrogène, stocké sous forme liquide qui s'évapore avant de brûler), liquide (*Liquid-fueled ramjet* ou LFRJ) ou encore solide (*Solid-fueled ramjet* ou SFRJ).
- Celui-ci peut également provenir d'un générateur de gaz à propergol solide qui doit avoir un faible pouvoir oxydant afin de ne pas consommer trop rapidement tout le carburant.

1.2 Etat de l'art

1.2.1 Mécanismes d'instabilités

Avant de décrire les différents travaux qui ont spécifiquement portés sur l'étude des statoréacteurs ou des configurations à élargissement brusque avec entrées d'air latérales, il convient en premier lieu de s'intéresser aux différents mécanismes qui sont à la base des instabilités qui peuvent apparaître dans de telles configurations. Trois mécanismes principaux peuvent être étudiés.

Les instabilités thermoacoustiques

Les instabilités de combustion sont souvent associées à un couplage avec des ondes acoustiques du système : ce sont les instabilités thermoacoustiques comme décrit pour la première fois par Rayleigh (1870). Celui-ci introduisit en premier la notion de couplage entre les ondes acoustiques propres d'une géométrie et les fluctuations de dégagement de chaleur issues de la combustion. Si ces deux oscillations sont en phase, alors le phénomène est amplifié et l'instabilité[4] apparaît. Le *critère de Rayleigh* a récemment été étendu par Culick (1987) et est toujours en développement (Nicoud & Poinsot, 2005).

On distingue majoritairement deux types de modes acoustiques : les modes à basse et ceux à haute fréquence. Les premiers sont associés à des fréquences jusqu'à quelques centaines de Hertz (100 Hz-800 Hz) et sont liés à des modes longitudinaux, fréquemment rencontrés dans les statoréacteurs (Clark, 1982). Ces phénomènes sont d'autant plus important à prédire qu'ils peuvent interagir avec les chocs et entraîner le désamorçage du col, ce qui est dramatique vis-à-vis du fonctionnement du propulseur. Quant aux modes hautes fréquences, *i.e.* de l'ordre de plusieurs milliers de Hertz (1000 Hz-5000 Hz), ceux-ci sont liés à une activité transverse/radiale dans la chambre de combustion. On distingue en particulier un mode très haute fréquence, le screech (Harrje & Reardon, 1972; Crocco, 1952; Crocco & Cheng, 1956; Culick, 1976, 1977), dont la meilleure définition a été donnée par Rogers & Marble (1956) où le couplage entre les tourbillons en arrière de l'accroche flamme et le premier mode acoustique transverse de la chambre est mis en avant. Si ces instabilités sont souvent néfastes pour la tenue de la chambre, elles affectent d'une manière moindre le fonctionnement du propulseur contrairement aux modes basse-fréquence. Elles ont en effet une amplitude plus faible que les basses fréquences (Abouseif *et al.*, 1984) et peuvent être contrôlées relativement facilement par des vannes ou des haut-parleurs.

Les modes à basses fréquences, comprenant les modes de battement en volume, ont été particulièrement étudiés par Rogers (1980) et sont décrits en Sec. 1.2.3.

Les instabilités aérodynamiques

L'étude des équations d'Euler permet de mettre en avant l'existence de différents types d'ondes convectées à différentes vitesses. Les modes acoustiques ont une vitesse égale à celle de l'écoulement plus ou moins la vitesse du son. Deux autres types d'ondes peuvent être convectées à la vitesse de l'écoulement : les ondes de vorticité et les ondes entropiques. Celles-ci se distinguent des ondes acoustiques par le fait qu'elles ne sont pas liées à des fluctuations de pression.

[4]Le terme d'instabilité peut prendre de nombreuses définitions. On parle ici d'oscillations de pression d'amplitude non négligeable.

Les ondes entropiques représentent les inhomogénéités de température présentes dans l'écoulement, par exemple dues à la combustion. Celles-ci peuvent en particulier réagir avec la tuyère de sortie d'un statoréacteur et se réfléchir en onde acoustique. Elles interviennent également dans le bruit de combustion, tant direct qu'indirect (Leyko *et al.*, 2008). Finalement, celles-ci peuvent également être créées au niveau du diffuseur d'entrée lors du mouvement du réseau de chocs, ces derniers étant caractéristiques d'un saut d'entropie.

Les ondes de vorticité s'apparentent aux instabilités des écoulements cisaillés. On s'attache ici à décrire les modes pouvant apparaître dans un statoréacteur à prises d'air latérales. Dans de telles configurations, deux types de jets se distinguent : d'une part en aval du diffuseur des entrées d'air ou en sortie d'injection de carburant et d'autre part au niveau des entrés d'air dans la chambre de combustion principale où apparaît une compétition entre les jets opposés (problème de jets impactants).

L'interaction de jets impactants n'a été que peu étudiée et est pourtant un sujet essentiel dans la description de l'écoulement dans une chambre à élargissement brusque avec entrées d'air latérales. En effet, que ce soit le mélange ou les différentes zones de recirculation, ces phénomènes dépendent en premier lieu de l'interaction entre les jets. Celle-ci permet également de remplir le dôme d'air et ainsi d'améliorer le mélange, là où la combustion prend place.

Erickson & Olfe (1978) ont étudié la stabilité d'un écoulement à contre-courant d'un fluide incompressible et non-visqueux. Ils ont montré que l'écoulement est stable pour des petites perturbations sinusoïdales en entrée et que deux mécanismes entrent en compétition : d'une part l'instabilité de Kelvin-Helmholtz (cisaillement) qui amplifie les perturbations et d'autre part l'étirement imposé par l'accélération du fluide non-perturbé qui les atténue. Powell (1960) a introduit le concept d'image miroir pour décrire cette compétition entre deux jets : si ceux-ci sont séparés d'une distance H, alors l'écoulement est équivalent à l'impact d'un jet sur une plaque plane située à $H/2$, Fig. 1.7.

La compétition de jets a été étudiée expérimentalement par Nosseir & Behar (1986) et Miau *et al.* (1989). La chambre est bidimensionnelle (Fig. 1.7) et les entrées d'air à section rectangulaire. Les jets impactent l'un sur l'autre à 180°. Les visualisations (Nosseir & Behar, 1986; Nosseir *et al.*, 1987) montrent que les jets sont animés de battements antisymétriques : chaque jet est tour-à-tour dévié vers le dôme. Cette déflexion des jets s'accompagne d'une génération de paire de tourbillons contra-rotatifs. Deux tourbillons de signe opposé sont créés en raison de la compétition des deux jets qui sont déviés l'un après l'autre. Ils expliquent cette génération par les fluctuations de vitesse sur le plan d'impact. L'impact des jets génère des fluctuations de pression qui sont amplifiées par un mécanisme de retour, similaire au modèle *edgetone* qui résulte d'un couplage convectif/acoustique.

L'*edgetone* a été en particulier étudié dans le cadre de l'interaction d'un jet libre avec une plaque plane : le jet développe des structures tourbillonnaires (comme identifiées précédemment) qui sont convectées vers l'aval, viennent impacter la plaque plane et sont réfléchies en onde acoustique. Sous certaines conditions de phase et de gain, une résonance apparaît. Nosseir & Ho (1982) ont écrit cette condition sur la fréquence de résonance f_{res} :

$$\frac{L}{V} + \frac{L \times cos\,(\theta)}{c} = N \times \frac{1}{f_{\text{res}}},$$

où L est la distance entre la plaque plane et l'injecteur, V la vitesse de l'écoulement, c la vitesse du son, θ l'angle de propagation des ondes acoustiques et N un entier. Ce couplage hydroacoustique se retrouve ainsi dans la dynamique de deux jets impactants.

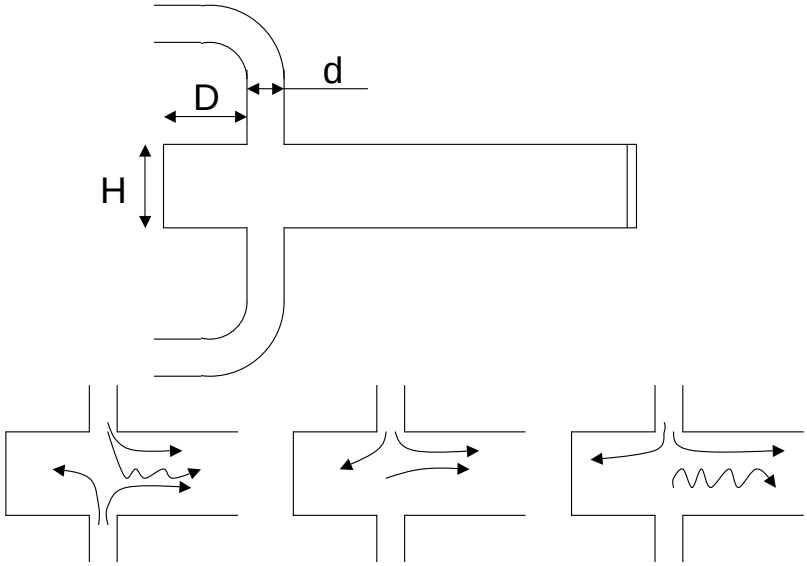


FIG. 1.7 - *Schéma du banc utilisé par Nosseir & Behar (1986) et description du mode de battement antisymétrique et de la génération de tourbillon dans la région d'impact des jets. Chaque jet est tour à tour en partie défléchi vers la région du dôme. Une paire de tourbillons contrarotatifs apparaît dans la région d'impact en raison de la modulation des profils de vitesse.*

L'effet du nombre de Reynolds a été étudié par Nosseir & Behar (1986) ($Re \approx 3000$) et Miau *et al.* (1989) ($Re \approx 20000$) et ces derniers ont montré la limite du modèle de Powell : celui-ci n'est valable que dans le cas de jets laminaires.

Instabilités liées aux chocs dans les diffuseurs des entrées d'air

Les diffuseurs des entrées d'air des statoréacteurs constituent une partie essentielle du bloc propulseur. Ils permettent en effet de fixer le débit ainsi que d'amener la compression nécessaire pour le cycle de Joule-Brayton. Dans des conditions de fonctionnement standard et en fonction du régime considéré (et donc de la pression statique chambre), un réseau de choc plus ou moins complexe s'installe en aval du diffuseur. On notera que plus la pression statique chambre est forte et plus le réseau se déplace vers l'amont. Les niveaux de pression dans la chambre peuvent ainsi perturber le fonctionnement des entrées et plus particulièrement le réseau de choc. Ces effets sont plus ou moins forts : cela va de la détérioration de l'efficacité des entrées d'air au désarmoçage ou au pompage des ondes de choc, ce qui est alors catastrophique (Hsieh *et al.*, 1987; Oh *et al.*, 2005). Les calculs de Culick & Rogers (1983) ont en particulier montré que les chocs dans les diffuseurs peuvent piloter une instabilité.

1.2.2 Caractérisation géométrique des configurations à entrées d'air latérales

Avant toute chose, on notera que peu d'étude sur des configurations quasi-industrielles existent[5]. On peut citer l'exemple de l'*Aquavit* de *Volvo* dans les années 1980 étudié par Sjoblom (1989) en combinant

[5]On parle ici d'études rendues publiques.

deux bancs expérimentaux différents, l'un pour le mélange (analyse du mélange) et l'autre pour le réactif (performances globales seulement et limites de stabilité). Chuang *et al.* (1989) a complété ces études en soulignant la nature tridimensionnelle de l'écoulement avec en particulier la présence de quatre tourbillons hélicoïdaux dans les coins qui permettaient la convection du carburant présent dans le dôme vers l'aval ainsi que leurs effets stabilisateurs sur la flamme. Il a également remarqué un battement des jets à 800 Hz qui permettait périodiquement de laisser passer du fuel vers l'aval lorsque les jets s'éloignaient de l'axe médian. Il a ainsi mis en évidence le blocage aérodynamique créé par l'écoulement d'air provenant des manches.

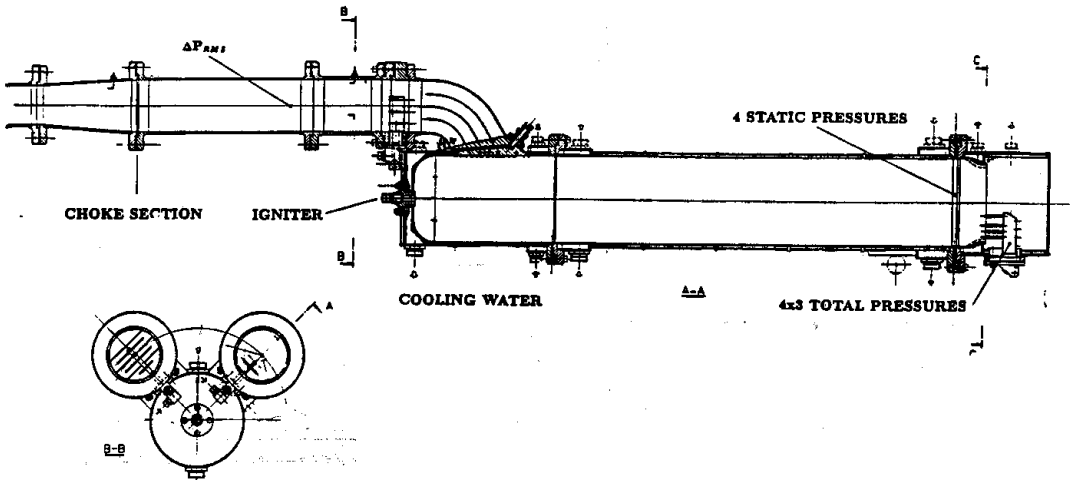


FIG. 1.8 - *Schéma du banc expérimental de l'Aquavit étudié par Sjoblom (1989)*

Les différentes difficultés rencontrées lors de la caractérisation expérimentale de chambres industrielles a motivé la mise en place d'expériences simplifiées permettant de décrire un-à-un les différents phénomènes présents dans un statoréacteur. La première étude expérimentale sur de telles configurations a ainsi consisté à caractériser les différents paramètres géométriques les définissant : angle des manches à air, hauteur/largeur du dôme...

Des études expérimentales sur des configurations de plus en plus complexes furent mises en place. On notera en particulier les travaux réalisés au laboratoire *EM2C* du CNRS/Ecole Centrale par Samaniego *et al.* (1993) et Montazel *et al.* (1992) sur le foyer "LIC" (*Lateral Injection Combustor*). Cette configuration est similaire à celle utilisée par Nosseir & Behar (1986) et se concentre sur les phénomènes bidimensionnels. Le point fort de la manipulation est qu'elle a été fortement instrumentée avec des mesures de vitesses, d'émission de radicaux OH... Un prémélange est directement injecté par les manches à air. Le battement cohérent des jets est observé à froid. En réactif, ce battement antisymétrique est remplacé par un battement symétrique des jets. En régime stable, deux zones de combustion sont détectées, dans le dôme et au droit des manches à air. La recirculation des gaz chauds obtenus après l'allumage permet d'entretenir et de stabiliser la flamme par auto-allumage. A richesse élevée, la combustion dans le dôme disparaît. L'extinction pauvre de la flamme peut s'expliquer par l'apparition du battement antisymétrique des jets, déstabilisant la combustion, qui n'est plus contrebalancé par l'expansion des gaz chauds.

Deux régimes d'instabilité de combustion à basse fréquence sont identifiés, un mode pauvre et un

mode riche. Les auteurs ont montré que ces instabilités sont caractérisées par des battements de jets en lien avec la combustion instationnaire. Cette dernière diffère selon la position dans le LIC : la combustion est pulsée dans le dôme (fluctuation du dégagement de chaleur immobile) tandis qu'en aval des entrées d'air, elle résulte de la convection par l'écoulement de perturbations spatiales de dégagement de chaleur.

Le post-traitement des résultats montrent que ces instabilités résultent du couplage des modes acoustiques du foyer, du battement des jets et de la combustion.

Plus récemment, au début des années 1990, l'ONERA a lancé un programme de recherche nommé "Statoréacteur de Recherche" (Ristori *et al.*, 1999) afin d'améliorer la compréhension des phénomènes intervenant dans de tels propulseurs ainsi que pour l'amélioration des codes de prévision numérique. En effet, à la suite du développement de l'ASMP, des besoins se sont faits sentir afin d'alléger les coûts de développement des chambres de combustion.

D'autres configurations existent, plus ou moins connues, plus ou moins confidentielles.

1.2.3 Etude expérimentale des instabilités dans un statoréacteur à prise d'air latérale

Suite aux nombreuses études de statoréacteurs, la problématique de leur stabilité a vite été identifiée comme étant cruciale pour le succès de ces moteur. A ce titre, divers montages expérimentaux ont été dédiés à leurs études.

La prédiction des instabilités longitudinales est de première importance. Ces modes ont été étudiés en particulier par Clark (1982) pour l'écoulement réactif dans un statoréacteur à prise d'air latérale (angle de 60°) avec injection de carburant dans les manches. La configuration est montrée par la Fig. 1.9. L'utilisation d'un solveur 1D acoustique a permis de relier les modes longitudinaux présents dans la chambre aux premiers modes acoustiques (avec plus ou moins de succès, les impédances d'entrée n'étant pas prises en compte ainsi que la combustion dans le fût principal et les effets de Mach non nul). En faisant varier soit la longueur des manches, soit la longueur du fût, différents modes longitudinaux (cf Fig. 1.10) sont excités aux environs de 300 Hz. Pour la configuration de référence, le second mode longitudinal est excité. En augmentant la longueur des manches, le troisième mode est excité tandis que si la longueur du fût est diminuée, deux modes apparaissent à 300 et 400 Hz environ et sont caractéristiques des deux précédents modes. Le résultat le plus important a été obtenu pour des régimes proches de l'extinction pauvre : un autre mode apparaît à plus basse fréquence ($\approx$ 130 Hz) et pour lequel le fût oscille en phase : ce mode est identifié au mode de volume.

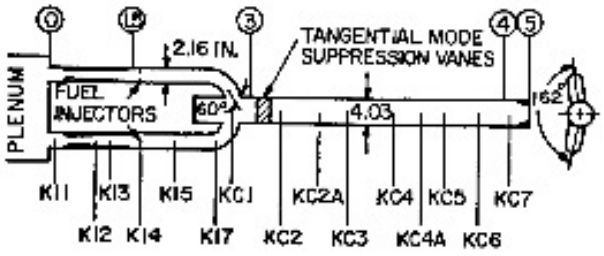


FIG. 1.9 - *Schéma du banc utilisé par Clark (1982)*

Les prédictions du solveur acoustique n'étant pas excellentes, en particulier dans les manches à air

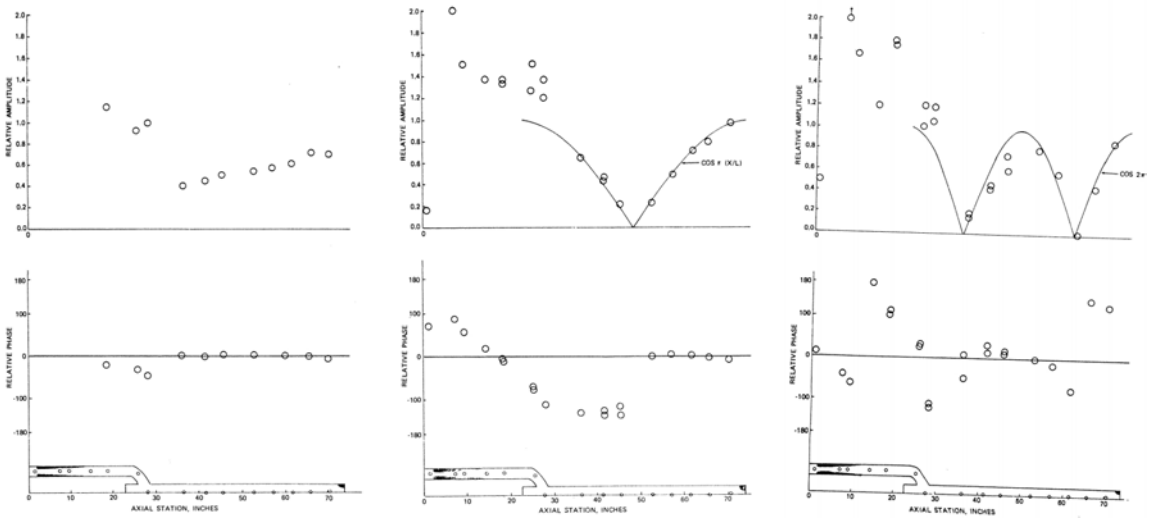


FIG. 1.10 - *Amplitude et phase des modes identifiés par Clark (1982).*

où l'importance du choc normal dans le diffuseur n'est pas négligeable, Humphrey (1986) a étudié les différentes interactions acoustique/entropique dans la chambre. Cette motivation résultait des récents résultats obtenus par Abouseif *et al.* (1984) qui ont montré un couplage entre deux phénomènes, l'un situé dans la zone de combustion et l'autre dans la tuyère de sortie : des ondes de pression sont créées lorsque des ondes entropiques sont convectées à travers la tuyère de sortie et à l'inverse, des ondes entropiques sont générées lorsque les ondes de pression altèrent la combustion Yu *et al.* (1991). Le modèle proposé devait cependant être revu, en particulier en prenant en compte les phénomènes amont à la flamme et l'influence des réseaux de chocs amonts (Candel, 1975).

Un couplage peut également apparaître entre des lâchés de tourbillons dans la zone de cisaillement issue des manches à air qui vont venir entretenir la combustion périodiquement comme l'a montré Hedge *et al.* (1987).

1.2.4 Approches numériques de la simulation des statoréacteurs

Au-delà des avant-projets, la conception des statoréacteurs est largement empirique et est basée sur l'expérience et le savoir-faire de l'industrie. Si les essais expérimentaux sont essentiels à la validation d'un nouveau système propulsif (en particulier, ils permettent de valider son comportement sur l'ensemble du domaine de fonctionnement de l'engin, de définir parfaitement les limites d'extinction riche et pauvre...), ceux-ci n'en restent pas moins très coûteux et des moyens expérimentaux poussés ne sont pour l'instant accessibles que pour des configurations expérimentales et non industrielles. Le recours à la simulation numérique apparaît ainsi comme un moyen parallèle essentiel à la caractérisation du fonctionnement d'un statoréacteur. Qui plus est, il ouvre également la voie à une meilleure compréhension de l'écoulement au sein de configurations complexes afin de mieux comprendre par exemple la stabilisation de la flamme, les instabilités thermoacoustiques, les effets de température sur les parois... La simulation numérique permet donc de fournir des éléments de réponse plus ou moins avancés et surtout complémentaires aux études expérimentales :

– Quelles sont les performances globales de la chambre ? Quel est le rendement de pression, de combustion, la poussée générique de l'engin... ?
– Quelles sont les caractéristiques moyennes de la chambre, en particulier en terme de température à la paroi, de vitesse... ?
– Finalement, quelles sont les caractéristiques instationnaires du bloc propulsif ? Il est en effet essentiel de prédire les instabilités au sein d'une chambre où la flamme n'est stabilisée que par l'écoulement lui-même. La prédiction du soufflage de la flamme est déterminante de même que celle des oscillations de pression dans la chambre. Effectivement, si des fluctuations de pression sont convectées vers les entrées d'air, sous certaines conditions, leur interaction avec les chocs en entrée peuvent désamorcer la tuyère et dégrader fortement le statoréacteur (celle-ci ne fonctionnant plus).

Performances de la chambre

Les premières méthodes utilisées pour prédire les caractéristiques globales d'un statoréacteur pour un point de fonctionnement donné ont été réalisé par Rutz (1981). Ce type de méthode découplait aérodynamique et combustion. Les principales structures de l'écoulement (zones de recirculation) étaient ainsi déterminées (de manière numérique ou expérimentale par injection de traceur) et l'application d'un modèle de réacteur homogène (code de cinétique chimique pure) permettait d'approcher le rendement de combustion. Les critères déterminants pour caractériser les réacteurs sont le temps de séjour, les échanges de masse, le volume considéré... Ce travail fastidieux nécessitait ainsi une base expérimentale détaillée ce qui était assez limitant. Par la suite, Mir (1981) ou Grohens (2000) ont cherché à systématiser la prédiction des performances d'une chambre de combustion avec l'utilisation exclusive de méthodes numériques. Le défaut introduit par ce type de méthode est la détection des réacteurs élémentaires, fortement basée sur l'empirisme. Les incertitudes introduites par les différents modèles comme la quantification de la turbulence furent un autre frein au bon développement de la méthode.

Approche RANS

L'étape suivante est donc la simulation de l'aérodynamique et de la combustion par des méthodes RANS (pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes*), approche moins coûteuse que la simulation aux grandes échelles (ou bien sûr la simulation directe). Dans cette approche, toutes les échelles de la turbulence sont modélisées. Le résultat d'une simulation RANS correspond à une moyenne sur un nombre important de réalisations du champ fluide (Chassaing, 2000; Pope, 2000). Cette approche est largement diffusée dans l'industrie, en particulier grâce à son faible coût par rapport aux méthodes plus élaborées, mais ne permet pas de décrire des phénomènes instationnaires ou transitoires. Ne pas résoudre les effets des plus grosses structures de la turbulence reste toutefois problématique dans le cadre de la simulation de statoréacteurs. La turbulence y est en effet fortement anisotrope et sa modélisation par des modèles de turbulence (de type modèles à deux équations comme k-ε (Wilcox, 1993; Cousteix, 1989)) est alors mis à défaut, ce type de modélisation reposant grandement sur l'hypothèse d'isotropie à fort Reynolds (Tennekes & Lumley, 1972). L'appel à l'empirisme est alors de mise et passe par la paramétrisation des constantes (Turpin, 2001) mais reste trop spécifique à un point de fonctionnement d'une configuration donnée. Cette modélisation par approche RANS est encore plus questionnable pour la description du mélange. Pour les statoréacteurs, les phénomènes tels que les modes préférés de jets, les interactions jet/jet ou encore les zones de cisaillement doivent être décrits avec précision pour bien rendre compte de la composition

locale du mélange comme l'a montré Reichstadt *et al.* (2007). Le recours à des modèles RANS plus élaborés comme l'ARSM (*Algebraic Reynolds Stress Model*) a permis des améliorations intéressantes dans la prédiction des champs de vitesse ainsi que des structures cohérentes (Liou & Hwang, 1989).

Le recours à la simulation numérique a permis de mieux caractériser l'impact des caractéristiques géométriques de la chambre, qu'il s'agisse de l'angle des manches à air par rapport au fût (Yen & Tzu-Hsiang, 1993) ou de la taille du dôme (Raja Singh Thangadurai *et al.*, 2004*a*,*b*).

L'impact du modèle de combustion est également déterminant. Barthelemy & Dufour (2001) ont cherché à étendre le modèle de flamme cohérente (Candel *et al.*, 1990) à la combustion partiellement prémélangée. Montazel *et al.* (1992) ont également appliqué un modèle basé sur le concept de flammelette (Peters, 2000) et le transport de la surface de flamme à la configuration du "LIC" en obtenant de bons accords avec l'expérience. La chimie est dans cette dernière traitée à l'aide d'une bibliothèque de flammelettes tandis que l'effet de la turbulence est modélisée. Les fermetures nécessitées par le modèle restent toutefois largement basées sur l'empirisme. L'application à des chambres réelles comme le MPSR-2 (Missile Probatoire Statoréacteur Rustique 2) par Turpin (2001) n'a pas permis de fournir une prévision suffisante des performances de la chambre. En effet, la plupart du temps, les modèles sont validés sur des flammes tests simples comme la flamme de Masri (Bilger *et al.*, 1990) puis appliqués à des chambres bien plus complexes où la multiplication des phénomènes rend difficile l'utilisation d'un modèle type.

Approche instationnaire

La prédiction du mélange dans une chambre de statoréacteur est essentielle pour avoir une prévision numérique fiable. Toutefois, les limites d'une approche RANS a été soulignée dans la configuration du "Statoréacteur de Recherche" par Reichstadt *et al.* (2007). En effet, la simulation d'une maquette de mélange où du CO_2 est injecté comme traceur du carburant a montré que les niveaux de fractions massiques étaient fortement surprédits au niveau de l'injection de carburant (Heid & Ristori, 2003). Le passage à la SGE où les plus grandes structures de l'écoulement sont résolues et la modélisation réduite à celle des plus petites structures est une étape plaisante pour pallier à cette difficulté.

Les premières SGE ont été menées par Menon & Jou (1990) en écoulement non-réactif puis réactif en s'intéressant en particulier aux instabilités de combustion. La configuration était alors bidimensionnelle afin de limiter le coût de calcul. L'impact du modèle de combustion étant essentiel, Menon s'est alors intéressé à l'adaptation des modèles au cadre de la SGE. Au CERFACS, Colin *et al.* (2000) ont appliqué le modèle de flamme épaissie à l'Aquavit et ont pu prédire d'une part le battement des jets à la fréquence observée mais également les différentes zones réactives.

Plus récemment, Ko (2005) a étudié l'impact de la position des injecteurs de carburant dans les manches à air sur le mélange ainsi que la position des zones de recirculation dans la configuration. En particulier, celui-ci montre que les lâchers de tourbillons issus des manches à air est modifié.

1.3 Motivations et objectifs de l'étude

Cette thèse est financée par la **DGA** (*Délégation Générale pour l'Armement*), soutenue par **MBDA**[6], société partagée par **BAE systems**, **EADS** et **Finmeccanica** et a été réalisée au **CERFACS**[7] (*Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique*). Le code AVBP a été initialement développé et validé pour la simulation des chambres de turbine à gaz (Boileau *et al.*, 2008*b*; Staffelbach *et al.*, 2006, 2009). Toutefois, le passage à la simulation numérique de l'écoulement dans un statoréacteur pose différents problèmes comme souligné dans les différentes sections précédentes :

- Dans une chambre sans accroche-flamme ni zone de recirculation stable, l'impact du modèle de combustion ainsi que son interaction avec la turbulence et la cinétique chimique doit être la plus proche possible de la physique et rendre compte du régime de combustion partiellement prémélangé dans la chambre qui a un lien fort avec les instabilités se développant dans la chambre.
- Le concept de statoréacteur repose en premier lieu sur l'utilisation des diffuseurs d'entrée pour garantir les bonnes conditions génératrices dans l'écoulement. La bonne reproduction du réseau de choc en sortie de tuyères amonts est donc essentielle que ce soit pour l'étude de l'écoulement aérodynamique ou pour l'examen de la réponse acoustique du système. Les méthodes de capture de choc présentent dans AVBP ne sont pas à ce jour suffisament élaborées pour assurer une bonne reproductibilité de la physique ainsi que la robustesse du calcul.
- Les effets de compressibilité sur les termes de sous-mailles ne peuvent plus être négligés.
- Les pertes thermiques ainsi que le rayonnement sont également très importants dans ce type de configuration confinée.
- En configuration statoréacteur, la simulation de la phase liquide est également problématique. L'outil numérique doit être sufisament robuste pour décrire le comportement de la phase dispersée, qui là-encore a un impact fort sur les régimes de combustion.

Au travers de cet étude, les principaux axes de travail abordés ont été les suivants :

- **Développement de l'outil AVBP**
  Il s'agit de contribuer à la validation de l'approche de la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) et en particulier des différentes méthodes utilisées dans le code AVBP pour la simulation d'écoulements réactifs diphasiques fortement compressibles et de l'appliquer à la configuration du "Statoréacteur de Recherche" de l'ONERA. La première étape a été d'évaluer les différents points durs de ce type de configuration et les différentes méthodes à même de les corriger. En particulier, il a été nécessaire d'introduire dans AVBPune autre méthode pour la capture de choc ainsi qu'un modèle de sous-maille pour les écoulements compressibles. Le dernier point dur identifié concerne la gestion numérique de la phase dispersée dans AVBP. Différentes méthodes ont été introduites afin de palier au manque de robustesse ou de précision des méthodes utilisées jusque-là.

- **Analyse phénoménologique de l'écoulement dans le statoréacteur de recherche**
  On s'est intéressé également à décrire avec plus de précision la phénoménologie de la combustion monophasique dans le Statoréacteur de Recherche, configuration étudiée expérimentalement et numériquement par l'ONERA, ceci dans le but d'être à même de prédire les principales caractéristiques du moteur. Différents points de fonctionnement ont été étudié, tous pour un régime de vol de haute altitude pour trois richesses globales différentes.

[6] www.mbda-systems.com
[7] www.cerfacs.fr

1.4 Organisation du manuscrit

- La **première partie** contient une description brève de l'approche théorique et numérique employée dans la thèse. Les chapitres 2 et 3 décrivent les équations de Navier-Stokes utilisées pour la simulation de l'écoulement réactif gazeux du "Statoréacteur de Recherche" tandis que le chapitre suivant présente les équations pour la phase dispersée, utilisées pour la troisième partie. Le chapitre 3 présente l'approche numérique de façon générale dans AVBP. Le chapitre 4 présente différentes méthodes utilisables pour la capture de chocs avec des schémas de convection centrés, essentielles pour la simulation des réseaux de chocs en aval des diffuseurs d'entrée. Enfin, le chapitre 5 présente différentes méthodes de post-traitement pour la compréhension et l'analyse des résultats fournies par la simulation aux grandes échelles, en particulier la décomposition en modes propres.

- La **deuxième partie** traite de la simulation du "Statoréacteur de Recherche". Après une description de l'expérience chapitre 6 et de la topologie de l'écoulement à froid, chapitre 7, l'impact de la cinétique chimique sur les prédictions SGE est étudiée. En particulier, on cherchera à évaluer l'impact de la capacité du schéma à reproduire l'évolution de la vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse. L'effet des conditions aux limites (inclusion des diffuseurs en entrée) a été également étudié. Le dernier chapitre de cette section vise à décrire la phénoménologie de la combustion pour trois cas de richesse globale différente et permet de qualifier la reproductibilité de l'expérience par rapport aux calculs SGE.

- La **troisième partie** est dédiée à l'étude de la stratégie numérique à adopter pour la simulation de la phase dispersée. En effet, le formalisme Euler-Euler disponible dans AVBP induit la présence de forts gradients ce qui rend l'utilisation de schémas centrés très sensible. Trois classes de schémas sont comparées afin de potentiellement remédier à cette difficulté sur des cas tests du plus simple comme la convection de gaussienne à la simulation d'une géométrie complexe, le banc MERCATO de l'ONERA.

Première partie

Modèles physiques et numériques pour la simulation aux grandes échelles

Table des Matières

2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs 35

2.1 Équations et variables conservatives . . . 35
2.2 Variables thermodynamiques . . . 36
2.3 Équation d'état des gaz parfaits . . . 37
2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces . . . 37
2.5 Diffusion de la chaleur . . . 38
2.6 Coefficients de transport diffusif . . . 38
2.7 Cinétique chimique . . . 39

3 Équations de conservation pour la phase dispersée 41

3.1 Approche Lagrangienne . . . 41
3.2 Approche Eulérienne . . . 42
3.3 Equations de conservation eulériennes . . . 44
3.3.1 Fonction densité de présence . . . 44
3.3.2 Moyenne de phase et mouvement mésoscopique . . . 44
Moyenne d'ensemble . . . 44
Moyenne d'ensemble massique . . . 44
Grandeurs mésoscopiques et grandeurs décorrélées . . . 45
3.3.3 Équation générale d'Enskog . . . 47
3.3.4 Équations de conservation . . . 47
Conservation de la densité de particules . . . 47
Conservation de la fraction volumique . . . 48
Conservation de la quantité de mouvement . . . 48
Conservation de l'énergie décorrélée . . . 48
Conservation de l'enthalpie sensible . . . 49
3.3.5 Résumé des hypothèses et des équations de conservation de la phase dispersée . 49
Hypothèses simplificatrices . . . 49
Équations de conservation . . . 50
3.4 Modèles de fermeture . . . 51
3.4.1 Traînée . . . 51
3.4.2 Évaporation . . . 53
Description du modèle . . . 53
Taux de transfert de masse . . . 53

Taux de transfert de chaleur . . . 55
Valeur de référence pour l'enthalpie liquide . . . 56
Coefficients de transport diffusif . . . 56
3.4.3 Mouvement décorrélé . . . 57
3.4.4 Récapitulatif des termes modélisés . . . 59

4 Équations pour la SGE diphasique réactive 61
4.1 Équations LES pour la phase gazeuse . . . 61
4.1.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes . . . 61
4.1.2 Flux convectifs résolus . . . 62
4.1.3 Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif . . . 62
4.1.4 Termes de sous-maille . . . 63
4.2 Modèles de sous-maille . . . 64
4.2.1 Modèle de Smagorinsky . . . 65
4.2.2 Modèle de Yoshizawa . . . 65
4.2.3 Modèle WALE . . . 65
4.3 Équations LES pour la phase dispersée . . . 65
4.3.1 Filtrage LES des équations de conservation . . . 65
4.3.2 Flux mésoscopiques résolus . . . 66
4.3.3 Flux décorrélés résolus . . . 67
4.3.4 Flux de sous-maille . . . 67
4.3.5 Termes sources filtrés . . . 68
4.4 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée . . . 71
4.4.1 Flux de sous-maille d'énergie décorrélée . . . 72
4.4.2 Terme de production de sous-maille d'énergie décorrélée . . . 72
4.5 Modèle de combustion turbulente . . . 72
4.5.1 Modélisation de la combustion turbulente . . . 72
4.5.2 Flamme laminaire épaissie (TF) . . . 73
4.5.3 Modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente (TFLES) . . . 73
Fonction d'efficacité E . . . 75
Estimation de la constante α . . . 76
4.5.4 Modèle de flamme épaissie dynamique . . . 76
Principe de fonctionnement . . . 76
Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale . . . 76

5 Approche numérique 79
5.1 Le code AVBP . . . 79
5.2 Discrétisation *cell-vertex* . . . 79
5.2.1 Métriques . . . 80
5.2.2 Approche des résidus pondérés . . . 82
5.3 Schémas numériques . . . 83
5.4 Modèles de viscosité artificielle . . . 83

5.4.1 Introduction . . . 83
5.4.2 Senseurs . . . 84
Senseur de Jameson . . . 84
Senseur de Colin . . . 84
5.4.3 Opérateurs . . . 85

6 Méthodes pour la capture de chocs **87**
6.1 Problématique . . . 87
6.2 Les Méthodes de capture de choc . . . 88
6.2.1 Introduction : la viscosité de volume . . . 88
6.2.2 La viscosité artificielle d'ordre 2 et le senseur de Jameson . . . 89
6.2.3 Modèle de Von Neumann & Richtmeyer . . . 89
6.2.4 Modèle de Cook&Cabot . . . 89
6.3 Comparaison des méthodes . . . 90
6.3.1 Cas test : Tube à choc . . . 90
6.3.2 Cas test 3D : Calcul d'une tuyère . . . 92

7 Outils de post-traitement et d'aide à la compréhension **95**
7.1 Les cartes spectrales . . . 95
7.2 Le solveur de Helmholtz . . . 95
7.3 La Décomposition en Modes Propres (*POD*) . . . 96
7.3.1 Théorie associée . . . 96
7.3.2 L'opérateur de projection . . . 97
7.4 Exemple d'application des trois diagnostics . . . 98
7.4.1 Solution analytique . . . 98
7.4.2 Solveur acoustique . . . 99
7.4.3 Simulation de référence . . . 99
7.4.4 Cartes spectrales . . . 99
7.4.5 Décomposition en Modes Propres . . . 101

Chapitre 2

Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

Cette section présente les équations de conservation dites de Navier-Stokes établies pour des mélanges gazeux compressibles et réactifs, ainsi que les différents modèles et hypothèses concernant la thermodynamique, la diffusion et la cinétique réactionnelle.

2.1 Équations et variables conservatives

On écrit les équations de conservation d'un écoulement multi-espèces réactif sous la forme suivante :

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

où $\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables transportées avec respectivement ρ, u, v, w, E et ρ_k, la masse volumique, les trois composantes du vecteur vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$, $E = E_i + \frac{1}{2}\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}$ l'énergie totale non chimique (E_i est l'énergie interne) 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. $\mathbf{F}$ est le tenseur des flux que l'on décompose de façon classique en une partie non diffusive $\mathbf{F}^I(\mathbf{w})$ et une partie diffusive $\mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla\mathbf{w})$. Le vecteur des termes sources se compose de deux parties telles que $\mathbf{s} = \mathbf{s}_c + \mathbf{s}_{l\text{-}g}$ où $\mathbf{s}_c$ est le terme source lié à la réaction chimique (cf. section 2.7) et $\mathbf{s}_{l\text{-}g}$ est le terme source dû aux effets de la phase liquide sur la phase gazeuse.

Les trois composantes du tenseur des flux non diffusifs $\mathbf{F}^I(\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + P)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ (\rho E + P)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

où la pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 2.13).

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs $\mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix}, \mathbf{g}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{h}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i (cf. section 2.4) et q_i est le flux diffusif de chaleur (cf. section 2.5). τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}\right) \quad \text{avec :} \quad S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{2.4}$$

où S_{ij} est le tenseur des vitesses de déformation et μ est la viscosité dynamique (cf. section 2.6).

Note : Par la suite, en l'absence de précision, les indices i, j et l désignent l'une des trois directions de l'espace. Leur répétition implique une sommation sur ces trois directions (notation d'Einstein). Dans tout ce document, l'indice k représente uniquement la $k^{\text{ième}}$ espèce et ne suit pas la règle de sommation (sauf dans les cas mentionnés).

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 sensibles $\tilde{h}_{s,k}$ et entropies $\tilde{s}_k$ sensibles sont tabulées tous les 100 *K* de 0 à 5000 *K* et sont définies respectivement par les Eqs. 2.5 et 2.6.

$$\tilde{h}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k}dT = \frac{\tilde{h}^m_{s,k}(T_i) - \tilde{h}^m_{s,k}(T_0)}{W_k}, \qquad i = 1,51 \tag{2.5}$$

$$\tilde{s}_k(T_i) = \frac{\tilde{s}^m_k(T_i) - \tilde{s}^m_k(T_0)}{W_k}, \qquad i = 1,51 \tag{2.6}$$

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

Le symbole ˜ correspond à la valeur tabulée d'indice i et l'exposant m représente une valeur molaire. $\tilde{h}^m_{s,k}$, $\tilde{s}^m_k$ et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de la table JANAF (Stull & Prophet, 1971). Enfin, l'énergie sensible de l'espèce k est donnée par l'Eq. 2.7 où r_k est fourni par l'Eq. 2.14. Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100$ *K*. Elles sont respectivement déterminées par les Eqs. 2.8 et 2.9. L'énergie sensible de l'espèce k est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. 2.10). L'énergie sensible et

l'enthalpie sensible du mélange sont respectivement définies par les Eq. 2.11 et 2.12.

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \tag{2.8}$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \tag{2.9}$$

$$e_{s,k}(T) = \tilde{e}_{s,k}(T_i) + (T - T_i)\frac{\tilde{e}_{s,k}(T_{i+1}) - \tilde{e}_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \tag{2.10}$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^{N} \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k e_{s,k} \tag{2.11}$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^{N} \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k h_{s,k} \tag{2.12}$$

2.3 Équation d'état des gaz parfaits

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

$$P = \rho \frac{\mathscr{R}}{\overline{W}} T \quad \text{avec :} \quad \frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \tag{2.13}$$

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

$$\overline{r} = \frac{\mathscr{R}}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \mathscr{R} = \sum_{k=1}^{N} Y_k r_k \tag{2.14}$$

$$\overline{C_p} = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{p,k} \tag{2.15}$$

$$\overline{C_v} = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{v,k} \tag{2.16}$$

où $\mathscr{R} = 8.3143\ J.mol^{-1}.K^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. L'exposant polytropique du mélange est donné par $\gamma = \overline{C_p}/\overline{C_v}$. La constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition locale du mélange définie par les fractions massiques $Y_k(x,t)$. Elles sont donc dépendantes de l'espace et du temps :

$$\overline{r} = \overline{r}(x,t), \qquad \overline{C_p} = \overline{C_p}(x,t), \qquad \overline{C_v} = \overline{C_v}(x,t), \qquad \text{et} \qquad \gamma = \gamma(x,t) \tag{2.17}$$

À partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 2.10 et 2.11. Enfin, les conditions limites nécessitent le calcul de la vitesse du son du mélange c définie par $c^2 = \gamma \overline{r} T$.

2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale implique que l'Eq. 2.18 soit satisfaite. $\mathbf{V}^k$ représente la vitesse de diffusion de l'espèce k $(k = 1, ..., N)$ et s'exprime en utilisant

l'approximation d'Hirschfelder-Curtis (Eq. 2.19). L'Eq. 2.19 fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k\overline{W}/W_k$. Exprimée en terme de fractions massiques, l'Eq. 2.19 devient l'Eq. 2.20.

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k V_i^k = 0 \tag{2.18}$$

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.19}$$

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.20}$$

Si on somme les k de l'Eq. 2.20, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.18 n'est pas nécessairement respectée. On ajoute alors la contribution d'une vitesse de diffusion corrective $\mathbf{V}^c$ pour assurer la conservation de la masse totale de gaz (Eq. 2.21) (Poinsot & Veynante, 2005). Le flux de diffusion des espèces $\mathbf{J}_k$ qui prend en compte cette correction est défini par l'Eq. 2.22.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N} D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.21}$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k \left(V_i^k + V_i^c\right) = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c\right) \tag{2.22}$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange définie en section 2.6.

2.5 Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total $\mathbf{q}$ est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces (cf. section 2.4). Ces deux termes sont détaillés dans l'Eq. 2.24.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} J_{i,k} h_{s,k} \tag{2.23}$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} \quad \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^{N} \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c\right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \tag{2.24}$$

où λ est la conductivité thermique du mélange définie en section 2.6.

2.6 Coefficients de transport diffusif

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[1]. La loi puissance

[1] Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles tant que le mélange est un gaz parfait

(Eq. 2.26) est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température :

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \tag{2.25}$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref} généralement dans le mélange de gaz frais. L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0. Pour un mélange d'hydrogène et d'oxygène à la stoechiométrie, la loi puissance pour la viscosité dynamique est donnée par la relation :

$$\mu = 1,79.10^{-5} \left(\frac{T}{300} \right)^{0,686} \tag{2.26}$$

La conductivité thermique du mélange (qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant) ainsi que la diffusivité thermique sont définies respectivement par $\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr}$ et $D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr}$.

La diffusivité moléculaire D_k est exprimée à l'aide des coefficients binaires D_{ij} obtenus au moyen de la théorie cinétique des gaz (Hirschfelder *et al.*, 1969). La diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 2.27 (Giovangigli, 1999) :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^{N} X_j / D_{jk}} \tag{2.27}$$

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. 2.27 a un sens. À l'inverse, les codes LES qui utilisent un schéma cinétique simplifié ne nécessitent pas une modélisation aussi précise. On adopte donc une approche simplifiée en faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par $D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k}$ où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant. P_r et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Leurs valeurs sont obtenues à l'aide des librairies de CHEMKIN2 (Transfit) (Kee *et al.*, 1991), en calculant leur valeur dans les gaz brûlés issus de la mise en équilibre d'un mélange inflammable.

2.7 Cinétique chimique

Le terme source $\mathbf{s}_c$ de l'Eq. 2.1 est défini par : $\mathbf{s}_c = (0,0,0,\dot{\omega}_T,\dot{\omega}_k)^T$ avec $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k. Le modèle de combustion implanté dans AVBP est une loi d'Arrhénius écrite pour N réactifs notés $\mathscr{M}_{kj}$ et impliqués dans m réactions. Les réactions se mettent sous la forme définie par l'Eq. 2.28. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'Eq. 2.29 comme la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{kj}$ de l'espèce k dans chaque réaction j (j variant de 1 à m). Les coefficients stoechiométriques des réactifs ν'_{kj} et des produits ν''_{kj} permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$. $\mathscr{Q}_j$ est le taux d'avancement de la réaction j défini par l'Eq. 2.30. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directe et inverse définies respectivement par les Eq. 2.31 et 2.32. $A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ est imposé par l'hypothèse d'équilibre

thermodynamique.

$$\sum_{k=1}^{N} \nu'_{kj} \mathscr{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N} \nu''_{kj} \mathscr{M}_{kj}, \qquad j = 1, m \tag{2.28}$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{M} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{M} \nu_{kj} \mathscr{Q}_j \tag{2.29}$$

$$\mathscr{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^{N} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \tag{2.30}$$

$$K_{f,j} = A_{f,j}\, T^{\beta} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathscr{R} T} \right) \tag{2.31}$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \tag{2.32}$$

Dans l'Eq. 2.32, K_{eq} est la constante d'équilibre (Kuo, 2005) définie par l'Eq. 2.33. La pression de référence est égale à $P_0 = 1\ bar$. ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 2.34 et ΔS_j^0 la variation d'entropie pour la réaction j définie par l'Eq. 2.35. $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0\ K$. Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est donné par l'Eq. 2.36.

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathscr{R} T} \right)^{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathscr{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathscr{R} T} \right) \tag{2.33}$$

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} \left(h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0 \right) \tag{2.34}$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} s_k(T) \tag{2.35}$$

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N} \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \tag{2.36}$$

Dans l'Eq. 2.31, le terme $A_{f,j}\ T^{\beta}$ modélise le nombre de collisions entre les réactifs par unité de volume et par unité de temps ainsi que l'effet de leurs géométries sur la collision. Le paramètre $A_{f,j}$ est appelé facteur pré-exponentiel (unité : cgs) et la partie en T^{β} permet de prendre en compte les effets de la température sur la fréquence des collisions. La probabilité que ces collisions déclenchent une réaction chimique est quantifiée par le terme $\exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathscr{R} T}\right)$.

Chapitre 3

Équations de conservation pour la phase dispersée

Contrairement aux écoulements de fluides Newtoniens qui sont majoritairement décrits par une théorie des milieux continus avec un point de vue Eulérien, la dynamique des sprays peut être abordée sous différentes approches théoriques. Dans l'approche Lagrangienne (notée L), on considère la phase dispersée comme un ensemble de particules discrètes de petites tailles chacune d'elles étant suivie de façon individuelle par un jeu d'équation de la mécanique du point. Dans l'approche Eulérienne (notée E), le spray est vu comme un milieu continu analogue à un fluide et constitué des propriétés moyennes locales de l'ensemble des particules. Afin de comprendre le choix fait dans cette étude, les approches Lagrangienne et Eulériennes sont présentées de manière succinte dans les sections 3.1 et 3.2. Ce travail de thèse sur la partie dispersée ne portant pas sur l'utilisation directe des modèles mais plus sur la modélisation numérique de la convection des gouttes, les différentes étapes de la modélisation Euler-Euler ne sont pas présentées. Le lecteur pourra se référer à Boileau (2007) pour de plus amples détails ou encore aux travaux de Février *et al.* (2005); Moreau (2003); Kaufmann (2004); Riber *et al.* (2006)...

Note : Par la suite, on parle indifféremment de phase dispersée ou de phase liquide pour définir le spray de gouttelettes (appelées particules dans le formalisme Eulérien statistique). Par opposition, l'écoulement gazeux est appelé phase continue, phase porteuse ou phase gazeuse.

3.1 Approche Lagrangienne

La description Euler-Lagrange (EL) du spray consiste à suivre la trajectoire Lagrangienne (L) de chaque gouttelette en lui appliquant les transferts de quantité de mouvement, de masse et de chaleur avec le gaz porteur dont l'écoulement est décrit du point de vue Eulérien (E). D'après les travaux de Boivin *et al.* (2000), cette approche appliquée à la SGE n'est valable que pour les écoulements à faible charge[1] ($\alpha_l \leq 0,001$) avec des temps de réponse du liquide supérieur au temps caractéristique de la turbulence (du gaz) de sous-maille. À chaque instant, on résout le système suivant pour chaque gouttelette (k) présente

[1] α_l est le rapport de masse liquide sur la masse gazeuse.

dans l'écoulement :

$$\frac{dX_{p,i}^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \tag{3.1}$$

$$\frac{d}{dt}\left(m_p^{(k)} V_{p,i}^{(k)}\right) = F_{p,i}^{(k)} \tag{3.2}$$

$$\frac{dm_p^{(k)}}{dt} = \dot{m}_p^{(k)} \tag{3.3}$$

$$\frac{d}{dt}\left(m_p^{(k)} C_p^{(k)} T_p^{(k)}\right) = \dot{Q}_p^{(k)} \tag{3.4}$$

avec $\vec{X}_p^{(k)}$ la position de la goutte, $\vec{V}_p^{(k)}$ sa vitesse, $m_p^{(k)}$ sa masse, $C_p^{(k)}$ sa chaleur spécifique à pression constante, $T_p^{(k)}$ sa température, $\mathbf{F}_p^{(k)}$ les forces extérieures agissant sur la goutte, $\dot{m}_p^{(k)}$ le taux d'évaporation et $\dot{Q}_p^{(k)}$ le taux de transfert de chaleur avec le gaz porteur.

Le principal avantage de la méthode EL est l'absence de modélisation nécessaire pour traiter des problèmes tels que les effets de polydispersion (particules de différents diamètres). Ainsi, elle est couramment employée dans les codes RANS et son potentiel en LES a été démontré (Mahesh *et al.*, 2002; Mashayek & Pandya, 2003; Pandya & Mashayek, 2002). Sur le plan numérique, la localisation des particules sur la grille Eulérienne nécessite des algorithmes performants. Dans le cas de calculs parallèles par décomposition de domaine, l'échange de particules entre processeurs est une tâche délicate (García *et al.*, 2005). Une fois les particules repérées, des interpolations sont nécessaires pour transférer les termes de couplage de la grille Eulérienne aux particules et inversement. Si l'on souhaite éviter une diffusion numérique importante lors de ces interpolations, des schémas d'ordre élevé donc coûteux en temps de calcul sont requis.

D'autre part, le nombre de gouttes utilisable est limité par les ressources en mémoire des calculateurs et l'efficacité globale d'une simulation dépend fortement de la stratégie de parallèlisation (Riber *et al.*, 2009; Garcia, 2009).

3.2 Approche Eulérienne

Les difficultés numériques et informatiques de l'approche EL ont motivé la modélisation des sprays par des approches Euler-Euler (EE). Dans ce cas, on ne s'intéresse pas à l'histoire de chaque particule mais à leurs propriétés moyennes en regardant le spray comme un fluide continu. Deux types de moyenne sont classiquement utilisés : la moyenne volumique et la moyenne statistique.

Le filtrage volumique (décrit en détail par Sirignano (2005), Simonin (1996*a*) et Kaufmann (2004) et résumé par Boileau *et al.* (2008*a*)) consiste à considérer que la phase liquide comme la phase gazeuse est régie par des équations de type Navier-Stokes. Une fonction indicatrice de phase, appliquée aux équations permet de définir l'ensemble des relations de conservation pour les deux phases. Ces deux ensembles d'équations sont ensuite filtrés par un opérateur volumique. L'inconvénient de cette méthode est de négliger les échelles inférieures à la taille caractéristique du volume de contrôle. Contrairement à la LES pour l'écoulement gazeux, il n'existe pas d'approche claire pour modéliser les effets de ces petites échelles (Kaufmann, 2004) et l'hypothèse de milieu continu limite la taille minimale de ce volume en y imposant un nombre suffisant de particules.

le filtrage statistique (employé dans AVBP), permet de contourner ces problèmes. Février *et al.* (2005) proposent une approche basée sur une fonction densité de présence (FDP) pour la phase liquide

(la détermination de la FDP est décrite dans la section suivante). Cette FDP est utilisée pour définir une moyenne et un ensemble d'équations de transport à partir de la théorie cinétique des gaz de Boltzmann (Chapman & Cowling, 1970). Une fois que ces équations sont établies, on recherche des modèles de fermeture pour les termes inconnus du système (mouvement décorrélé et termes d'échange avec la phase porteuse). Contrairement au filtrage volumique, la méthode basée sur la moyenne statistique n'a besoin d'aucune hypothèse sur la taille du filtre puisqu'il apparaît plus tard. Par contre, le mouvement non résolu des particules peut être modélisé (Février *et al.*, 2005; Simonin *et al.*, 2002). C'est pour ces raisons que cette approche a été choisie dans le code AVBP.

Contrairement à l'approche EL, les équations obtenues par la méthode EE sont proches des équations de la phase gazeuse, ce qui permet d'utiliser les mêmes algorithmes informatiques que le solveur gazeux et de profiter pleinement des capacités de parallélisme. De plus, aucune interpolation n'est nécessaire pour coupler les deux phases car les informations liquide et gazeuse sont stockées sur les mêmes noeuds de maillage. En d'autres termes, le code de calcul résolvant l'écoulement diphasique en Euler-Euler n'est qu'une extension du code gazeux auquel on ajoute un jeu de variables à transporter ainsi que des modèles pour les termes de fermeture et de couplage. Le temps de calcul n'est alors plus lié aux nombres de particules à transporter mais au nombre d'équations Eulériennes décrivant la phase dispersée et à la complexité des modèles de fermeture. En général et dans leur version simple, il ne dépasse pas le double du temps requis pour un calcul monophasique équivalent.

La seconde faiblesse de l'approche EE est sa difficulté à modéliser les configurations où les grandeurs moyennes ne permettent pas de représenter le spray de façon réaliste. C'est le cas en particulier lorsque le spray présente des caractéristiques polydisperses, c.-à-d. en présence d'une distribution de diamètres de gouttes pour une même position. À partir de l'approche initialement décrite par Greenberg *et al.* (1993), Laurent & Massot (2001); Laurent *et al.* (2004) proposent une méthode sectionnelle dans laquelle le spray est divisé en sections contenant une classe de diamètre, chaque section nécessitant son propre jeu d'équations Eulériennes. Les auteurs montrent que quelques sections suffisent pour représenter de façon réaliste une large distribution de diamètres. Dans sa thèse, Mossa (2005) propose un modèle où la distribution des tailles est présumée et où une équation de transport pour la densité de surface de gouttes permet de prendre en compte les effets polydisperses sur la dynamique du spray. L'approche EE se heurte également aux cas où les trajectoires de gouttes au sein d'un même volume de contrôle Eulérien sont très différentes[2]. Toutefois, Fréret *et al.* (2008) montrent qu'il est possible d'utiliser la méthode *QMOM* pour prédire le croisement de trajectoires en formulation Eulérienne. Concernant la LES d'écoulements gaz-particules, l'étude comparative de Riber *et al.* (2006) montre que l'approche EE statistique donne des résultats équivalents à l'approche EL bien que les fluctuations turbulentes de la phase dispersée soient mieux prédites en EL. Enfin, le spray possédant des propriétés analogues à un fluide fortement compressible, la méthode Eulérienne doit transporter des fronts très raides qui peuvent poser des problèmes numériques. La solution utilisée pour le moment consiste à utiliser des schémas peu dispersifs et un opérateur de diffusion artificielle (Riber, 2007) (cf. section 5.4). De Chaisemartin (2009) utilise quant à lui un schéma cinétique bien adapté aux système d'équations sans terme de pression.

[2]Dans le cas extrême où les trajectoires sont opposées, définir une vitesse moyenne n'a plus de sens...

3.3 Equations de conservation eulériennes

3.3.1 Fonction densité de présence

L'approche EE adoptée dans AVBP repose sur la définition d'une fonction de densité de présence f_p. Le concept de cette fonction est construit de la façon suivante : un écoulement gazeux $\mathscr{H}_f$ est ensemencé de façon aléatoire avec des particules à un instant t_0. L'ensemble évolue jusqu'à un instant t_1 en supposant que la phase liquide n'a pas d'impact sur la phase gazeuse, pour donner une réalisation i de la phase liquide. En tout point et à tout instant, on mesure le nombre de particules possédant à la fois une vitesse égale à $\mathbf{c}_p$, une masse égale à μ_p et une température égale à ζ_p. Ce nombre est noté $f_p^i(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t, \mathscr{H}_f)$. La FDP est obtenue en moyennant l'opération sur un grand nombre $\mathscr{N}_p$ de réalisations liquides (la réalisation gazeuse $\mathscr{H}_f$ est toujours la même) : $f_p = \frac{1}{\mathscr{N}_p}\Sigma_{i=1}^{\mathscr{N}_p} f_p^i$. Cette fonction f_p n'est donc pas une FDP classique (dont l'intégrale sur le domaine de phase est égale à 1) : $f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t, \mathscr{H}_f)$ est le nombre probable de particules au point $\mathbf{x}$ et à l'instant t dont la vitesse $\mathbf{u}_p$, la température T_p et la masse m_p vérifient : $\mathbf{c}_p \leq \mathbf{u}_p < \mathbf{c}_p + d\mathbf{c}_p$, $\zeta_p \leq T_p < \zeta_p + d\zeta_p$ et $\mu_p \leq m_p < \mu_p + d\mu_p$.

3.3.2 Moyenne de phase et mouvement mésoscopique

Moyenne d'ensemble

La moyenne de phase d'une fonction particulaire quelconque $\Psi(\mathbf{u}_p, T_p, m_p)$ correspond à la moyenne de la grandeur Ψ sur l'ensemble des réalisations particulaires possibles. Elle est obtenue par intégration sur l'espace des phases — c'est-à-dire l'espace des propriétés des particules — pondérée par la fonction densité de présence :

$$\{\Psi\}_l = \frac{1}{\breve{n}_l} \int \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathscr{H}_f)\, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$$

où $\breve{n}_l$ est le nombre moyen de particules par unité de volume appelé aussi densité de particules et défini par :

$$\breve{n}_l(\mathbf{x}, t) = \int f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathscr{H}_f)\, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$$

Moyenne d'ensemble massique

De même que la moyenne de Fabre est plus adaptée dans les écoulements turbulents compressibles gazeux (cf. section 4.1.1), il est pratique de définir une moyenne de phase pondérée par la masse de la particule lorsque celle-ci varie (par évaporation, par exemple) :

$$\breve{\Psi} = \langle\Psi\rangle_l = \frac{1}{\rho_l \breve{\alpha}_l} \int \mu_p \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathscr{H}_f)\, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \tag{3.5}$$

où ρ_l est la masse volumique du liquide et $\breve{\alpha}_l$ est la fraction volumique de la phase dispersée dans le mélange diphasique définie par :

$$\rho_l \breve{\alpha}_l = \breve{n}_l \{m_p\}_p = \int \mu_p f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t|\mathscr{H}_f)\, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$$

On note la relation suivante utile pour les développements ultérieurs :

$$\begin{aligned} \rho_l \breve{\alpha}_l \langle \Psi \rangle_l &= \breve{n}_l \{ m_p \Psi \}_l \\ \text{avec :} \qquad m_p &= \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 \end{aligned}$$

où d est le diamètre de particule. Dans le cas d'un spray monodisperse, on a $m_p = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 = cste$ à la position $\mathbf{x}$ et à l'instant t. Les deux moyennes sont alors équivalentes :

$$\langle \Psi \rangle_l = \{ \Psi \}_l$$

et $\breve{\alpha}_l$ et $\breve{n}_l$ sont liés par la relation suivante :

$$\breve{\alpha}_l = \frac{\pi}{6} \breve{n}_l d^3$$

où d représente le diamètre local instantané commun à toutes les particules présentes à cet endroit. Ainsi, dans les développements ulérieurs où l'hypothèse de spray monodisperse sera utilisée, d pourra aussi bien désigner une propriété de la particule lagrangienne qu'une grandeur eulérienne du spray.

Grandeurs mésoscopiques et grandeurs décorrélées

Lorsqu'on remplace Ψ par la vitesse de particulaire $\mathbf{u}_p$ dans l'Eq. 3.5, on obtient la vitesse moyenne locale instantanée du spray liquide conditionnée par la réalisation $\mathscr{H}_f$ de l'écoulement gazeux :

$$\breve{\mathbf{u}}_l (\mathbf{x}, t | \mathscr{H}_f) = \langle \mathbf{u}_p \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \breve{\alpha}_l} \int \mu_p \mathbf{c}_p f_p \, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$$

$\breve{\mathbf{u}}_l$ est une vitesse moyenne eulérienne appelée *vitesse mésoscopique*. Pour toute particule individuelle située en $\mathbf{x}$ à l'instant t, on peut exprimer la vitesse propre $\mathbf{u}_p$ de cette particule comme la somme de cette *vitesse mésoscopique* et d'une composante résiduelle $\mathbf{u}''_p$ appelée *vitesse décorrélée* :

$$\mathbf{u}_p = \breve{\mathbf{u}}_l + \mathbf{u}''_p \qquad \text{avec} \quad \left\langle \mathbf{u}''_p \right\rangle_l = 0$$

Cette décomposition permet de voir le spray comme un ensemble de particules mues par un mouvement de groupe appelé *mouvement mésoscopique* où chaque particule se distingue de ce mouvement par sa *vitesse décorrélée* (cf. Fig. 3.1).

Les effets des grandeurs décorrélées ont été négligés dans ces travaux de thèse. La modélisation des effets du mouvement décorrélé n'est qu'à ses débuts et Riber a montré que les modèles actuels étaient pertinents dans le cas d'une turbulence homogène isotrope (Riber, 2007) mais possédaient des lacunes dans le cas de jets diphasiques turbulents et confinés dans lesquels de forts gradients de vitesses mésoscopiques apparaissent. Cependant, négliger le mouvement décorrélé a peu d'effet sur les grandeurs moyennes et agit essentiellement sur les fluctuations.

Dans la section 3.3.4, on constate que le mouvement décorrélé ou RUM (pour *random uncorrelated motion* en anglais) a un effet sur le mouvement mésoscopique (Eq. 3.12). Février *et al.* (2005) proposent donc une approche où le RUM est pris en compte dans la modélisation du spray. On définit ainsi plusieurs grandeurs qui jouent un rôle dans cette approche :

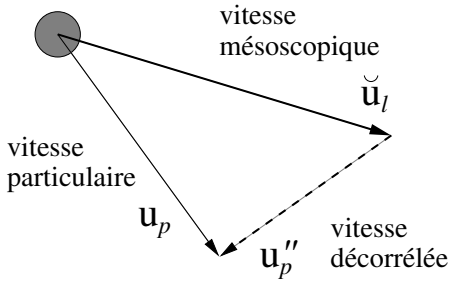


FIG. 3.1 - *Décomposition de la vitesse particulaire lagrangienne* $\mathbf{u}_p$ *en une partie mésoscopique* $\breve{\mathbf{u}}_l$ *et une partie décorrélée* $\mathbf{u}_p''$

Le tenseur des vitesses décorrélées $\delta\breve{R}_l$:

$$\delta\breve{R}_{l,ij}(\mathbf{x},t|\mathscr{H}_f) = \left\langle u''_{p,i}u''_{p,j}\right\rangle_l = \frac{1}{\rho_l\breve{\alpha}_l}\int \mu_p\left(c_{p,i}-\breve{u}_{l,i}\right)\left(c_{p,j}-\breve{u}_{l,j}\right)f_p\,d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$$

L'énergie décorrélée $\delta\breve{\theta}_l$:

$$\delta\breve{\theta}_l = \frac{1}{2}\left\langle u''_{p,i}u''_{p,i}\right\rangle_l$$

$\delta\breve{\theta}_l$ correspond à la demi-trace du tenseur des vitesses décorrélées et s'obtient en écrivant son équation de transport (cf. section 3.3.4).

La partie déviatorique du tenseur des vitesses décorrélées $\delta\breve{R}_l^*$:

$$\delta\breve{R}^*_{l,ij} = \delta\breve{R}_{l,ij} - \frac{2}{3}\delta\breve{\theta}_l\delta_{ij} \tag{3.6}$$

Le tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta\breve{S}_l$:

$$\begin{aligned}\delta\breve{S}_{l,ijk}(\mathbf{x},t|\mathscr{H}_f) &= \left\langle u''_{p,i}u''_{p,j}u''_{p,k}\right\rangle_l \\ &= \frac{1}{\rho_l\breve{\alpha}_l}\int \mu_p\left(c_{p,i}-\breve{u}_{l,i}\right)\left(c_{p,j}-\breve{u}_{l,j}\right)\left(c_{p,k}-\breve{u}_{l,k}\right)f_p\,d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p\end{aligned}$$

Enfin, dans le but de connaître la température des gouttes qui conditionne leur taux d'évaporation (cf. section 3.4.2), on définit l'enthalpie sensible particulaire $h_{s,p}$ qui se compose de deux parties :

L'enthalpie sensible mésoscopique $\breve{h}_{s,l} = C_{p,l}\left(\breve{T}_l - T_{l,ref}\right)$:

$$\breve{h}_{s,l}(\mathbf{x},t|\mathscr{H}_f) = \frac{1}{\rho_l\breve{\alpha}_l}\int \mu_p C_{p,l}\left(\zeta_p - T_{l,ref}\right)f_p\,d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$$

où $C_{p,l}$ est la chaleur massique à pression constante du liquide et $\breve{T}_l$ est la température liquide mésoscopique. $T_{l,ref}$ est une température de référence fixée à une valeur proche de $\breve{T}_l$ de sorte que $C_{p,l}$ puisse être supposée constante entre $\breve{T}_l$ et $T_{l,ref}$.

L'enthalpie sensible décorrélée $h''_p = C_{p,l}T''_p$:

$$h''_p = h_{s,p} - \breve{h}_{s,p} \qquad \text{avec} \quad \left\langle h''_p\right\rangle_l = 0$$

3.3.3 Équation générale d'Enskog

La fonction f_p est une FDP eulérienne qui vérifie une équation de transport de type Boltzmann représentant les effets des forces extérieurs sur les particules et les interactions inter-particules (Boileau *et al.*, 2008*a*) pour un développement plus détaillé). En multipliant l'équation de Boltzmann par une fonction particulaire quelconque Ψ et en l'intégrant par partie sur l'espace des phases (opérateur $\int \cdot \, d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$), on obtient *l'équation générale d'Enskog* pour la fonction Ψ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \langle \Psi \rangle_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \langle u_{p,i}\Psi \rangle_l &= \mathbb{C}(m_p\Psi) \\ &+ \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt}\frac{\partial \Psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_l + \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dT_p}{dt}\frac{\partial \Psi}{\partial T_p} \right\rangle_l \\ &+ \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dm_p}{dt}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial m_p} + \frac{\Psi}{m_p}\right) \right\rangle_l \end{aligned} \tag{3.7}$$

où $\mathbb{C}(m_p\Psi)$ est la variation de $\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{\Psi}$ due aux interactions entre particules et sera négligée par la suite. En notant que $\langle u_{p,i}\Psi \rangle_l = \langle u_{p,i} \rangle_l \langle \Psi \rangle_l + \left\langle u''_{p,i}\Psi \right\rangle_l$, on peut réécrire l'Eq. 3.7 sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{\Psi} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i}\breve{\Psi} &= \mathbb{T}(\Psi) + \mathbb{C}(m_p\Psi) \\ &+ \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt}\frac{\partial \Psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_l + \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dT_p}{dt}\frac{\partial \Psi}{\partial T_p} \right\rangle_l \\ &+ \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dm_p}{dt}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial m_p} + \frac{\Psi}{m_p}\right) \right\rangle_l \end{aligned} \tag{3.8}$$

où $\mathbb{T}(\Psi)$ est l'opérateur de flux décorrélé défini par :

$$\mathbb{T}(\Psi) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle u''_{p,i}\Psi \right\rangle_l$$

$\mathbb{T}(\Psi)$ sera négligé dans la suite de l'exposé. Lorsque la fonction Ψ dépend également du temps et de l'espace (cas où l'on dérive l'équation de l'énergie décorrélée Eq. 3.13), les termes suivants viennent s'ajouter au membre de droite des Eq. 3.7 et 3.8 :

$$\rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\Psi \right\rangle_l + \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle u_{p,i}\frac{\partial}{\partial x_i}\Psi \right\rangle_l \tag{3.9}$$

3.3.4 Équations de conservation

Les équations de conservations Eulériennes pour la phase dispersée sont obtenues en appliquant l'équation générale d'Enskog (Eq. 3.8) à différentes fonctions particulaires.

Conservation de la densité de particules

En prenant $\Psi = \frac{1}{m_p}$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\breve{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\breve{n}_l \breve{u}_{l,i} = \mathbb{T}\left(m_p^{-1}\right) + \mathbb{C}(1) \tag{3.10}$$

On note que dans le cas d'un spray monodisperse, toutes les particules ont localement une masse identique ($m_p = cste$) d'où : $\mathbb{T}\left(m_p^{-1}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{u''_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l = 0$.

Conservation de la fraction volumique

En prenant $\Psi = 1$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} = \mathbb{T}(1) + \mathbb{C}(m_p) + \Gamma_l \tag{3.11}$$

où $\Gamma_l = -\Gamma = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est le taux de variation de masse par changement de phase (évaporation).

Conservation de la quantité de mouvement

En prenant $\Psi = \mathbf{u}_p$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} \breve{u}_{l,j} = \mathbb{T}\left(u''_{p,i}\right) + \mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p) + F_{d,i} + \Gamma_{u,i} \tag{3.12}$$

$\mathbb{T}\left(u''_{p,i}\right)$ représente le transport de quantité de mouvement par la vitesse décorrélée. $\mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p)$ est l'échange de quantité de mouvement entre particules (collisions, rupture, coalescence, etc.). $F_{d,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l = \breve{n}_l \{F_{p,i}\}_l$ est l'échange de quantité de mouvement avec la phase gazeuse via la force de traînée $\mathbf{F}_p$ exercée sur chaque particule. $\Gamma_{u,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{u_{p,i}}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ u_{p,i}\frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est l'échange de quantité de mouvement avec la phase gazeuse par changement de phase. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes ayant localement le même diamètre (spray monodisperse) et la même température, on a : $\Gamma_{u,i} = \Gamma_l \breve{u}_{l,i}$.

Conservation de l'énergie décorrélée

En prenant $\Psi = \frac{1}{2}\left(u_{p,i} - \breve{u}_{l,i}\right)\left(u_{p,i} - \breve{u}_{l,i}\right) = \frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}$ et en ajoutant les termes de l'Eq. 3.9 à l'équation d'Enskog (Eq. 3.8), on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \delta\breve{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,i} \delta\breve{\theta}_l = \mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right) + \mathbb{C}\left(\frac{1}{2}m_p u''_{p,i}u''_{p,i}\right) + W_\theta + \Gamma_\theta + \mathbb{U}_\theta \tag{3.13}$$

$\mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right)$ représente le transport d'énergie décorrélée par la vitesse décorrélée. $\mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p)$ est l'échange d'énergie décorrélée entre particules. $W_\theta = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle u''_{p,i}\frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ u''_{p,i}F_{p,i} \right\}_l$ est la variation d'énergie décorrélée due à traînée. $\Gamma_\theta = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{2}\frac{u''_{p,i}u''_{p,i}}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ \frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est la variation d'énergie décorrélée due au transfert de masse avec la phase gazeuse. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes localement mono-diamètre et mono-température, on a : $\Gamma_\theta = \Gamma_l \delta\breve{\theta}_l$. Enfin, $\mathbb{U}_\theta = -\rho_l \breve{\alpha}_l \delta\breve{R}_{l,ij}\frac{\partial \breve{u}_{l,i}}{\partial x_j}$ provient des termes additionnels (Eq. 3.9) et inclut les effets du tenseur décorrélé $\delta\breve{R}_l$ sur l'énergie décorrélée.

Conservation de l'enthalpie sensible

L'enthalpie sensible est définie par : $h_{s,p} = C_{p,l}\left(T_l - T_{l,ref}\right)$, où $C_{p,l}$ est la chaleur massique à pression constante du liquide, T_l est la température de la particule et $T_{l,ref}$ est une température de référence fixée à une valeur proche de T_l de sorte que $C_{p,l}$ puisse être supposée constante entre T_l et $T_{l,ref}$.

En prenant $\Psi = h_{s,p}$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l \breve{\alpha}_l \breve{u}_{l,j} \breve{h}_{s,l} = \mathbb{T}\left(h_p''\right) + \mathbb{C}\left(m_p h_{s,p}\right) + \Lambda_l + \Phi_l \tag{3.14}$$

$\mathbb{T}\left(h_p''\right)$ représente le transport d'enthalpie sensible par la vitesse décorrélée. $\mathbb{C}\left(m_p \mathbf{u}_p\right)$ est l'échange d'enthalpie sensible entre particules. $\Phi_l = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt} \right\rangle_l$ est la variation d'enthalpie sensible due au transfert de chaleur par conduction dans la phase liquide. $\Lambda_l = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle \frac{h_{s,p}}{m_p}\frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \breve{n}_l \left\{ h_{s,p}\frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est la variation d'enthalpie sensible due au transfert de masse avec la phase gazeuse. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes localement mono-diamètre et mono-température, on a : $\mathbb{T}\left(h_p''\right) = 0$ et $\Lambda_l = \Gamma_l \breve{h}_{s,l}$.

3.3.5 Résumé des hypothèses et des équations de conservation de la phase dispersée

Hypothèses simplificatrices

H1 - Les particules sont des gouttes sphériques indéformables[3]

H2 - Le rapport de masse volumique entre le liquide et le gaz permet de supposer que la seule force exercée par le fluide porteur sur les gouttes est la traînée.

H3 - La température (donc l'enthalpie sensible) est homogène à l'intérieur de chaque goutte. Cela revient à supposer une conductivité infinie dans la phase liquide.

H4 - L'effet de la gravité est négligeable[4].

H5 - L'écoulement est dilué ($\breve{\alpha}_l < 0.01$). Par conséquent, les effets d'encombrement volumique de la phase dispersée sur la phase porteuse sont négligeables : la fraction volumique gazeuse vaut $1 - \breve{\alpha}_l \equiv 1$.

H6 - En vertu de l'hypothèse H5, les interactions goutte-goutte sont négligeables : $\mathbb{C} \equiv 0$.

H7 - En vertu de l'hypothèse H5, la phase porteuse est faiblement altérée par la présence du spray ce qui permet d'utiliser une FDP conditionnée par une réalisation unique de la phase porteuse[5].

H8 - Toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre : le spray est dit monodisperse [6].

H9 - Toutes les gouttes possèdent localement la même température. Les hypothèses H8 et H9 autorisent une expression simplifiée des termes Γ_l, $\Gamma_{u,i}$, Γ_θ, Λ_l et Φ_l.

[3]Cette hypothèse revient à supposer que les phases d'atomisation primaire et secondaire sont achevées. Dans un spray, le phénomène de rupture de goutte est caractérisé par le nombre de Weber $We = \rho|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|^2 d/\sigma$ où σ est la tension superficielle du liquide. Les gouttes sont stables en-dessous d'une valeur critique $We_c \approx 12$. Pour $We < 5$, les déformations de l'interface sont négligeables et l'hypothèse de sphéricité est vérifiée (Sirignano, 1999).

[4]Cette hypothèse peut être facilement relaxée par l'ajout d'un terme source dans l'équation de quantité de mouvement (Eq. 3.12) (Riber *et al.*, 2005)

[5]Sa validité devra toutefois être discutée dans le cadre de la combustion diphasique où la présence de la flamme crée des échanges importants de masse, de quantité de mouvement et de chaleur entre le gaz porteur et le spray.

[6]Pour l'extension de cette méthode aux sprays polydisperses, se rapporter à la thèse de Mossa (Mossa, 2005).

Équations de conservation

Sous les hypothèses énoncées ci-dessus, les équations de conservation Eulériennes qui régissent la phase dispersée se résument ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial t}\breve{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_j}\breve{n}_l\breve{u}_{l,j} = 0 \tag{3.15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,j} = -\Gamma \tag{3.16}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i}\breve{u}_{l,j} = \mathbb{T}\left(u''_{p,i}\right) - \Gamma\breve{u}_{l,i} + F_{d,i} \tag{3.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i}\delta\breve{\theta}_l = \mathbb{T}\left(\tfrac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right) + \mathbb{U}_\theta - \Gamma\delta\breve{\theta}_l + W_\theta \tag{3.18}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_{l,i}\breve{h}_{s,l} = -\Gamma\breve{h}_{s,l} + \Phi_l \tag{3.19}$$

On regroupe les Eq. 3.15–3.19 sous la forme compacte utilisée pour la phase gazeuse (cf. section 2.1) :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_l}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{F}_l \;=\; \mathbf{s}_{g\text{-}l} \tag{3.20}$$

où $\mathbf{w}_l = (\breve{n}_l,\, \rho_l\breve{\alpha}_l,\, \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l,\, \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l,\, \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l,\, \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{h}_{s,l}\,)^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec $\breve{u}_l$, $\breve{v}_l$ et $\breve{w}_l$ les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\breve{\mathbf{u}}_l = (\breve{u}_l, \breve{v}_l, \breve{w}_l)^T$. $\mathbf{F}_l$ est le tenseur des flux de la phase liquide composé d'une partie due à la convection par le mouvement mésoscopique $\mathbf{F}_l^M$ et d'une partie due au mouvement décorrélé $\mathbf{F}_l^U$:

$$\mathbf{F}_l = \mathbf{F}_l^M\left(\mathbf{w}_l\right) + \mathbf{F}_l^U\left(\mathbf{u}''_p\right)$$

Les tenseurs $\mathbf{F}_l^M$ et $\mathbf{F}_l^U$ s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_l &= \left(\mathbf{f}_l^M, \mathbf{g}_l^M, \mathbf{h}_l^M\right)^T \\ \mathbf{F}_l^U &= \left(\mathbf{f}_l^U, \mathbf{g}_l^U, \mathbf{h}_l^U\right)^T\end{aligned}$$

Les trois composantes $\mathbf{f}_l^M$, $\mathbf{g}_l^M$ et $\mathbf{h}_l^M$ sont définies par :

$$\mathbf{f}_l^M = \begin{pmatrix} \breve{n}_l\breve{u}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l^2 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\delta\breve{\theta}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \mathbf{g}_l^M = \begin{pmatrix} \breve{n}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{v}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l^2 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\delta\breve{\theta}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\breve{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \mathbf{h}_l^M = \begin{pmatrix} \breve{n}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{u}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{v}_l\breve{w}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l^2 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l\delta\breve{\theta}_l \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\breve{w}_l\breve{h}_{s,l} \end{pmatrix}$$

Les trois composantes du tenseur des flux du mouvement décorrélé $\mathbf{f}_l^U$, $\mathbf{g}_l^U$ et $\mathbf{h}_l^U$ sont :

$$\mathbf{f}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,xx} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,xy} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,xz} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{S}_{l,iix} \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{g}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,xy} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,yy} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,yz} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{S}_{l,iiy} \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{h}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,xz} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,yz} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,zz} \\ \rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{S}_{l,iiz} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{s}_l$ est le vecteur des termes sources composé d'une partie liée aux échanges avec le gaz $\mathbf{s}_{g\text{-}l}$ et d'une partie liée au mouvement décorrélé $\mathbf{s}_\theta$:

$$\mathbf{s}_l = \mathbf{s}_{g\text{-}l} + \mathbf{s}_\theta$$

$\mathbf{s}_{g\text{-}l}$ regroupe les termes de transfert de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec la phase gazeuse :

$$\mathbf{s}_{g\text{-}l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\Gamma \\ -\Gamma\breve{u}_l + F_{d,x} \\ -\Gamma\breve{v}_l + F_{d,y} \\ -\Gamma\breve{w}_l + F_{d,z} \\ -\Gamma\delta\breve{\theta}_l + W_\theta \\ -\Gamma\breve{h}_{s,l} + \Phi_l \end{pmatrix}$$

$\mathbf{s}_\theta$ contient uniquement le terme additionnel apparaissant lors de la dérivation de l'équation de l'énergie décorrélée :

$$\mathbf{s}_\theta = (0,0,0,0,0,\mathbb{U}_\theta,0)^T$$

Les différentes composantes des vecteurs $\mathbf{F}_l^U$, $\mathbf{s}_{g\text{-}l}$ et $\mathbf{s}_\theta$ nécessitent des modèles de fermeture qui sont présentés dans la section 3.4. Finalement, par conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à l'interface, on peut écrire le terme source des équations gazeuses dû aux effets de la phase liquide :

$$\mathbf{s}_{l\text{-}g} = \begin{pmatrix} \Gamma\breve{u}_l - F_{d,x} \\ \Gamma\breve{v}_l - F_{d,y} \\ \Gamma\breve{w}_l - F_{d,z} \\ \Lambda + \Phi + u_i\left(\Gamma\breve{u}_{l,i} - F_{d,i}\right) \\ \Gamma\delta_{k,F} \end{pmatrix}$$

$u_i\Gamma\breve{u}_{l,i}$ et $-u_iF_{d,i}$ représentent respectivement les effets de l'évaporation et de la traînée sur l'énergie cinétique gazeuse. Λ et Φ correspondent au transfert d'énergie interne sensible par évaporation et par conduction thermique gaz-liquide respectivement (cf. section 3.4).

3.4 Modèles de fermeture

3.4.1 Traînée

On rappelle que le terme $\mathbf{F}_d$ dans l'Eq. 3.17 s'exprime en fonction de la force $\mathbf{F}_p$ exercée sur une goutte individuelle :

$$F_{d,i} = \rho_l\breve{\alpha}_l\left\langle\frac{F_{p,i}}{m_p}\right\rangle_l \tag{3.21}$$

Pour des particules denses ($\rho_l \gg \rho_{gaz}$) et de petits diamètres ($d \leq 50\ \mu m$), toutes les forces autres que la traînée peuvent être négligées (cf. section 3.3.5, H2) (Kaufmann, 2004). La force de traînée exercée par le gaz ayant une vitesse $\mathbf{u}$ sur une particule sphérique isolée de masse m_p et de vitesse $\mathbf{u}_p$ est telle que :

$$\frac{F_{p,i}}{m_p} = \frac{1}{\tau_p'}\left(u_i - u_{p,i}\right) \tag{3.22}$$

où τ_p' est le temps de relaxation de la particule exprimé par :

$$\tau_p' = \left(1+0.15Re_p^{0.687}\right)\tau_p \tag{3.23}$$

$$\text{avec} \quad \tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu} \tag{3.24}$$

où Re_p est le Reynolds de goutte défini par :

$$Re_p = \frac{\rho|\mathbf{u}-\mathbf{u}_p|d}{\mu}$$

L'Eq. 3.23 est une corrélation empirique proposée par (Schiller & Nauman, 1935) permettant de corriger le temps de relaxation prédit par le modèle de traînée de Stokes (Eq. 3.24) lorsque Re_p n'est pas petit devant l'unité. Malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le temps de relaxation est le même pour toutes les particules à la position $\mathbf{x}$ et au temps t. D'après la moyenne définie par l'Eq. 3.21, le terme de traînée $\mathbf{F}_d$ s'exprime alors en fonction de la vitesse mésoscopique de la façon suivante :

$$F_{d,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \frac{u_i - \breve{u}_{l,i}}{\tau_p} \tag{3.25}$$

Afin d'évaluer les effets de la traînée sur la phase dispersée, on définit le nombre de Stokes comparant le temps caractéristique de la traînée τ_p au temps caractéristique de l'écoulement :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_L}$$

où $\tau_L = L/|\mathbf{u}|$ avec L une échelle caractéristique de l'écoulement gazeux. St est un indicateur de la réponse de la particule aux variations de vitesse de l'écoulement. Pour $St \ll 1$, la particule se comporte comme un traceur vis-à-vis de l'écoulement gazeux. Pour $St \gg 1$, la particule suit une trajectoire de type « boulet de canon » et ne voit pas les perturbations du gaz. Enfin, pour des Stokes de l'ordre de l'unité, les effets de concentration préférentielle des gouttes dans certaines régions de l'écoulement sont maximaux (Février & Simonin, 2000; Février, 2000; Wang & Maxey, 1993). Ce régime est associé à un mouvement décorrélé important.

On écrit le terme dû à la traînée W_θ dans l'équation de l'énergie décorrélée (Eq. 3.18) à partir de l'expression de la force de traînée pour une goutte individuelle (Eq. 3.22) :

$$W_\theta = \rho_l \breve{\alpha}_l \left\langle u_{p,i}'' \frac{1}{\tau_p}\left(u_i - u_{p,i}\right)\right\rangle_l$$

En notant que $\left\langle u_{p,i}'' u_i \right\rangle_l = u_i \left\langle u_{p,i}'' \right\rangle_l = 0$, on obtient après calcul :

$$W_\theta = -\rho_l \breve{\alpha}_l \frac{2}{\tau_p}\delta\breve{\theta}_l$$

La traînée est donc un terme de destruction de l'énergie décorrélée. En effet, elle tend à imposer à l'ensemble des particules une vitesse proche de celle du gaz en atténuant les écarts vis-à-vis de cette vitesse suivant la loi de Stokes.

3.4.2 Évaporation

Cette section décrit le modèle d'évaporation utilisé dans AVBP. Le taux d'évaporation du spray Γ intervenant dans les Eq. 3.15 à 3.19 s'exprime en fonction du taux de variation de masse lagrangien $\dot{m}_p = dm_p/dt$ de la façon suivante :

$$\Gamma = -\check{n}_l \{\dot{m}_p\}_l \tag{3.26}$$

Description du modèle

De nombreux modèles de complexité variable existe dans la littérature (une revue est effectuée dans Boileau *et al.* (2008*a*)). L'approche choisie dans AVBP est une déclinaison du modèle de Spalding (1953*a*,*b*) avec hypothèse de température uniforme à l'intérieur de la goutte. Ce modèle représente un compromis satisfaisant entre un faible coût de calcul et la prise en compte du phénomène de dépendance entre la température des gouttes et le taux d'évaporation. Ce phénomène physique est important dans le cas de la combustion où les variations de température importantes induisent des effets de préchauffage du liquide qui conditionnent le temps d'évaporation (Hubbard *et al.*, 1975) donc de combustion.

Les trois hypothèses principales de ce modèle sont les suivantes :
- les gouttes sont sphériques et isolées ;
- la conductivité thermique de la phase liquide est infinie d'où une température uniforme au sein de chaque goutte ;
- l'interface liquide/gaz est à l'équilibre thermodynamique ce qui permet d'utiliser la loi de Clausius-Clapeyron.

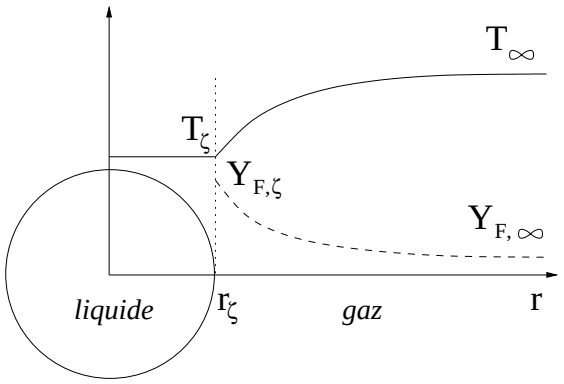


FIG. 3.2 - *Schéma d'une goutte isolée à la température T_ζ qui s'évapore dans un gaz possédant une température T_∞ et une fraction massique de carburant $Y_{F,\infty}$*

Taux de transfert de masse

(Kuo, 2005) décrit comment obtenir le taux d'évaporation $\dot{m}_p$ d'une gouttelette isolée (Fig. 3.2) en intégrant l'équation de conservation de la fraction massique de carburant gazeux (indice F) entre le rayon d'interface r_ζ et un rayon infini. Cette méthode aboutit à une expression de $\dot{m}_p$ qui ne dépend que des variables en $r = r_\zeta$ et en $r \to \infty$:

$$\dot{m}_p = -\pi d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \tag{3.27}$$

Sh est le nombre de Sherwood donné par la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3} \tag{3.28}$$

où $0.55 Re_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3}$ est la correction traduisant les effets convectifs liés à la vitesse relative entre la goutte et le gaz porteur.
Le produit $[\rho D_F]$ s'obtient à partir du nombre de Schmidt du carburant Sc_F :

$$[\rho D_F] = \frac{\mu}{Sc_F}$$

B_M est le nombre de Spalding de masse qui fait apparaître la différence de fraction massique de carburant gazeux entre l'interface et l'infini :

$$B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \tag{3.29}$$

$Y_{F,\zeta}$ peut s'écrire en fonction de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$:

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W_F}{X_{F,\zeta} W_F + \left(1 - X_{F,\zeta}\right) \overline{W}_{nF,\zeta}} \tag{3.30}$$

où $\overline{W}_{nF,\zeta}$ est la masse molaire moyenne du *pseudo*-mélange constitué d'espèces autres que le carburant. En supposant que la composition de ce mélange est la même entre ζ et ∞, on a :

$$\overline{W}_{nF,\zeta} = \overline{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{\overline{W}}{W_F}} \overline{W} \tag{3.31}$$

$X_{F,\zeta}$ est fourni par la loi de Dalton pour un mélange idéal de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{P} \tag{3.32}$$

où $P_{F,\zeta}$ est la pression partielle de carburant gazeux à l'interface donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc} \; exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathscr{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta} \right) \right) \tag{3.33}$$

P_{cc} et T_{cc} sont respectivement la pression et la température de référence qui correspondent à un point de la courbe de saturation du carburant. L_v est la chaleur latente massique d'évaporation qui représente la différence entre l'enthalpie gazeuse et liquide du carburant à la température de référence T_{ref} :

$$L_v = \Delta h_{s,F}\left(T_{ref}\right) = h_{s,F}\left(T_{ref}\right) - h_{s,p}\left(T_{ref}\right)$$

Dans l'Eq. 3.33, la variable manquante est la température de l'interface T_ζ que l'on suppose égale à celle de la goutte : $T_\zeta = T_p$ (cf. section 3.3.5, H3). Dans les Eq. 3.29 et 3.31, la condition ∞ correspond à l'état du gaz non pertubé par la présence de la goutte. Dans le cadre des écoulements dilués (cf. section 3.3.5, H5), on suppose que la distance inter-gouttes est suffisamment grande pour que les gouttes ne s'influencent pas mutuellement. Par conséquent, l'état ∞ est représenté par la valeur locale eulérienne dans la phase gazeuse.

D'après l'hypothèse H9 (cf. section 3.3.5), à la position $\mathbf{x}$ et à l'instant t, toutes les gouttes possèdent la même température T_p donc le même nombre de Spalding B_M. Par ailleurs, malgré la dépendance de

Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le nombre de Sherwood (Eq. 3.28) est également constant à $\mathbf{x}$ et t donnés. En rappelant que le spray est supposé monodisperse (cf. section 3.3.5, H8), le taux d'évaporation moyen du spray Γ est finalement obtenu à partir du taux d'évaporation lagrangien $\dot{m}_p$ donné par l'Eq. 3.27 en appliquant la moyenne définie par l'Eq. 3.26 :

$$\Gamma = \pi \check{n}_l d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1+B_M)$$

Taux de transfert de chaleur

Le taux de transfert de masse $\dot{m}_p$ étant connu, on cherche à déterminer le taux de transfert de chaleur entre phases. On estime le flux conductif gazeux à l'interface à partir de la loi de Stefan dérivée pour une particule en l'absence de changement de phase :

$$\phi_g^c = \left(-4\pi r^2 \lambda \frac{dT}{dr}\right)_{\zeta^+} = \pi d Nu \lambda \left(T_\zeta - T_\infty\right) \frac{ln(B_T+1)}{B_T} \tag{3.34}$$

Nu est le nombre de Nusselt que l'on exprime de façon analogue au nombre de Sherwood (Eq. 3.28) en utilisant la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3}$$

La conductivité thermique du gaz λ est obtenue à partir du nombre de Prandtl Pr :

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr}$$

B_T est le coefficient e Spalding pour la température défini par :

$$B_T = (1+B_M)^{Sh/(NuLe_F)} - 1$$

où le nombre de Lewis pour l'espèce évaporante est : $Le_F = Sc_F/Pr$.

Le bilan d'énergie à l'interface s'écrit :

$$\phi_p^t + \phi_g^t = 0 \tag{3.35}$$

$$\text{soit :} \quad \phi_p^{\text{ev}} + \phi_p^c + \phi_g^{\text{ev}} + \phi_g^c = 0 \tag{3.36}$$

$$\text{avec :} \quad \phi_p^{\text{ev}} = \dot{m}_p h_{s,p}(T_\zeta) \quad \text{et} \quad \phi_g^{\text{ev}} = -\dot{m}_p h_{s,F}(T_\zeta) \tag{3.37}$$

ϕ_p^t et ϕ_g^t sont les flux totaux d'enthalpie entrant dans la goutte et dans le gaz respectivement. ϕ_p^c et ϕ_g^c sont les flux conductifs entrant dans la goutte et dans le gaz respectivement. ϕ_p^{ev} et ϕ_g^{ev} sont les flux d'enthalpie par changement de phase dans la goutte et dans le gaz respectivement, dont la somme vaut ϕ^{ev} :

$$\phi^{\text{ev}} = \dot{m}_p \left(h_{s,p}(T_\zeta) - h_{s,F}(T_\zeta)\right) = \dot{m}_p \Delta h_{s,F}\left(T_\zeta\right) = \phi_g^c + \phi_p^c \tag{3.38}$$

L'Eq. 3.38 signifie que l'enthalpie absorbée par évaporation ($\phi^{\text{ev}} < 0$) imposée par la loi de Spalding (Eq. 3.27) est puisée dans le gaz via le flux conductif ϕ_g^c (généralement, le gaz est plus chaud que la goutte d'où : $\phi_g^c < 0$). L'excès/le défaut d'enthalpie est fourni/prélevé à la phase liquide via le flux conductif ϕ_p^c.

Les différents taux de variation d'énergie dans le spray et dans le gaz sont notés de la façon suivante :

Taux de transfert de chaleur	*vers le gaz*	*vers le liquide*
par changement de phase	Λ	Λ_l
par conduction thermique	Φ	Φ_l
total	$\Pi = \Lambda + \Phi$	$\Pi_l = \Lambda_l + \Phi_l$

À partir de la moyenne d'ensemble $\{\cdot\}_l$ des flux d'enthalpie par conduction et évaporation d'une goutte isolée, on exprime les taux de transferts de chaleur du spray Λ, Λ_l, Φ et Φ_l en fonction des variables lagrangiennes, soit respectivement :

$$\begin{aligned}
\Lambda &= \breve{n}_l \left\{ -\dot{m}_p h_{s,F}\left(T_\zeta = T_p\right) \right\}_l \\
\Lambda_l &= \breve{n}_l \left\{ \dot{m}_p \left(h_{s,p}\left(T_\zeta = T_p\right) + h_{s,corr} \right) \right\}_l \\
\Phi &= \breve{n}_l \left\{ \phi_g^c \right\}_l \\
\Phi_l &= \breve{n}_l \left\{ \phi_p^c \right\}_l
\end{aligned}$$

La signification de la correction de référence de l'enthalpie $h_{s,corr}$ dans l'Eq. 3.39 est précisée dans la sous-section suivante. Le bilan interfacial d'enthalpie à l'échelle du spray s'écrit de la façon suivante :

$$\Pi + \Pi_l = \Lambda + \Phi + \Lambda_l + \Phi_l = 0 \tag{3.39}$$

Malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le nombre de Nusselt (Eq. 3.28) est constant pour toutes les particules à la position $\mathbf{x}$ et au temps t. On obtient alors les taux de transfert de chaleur du spray en fonction des variables moyennes liquides et des variables gazeuses :

$$\begin{aligned}
\Lambda &= \Gamma h_{s,F}(\breve{T}_l) \\
\Lambda_l &= -\Gamma \left(\breve{h}_{s,l} - h_{s,corr} \right) \\
\Phi &= \pi \breve{n}_l d Nu \lambda \left(\breve{T}_l - T_\infty \right) \frac{ln(B_T + 1)}{B_T} \\
\Phi_l &= -\left(\Lambda + \Phi + \Lambda_l \right)
\end{aligned}$$

Valeur de référence pour l'enthalpie liquide

Une précaution est nécessaire lorsqu'on calcule le flux d'enthalpie dans la phase liquide via le bilan interfacique faisant intervenir les enthalpies gazeuses (Eq. 3.37). En effet, l'enthalpie liquide $h_{s,p}\left(T_\zeta\right)$ est définie à partir d'une valeur de référence différente de celle de l'enthalpie gazeuse $h_{s,F}\left(T_\zeta\right)$. Pour tenir compte de cet écart de référence, on ajoute le terme suivant au flux d'enthalpie dans la phase liquide :

$$+\dot{m}_p h_{s,corr} \qquad \text{avec} \quad h_{s,corr} = h_{s,F}\left(T_{l,ref}\right) - L_v \tag{3.40}$$

L'Eq. 3.40 assure que le saut interfacial d'enthalpie sensible est bien égal à l'enthalpie latente d'évaporation.

Coefficients de transport diffusif

Dans les Eq. 3.27 et 3.34, les propriétés de transport diffusif sont supposées constantes lors de l'intégration des équations de conservation. En réalité, les coefficients $[\rho D_F]$ et λ varient du fait du changement de composition et de température entre r_ζ et l'infini. Cette variation peut être prise en compte en

choisissant judicieusement les valeurs de référence pour le calcul de ces coefficients :

$$T_{ref} = (1-a)\,T_\zeta + aT_\infty \tag{3.41}$$
$$Y_{k,ref} = (1-a)\,Y_{k,\zeta} + aY_{k,\infty} \tag{3.42}$$

où $a = 1/3$ comme préconisé par Hubbard *et al.* (1975) et Versaevel (1996).

3.4.3 Mouvement décorrélé

La modélisation du mouvement décorrélé dans le contexte mésoscopique eulérien est décrite en détail dans la thèse de Riber (2007). La section suivante en fait le résumé.

L'effet du mouvement décorrélé sur le mouvement mésoscopique est contenu dans le terme $\mathbb{T}\left(u''_{p,i}\right)$ de l'équation de quantité de mouvement Eq. 3.17). Ce terme s'exprime en fonction du tenseur des vitesses décorrélées $\delta\breve{R}_l$:

$$\mathbb{T}\left(u''_{p,i}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l \breve{\alpha}_l \delta\breve{R}_{l,ij}$$

Afin de rendre compte de l'effet du mouvement décorrélé sur le mouvement mésoscopique, le tenseur des vitesses décorrélées $\delta\breve{R}_l$ doit être modélisé. En écrivant l'Eq. 3.6, on a décomposé $\delta\breve{R}_l$ en sa demi-trace $\delta\breve{\theta}_l$, l'énergie décorrélée, dont on a écrit l'équation de conservation (Eq. 3.18), et sa partie déviatorique $\delta\breve{R}^*_l$ qui nécessite un modèle de fermeture. En faisant une hypothèse d'équilibre local et en négligeant les corrélations d'ordre 3, $\delta\breve{R}^*_l$ peut s'écrire :

$$\delta\breve{R}^*_{l,ij} = -\frac{\tau_p}{2}\left(\delta\breve{R}_{l,il}\frac{\partial\breve{u}_{l,j}}{\partial x_l} + \delta\breve{R}_{l,jl}\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_l} - \frac{2}{3}\delta\breve{R}_{l,lm}\frac{\partial\breve{u}_{l,l}}{\partial x_m}\delta_{ij}\right)$$

Par ailleurs, en supposant l'équilibre du tenseur d'anisotropie défini par :

$$a_{l,ij} = (\delta\breve{R}_{l,il} - 2/3\delta\breve{\theta}_l\delta_{ij})/2/3\delta\breve{\theta}_l\delta_{ij}$$

et que l'anisotropie est négligeable ($a_{l,ij}a_{l,ij} \ll 1$), $\delta\breve{R}^*_l$ peut être représenté par un modèle de type visqueux (Simonin *et al.*, 2002) :

$$\delta\breve{R}^*_{l,ij} = -\nu_{RUM}\left(\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\breve{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3}\frac{\partial\breve{u}_{l,l}}{\partial x_l}\delta_{ij}\right)$$

où la viscosité ν_{RUM} s'écrit :

$$\nu_{RUM} = \frac{1}{3}\tau_p\delta\breve{\theta}_l$$

Connaissant $\delta\breve{R}^*_l$, on exprime $\mathbb{U}_\theta$ comme la somme de deux termes :

$$\mathbb{U}_\theta = -\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}^*_{l,ij}\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3}\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{\theta}_l\frac{\partial\breve{u}_{l,j}}{\partial x_j}$$

où le premier terme représente la production d'énergie décorrélée par la partie déviatorique du tenseur des vitesses décorrélées et le second contient les effets de divergence du champ mésoscopique.

Dans l'équation de conservation de $\delta\breve{\theta}_l$ (Eq. 3.18), le flux d'énergie décorrélée par le mouvement décorrélé $\mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right)$ fait intervenir le tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta\breve{S}_l$:

$$\mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right) = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{S}_{l,iij}$$

Kaufmann (2004) suggèrent de modéliser $\delta\breve{S}_l$ par une loi de type diffusif :

$$\delta\breve{S}_{l,iij} = \kappa_{RUM}\frac{\partial\delta\breve{\theta}_l}{\partial x_j} \tag{3.43}$$

Dans l'Eq. 3.43, κ_{RUM} est un coefficient de diffusion estimé par un modèle analogue à celui fourni dans l'approche RANS à deux fluides de Simonin (1996*a*) :

$$\kappa_{RUM} = \frac{5}{3}\tau_p\delta\breve{\theta}_l$$

D'après l'Eq. 3.6, $\delta\breve{R}_l$ est constitué d'une partie déviatorique $\delta\breve{R}^*_l$ et de sa demi-trace $\delta\breve{\theta}_l$, l'énergie décorrélée. L'équation de transport de $\delta\breve{\theta}_l$ (Eq. 3.18) fait apparaît $\delta\breve{R}^*_l$ (via le terme $\mathbb{U}_\theta$) ainsi que le terme de transport de l'énergie décorrélée par le mouvement décorrélé ayant pour expression :

$$\mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right) = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{S}_{l,iij}$$

où $\delta\breve{S}_l$ est le tenseur triple des vitesses décorrélées. $\delta\breve{R}^*_l$ et $\delta\breve{S}_l$ nécessitent donc des modèles de fermeture. En utilisant une hypothèse d'équilibre, (Kaufmann *et al.*, 2002*a*) proposent de modéliser $\delta\breve{R}^*_l$ par un terme de type visqueux et $\delta\breve{S}_l$ par un terme diffusif :

$$\begin{aligned}
\delta\breve{R}^*_l &= -\nu_{RUM}\left(\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\breve{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\breve{u}_{l,k}}{\partial x_k}\right)\\
\delta\breve{S}_{l,iij} &= -\kappa_{RUM}\frac{\partial}{\partial x_j}\delta\breve{\theta}_l
\end{aligned}$$

La viscosité ν_{RUM} et la diffusivité κ_{RUM} sont obtenues grâce à des tests *a priori* dans une turbulence homogène isotrope décroissante avec particules (Moreau *et al.*, 2005) :

$$\begin{aligned}
\nu_{RUM} &= \frac{1}{3}\tau_p\delta\breve{\theta}_l\\
\kappa_{RUM} &= \frac{10}{27}\tau_p\delta\breve{\theta}_l
\end{aligned}$$

où τ_p est le temps de relaxation caractéristique de la traînée (cf. section 3.4.1). Connaissant $\delta\breve{R}^*_l$, on peut exprimer $\mathbb{U}_\theta$ comme la somme de deux termes :

$$\mathbb{U}_\theta = -\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}^*_{l,ij}\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3}\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{\theta}_l\frac{\partial\breve{u}_{l,j}}{\partial x_j}$$

où le premier terme représente la production d'énergie décorrélée par la partie déviatorique du tenseur des vitesses décorrélées et le second contient les effets de divergence du champ mésoscopique.

3.4.4 Récapitulatif des termes modélisés

La section suivante résume les expressions des différents modèles pour les grandeurs non résolues dans les équations de conservation eulériennes de la phase dispersée.

• **Force de traînée $\mathbf{F}_d$:**

$$F_{d,i} = \rho_l \breve{\alpha}_l \frac{u_i - \breve{u}_{l,i}}{\tau_p}$$

• **Destruction de l'énergie décorrélée par la traînée W_θ :**

$$W_\theta = -\rho_l \breve{\alpha}_l \frac{2}{\tau_p} \delta\breve{\theta}_l$$

• **Taux d'évaporation Γ :**

$$\Gamma = \pi \breve{n}_l d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1 + B_M)$$

• **Taux de transfert de chaleur par évaporation Λ et Λ_l :**

$$\begin{aligned} \text{dans le gaz :} \quad \Lambda &= \Gamma h_{s,F}(\breve{T}_l) \\ \text{dans le liquide :} \quad \Lambda_l &= -\Gamma \left(\breve{h}_{s,l} + h_{s,corr} \right) \end{aligned}$$

• **Taux de transfert de chaleur par conduction Φ et Φ_l :**

$$\begin{aligned} \text{dans le gaz :} \quad \Phi &= \pi \breve{n}_l d\, Nu \lambda (\breve{T}_l - T_\infty) \frac{ln(B_T + 1)}{B_T} \\ \text{dans le liquide :} \quad \Phi_l &= -(\Phi + \Lambda + \Lambda_l) \end{aligned}$$

• **Tenseur des vitesses décorrélées $\delta\breve{R}_l$:**

$$\begin{aligned} \delta\breve{R}_{l,ij} &= \delta\breve{R}^*_{l,ij} + \frac{2}{3}\delta\breve{\theta}_l \delta_{ij} \\ \text{avec} \quad \delta\breve{R}^*_{l,ij} &= -\nu_{RUM} \left(\frac{\partial \breve{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \breve{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \frac{\partial \breve{u}_{l,l}}{\partial x_l} \delta_{ij} \right) \\ \text{et} \quad \nu_{RUM} &= \frac{1}{3} \tau_p \delta\breve{\theta}_l \end{aligned}$$

• **Tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta\breve{S}_l$:**

$$\begin{aligned} \delta\breve{S}_{l,iij} &= \kappa_{RUM} \frac{\partial \delta\breve{\theta}_l}{\partial x_j} \\ \text{avec} \quad \kappa_{RUM} &= \frac{5}{3} \tau_p \delta\breve{\theta}_l \end{aligned}$$

Chapitre 4

Équations pour la SGE diphasique réactive

Dans ce chapitre, on présente tout d'abord les équations de conservation pour le gaz (section 4.1) puis les modèles de sous-maille correspondants (section 4.2). Le filtrage LES des équations de la phase liquide est décrit dans la section 4.3 et la modélisation du mouvement de sous-maille liquide est détaillée dans la section 4.4. La section 4.5 présente le modèle de combustion turbulente choisi dans cette étude : le modèle de flamme épaissie.

4.1 Équations LES pour la phase gazeuse

4.1.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes

La procédure de filtrage consiste à définir la quantité filtrée $\overline{f}$ comme le produit de convolution de la quantité non filtrée f avec un filtre spatial $G_{\triangle}$ de taille caractéristique $\triangle$:

$$\overline{f}(x) = \int f(x)\, G_{\triangle}\left(x' - x\right) dx' \tag{4.1}$$

Le filtre $G_{\triangle}$ est classiquement de type boîte ou Gaussien (Sagaut, 1998*b*). La quantité filtrée $\overline{f}$ est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \overline{f}$. Pour les écoulements à masse volumique variable, il est pratique d'utiliser une moyenne pondérée par la masse volumique ou *moyenne de Favre*, définie par :

$$\overline{\rho}\widetilde{f} = \overline{\rho f} \tag{4.2}$$

On obtient les équations de conservation de type LES en filtrant les équations de Navier-Stokes instantanées (Eq. 2.1) :

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}} \;=\; \overline{\mathbf{s}} \tag{4.3}$$

où $\overline{\mathbf{s}}$ est le terme source filtré et $\overline{\mathbf{F}}$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois contributions : $\overline{\mathbf{F}} = \overline{\mathbf{F}}^I + \overline{\mathbf{F}}^V + \overline{\mathbf{F}}^t$ avec le tenseur des flux convectifs résolus $\overline{\mathbf{F}}^I = \left(\overline{\mathbf{f}}^I, \overline{\mathbf{g}}^I, \overline{\mathbf{h}}^I\right)^T$, le tenseur des flux diffusifs

résolus $\overline{\mathbf{F}}^V = \left(\overline{\mathbf{f}}^V, \overline{\mathbf{g}}^V, \overline{\mathbf{h}}^V\right)^T$ et le tenseur des flux de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t = \left(\overline{\mathbf{f}}^t, \overline{\mathbf{g}}^t, \overline{\mathbf{h}}^t\right)^T$. Le terme source $\overline{\mathbf{s}}$ est traité individuellement.

L'échelle de coupure est fixée par la taille de la maille (filtrage implicite). De manière classique, on suppose qu'il y a commutation entre l'opérateur de filtrage et les opérateurs de dérivée partielle.

4.1.2 Flux convectifs résolus

Les trois composantes du tenseur des flux convectifs résolus $\overline{\mathbf{F}}^I$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{u} + \overline{P\,u} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{u} \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{v} + \overline{P\,v} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{v} \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w} \\ \overline{\rho}\widetilde{w}^2 + \overline{P} \\ \overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{w} + \overline{P\,w} \\ \overline{\rho}_k\widetilde{w} \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

4.1.3 Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs résolus $\overline{\mathbf{F}}^V$ sont définies par :

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{f}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xx}} + \overline{v\,\tau_{xy}} + \overline{w\,\tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xy}} + \overline{v\,\tau_{yy}} + \overline{w\,\tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \\ \overline{\mathbf{h}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u\,\tau_{xz}} + \overline{v\,\tau_{yz}} + \overline{w\,\tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4.5}$$

D'après Poinsot & Veynante (2005) Chap. 4, les termes de diffusion en LES s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}$

$$\begin{aligned} \overline{\tau_{ij}} &= \overline{2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}\right)} \approx 2\overline{\mu}\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}\right) \\ \text{avec :} \quad \widetilde{S}_{ij} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_j}\right) \text{ et } \overline{\mu} \approx \mu(\widetilde{T}) \end{aligned} \tag{4.6}$$

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

$$\text{en non réactif :} \quad \overline{J_{i,k}} = -\overline{\rho\left(D_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c\right)} \tag{4.7}$$

$$\textit{approximation :} \quad \overline{J_{i,k}} \approx -\overline{\rho}\left(\overline{D}_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y}_k\widetilde{V}_i^c\right) \tag{4.8}$$

$$\text{avec :} \quad \widetilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^{N}\overline{D}_k\frac{W_k}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \tag{4.9}$$

$$\overline{D}_k \approx \frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho}\,Sc_k} \tag{4.10}$$

Fux de chaleur $\overline{q_i}$

$$\text{en non réactif :} \quad \overline{q_i} = -\overline{\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}} + \sum_{k=1}^{N}\overline{J_{i,k}h_{s,k}} \tag{4.11}$$

$$\textit{approximation :} \quad \overline{q_i} \approx -\overline{\lambda}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}\overline{J_{i,k}}\widetilde{h}_{s,k} \tag{4.12}$$

$$\text{avec :} \quad \overline{\lambda} \approx \frac{\overline{\mu}\,\overline{C}_p(\widetilde{T})}{Pr} \tag{4.13}$$

Les variations spatiales des flux de diffusion moléculaire sont considérées comme suffisamment faibles pour être évaluées par un modèle de type gradient. Les équations de conservation font apparaître des termes de sous-maille dont la modélisation est présentée dans la section 4.1.4.

4.1.4 Termes de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ sont définies par :

$$\vec{\mathbf{f}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \vec{\mathbf{g}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \vec{\mathbf{h}}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix} \tag{4.14}$$

Les différents termes s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j\right) \tag{4.15}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{\tau_{ij}}^t = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t\left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}\right) \tag{4.16}$$

La viscosité turbulente ν_t est calculée par le modèle de sous-maille et détaillée en section 4.2.

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

$$\overline{J_{i,k}}^t = \overline{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k\right) \tag{4.17}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{J_{i,k}}^t = -\overline{\rho}\left(D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y}_k \widetilde{V}_i^{c,t}\right) \tag{4.18}$$

$$\text{avec :} \quad \widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^{N} D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \tag{4.19}$$

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \tag{4.20}$$

De manière usuelle, le nombre de Schmidt turbulent est fixé à $Sc_k^t = 1$ pour toutes les espèces.

Flux de chaleur $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \overline{\rho}\left(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u}_i \widetilde{E}\right) \tag{4.21}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h}_{s,k} \tag{4.22}$$

$$\text{avec :} \quad \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \tag{4.23}$$

Dans les simulations présentées ici, le nombre de Prandtl turbulent a été fixé à $Pr_t = 0.7$ (Moin & Kim, 1982), valeur classique en RANS. Pour la LES, on trouve dans la littérature des valeurs pouvant varier de 0.2 à plus de 1 en fonction de l'application.

4.2 Modèles de sous-maille

L'effet du mouvement de sous-maille sur le mouvement résolu est représenté par le tenseur des flux de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ dont la modélisation est requise.

Les équations de conservation d'un écoulement compressible turbulent filtrées font apparaître des tenseurs et des vecteurs de sous-maille (notée SGS pour *sub-grid scale*) 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. Une telle approche suppose que les effets de sous-maille soient uniquement d'ordre dissipatif. Cette hypothèse est valide si l'on applique la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov (1941). En introduisant la notion de viscosité turbulente, on définit la forme générale suivante pour les modèles SGS :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j\right) \tag{4.24}$$

$$\textit{modèle :} \quad \overline{\tau_{ij}}^t = 2\,\overline{\rho}\,\nu_t\,\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\,\overline{\tau_{ll}}^t\,\delta_{ij} \tag{4.25}$$

$$\text{avec :} \quad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\,\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij} \tag{4.26}$$

où $\overline{\tau_{ij}}^t$ 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 différents modèles se distinguent par la définition et le calcul de la viscosité turbulente de sous-maille ν_t.

4.2.1 Modèle de Smagorinsky

Dans le modèle de Smagorinsky classique (Smagorinsky, 1963), la viscosité turbulente s'écrit :

$$\nu_t = (C_S \triangle)^2 \sqrt{2\,\widetilde{S}_{ij}\,\widetilde{S}_{ij}} \qquad \text{avec :} \qquad C_S = (0.1 - 0.18) \qquad \text{suivant la configuration} \tag{4.27}$$

Développé dans les années 1960, le modèle de Smagorinsky (1963) fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur divers types d'écoulement. Il est très répandu du fait de sa simplicité. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, il fournit le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Toutefois, ce modèle est connu pour être trop dissipatif, particulièrement près des parois, et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée (Sagaut, 1998*a*).

4.2.2 Modèle de Yoshizawa

Yoshizawa & Horiuti (1985) ont introduit un modèle pour rendre compte des effets de compressibilité dans le modèle de Smagorinsky classique en introduisant un terme sphérique non nul pour modéliser le tenseur de Reynolds τ^t_{ij}. Un terme de pression de sous-maille apparaît alors et le modèle s'écrit finalement :

$$\overline{\tau_{ll}}^t = \frac{4}{3} C_Y \triangle^2 \left(\widetilde{S}_{ij}\,\widetilde{S}_{ij}\right) \qquad \text{avec :} \qquad C_Y = 0.039 \tag{4.28}$$

4.2.3 Modèle WALE

Le modèle WALE (pour *wall adapting linear eddy*) a été développé par Nicoud *et al.* (1999) afin de pallier le défaut du modèle de Smagorinsky classique (cf. section 4.2.1) concernant les écoulements en proche paroi. Dans ce modèle, la viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = (C_w \triangle)^2 \frac{(s^d_{ij} s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s^d_{ij} s^d_{ij})^{5/4}} \qquad \text{avec :} \qquad s^d_{ij} = \frac{1}{2}\,(\widetilde{g}^2_{ij} + \widetilde{g}^2_{ji}) - \frac{1}{3}\,\widetilde{g}^2_{kk}\,\delta_{ij} \tag{4.29}$$

C_w est la constante du modèle dont la valeur est fixée à : $C_w = 0.4929$, s^d_{ij} la partie déviatrice du taux de déformations résolu et $\widetilde{g}_{ij}$ est le gradient du vecteur vitesse résolu.

D'autres modèles plus complexes existent. On peut citer notamment le modèle de dynamique de Germano *et al.* (1991) et les modèles à fonction de structure développés par Lesieur (1997). Eulérien

4.3 Équations LES pour la phase dispersée

4.3.1 Filtrage LES des équations de conservation

Le filtrage LES de la phase dispersée est analogue à celui de la phase gazeuse. La moyenne de Favre d'une fonction Eulérienne mésoscopique $\breve{f}_l$ de la phase dispersée est similaire à celle d'une fonction f

de la phase gazeuse et s'obtient en remplaçant la masse volumique gazeuse ρ par la fraction volumique liquide mésoscopique $\breve{\alpha}_l$ dans l'Eq. 4.2, ρ_l étant considéré constant :

$$\overline{\alpha}_l \hat{f}_l = \overline{\breve{\alpha}_l \breve{f}_l} \tag{4.30}$$

où $\overline{\alpha}_l$ est la fraction volumique de liquide filtrée au sens de la LES. Pour alléger les notations, on omet l'indice $\breve{}$ dans la mesure où le filtrage LES de la phase dispersée ne s'applique que sur des quantités initialement produites par l'approche statistique mésoscopique.

Afin d'avoir une équivalence entre la moyenne de Favre basée sur la fraction volumique et la densité de gouttes, on fait l'hypothèse que l'écoulement est monodisperse à l'échelle de la taille du filtre. Cela revient à négliger les effets de variance de sous-maille du diamètre des gouttes : $\overline{d} \approx d$. On a alors :

$$\overline{\breve{n}_l \breve{f}_l} = \overline{\frac{6\breve{\alpha}_l}{\pi d^3} \breve{f}_l} = \frac{6}{\pi d^3} \overline{\alpha}_l \hat{f}_l = \overline{n}_l \hat{f}_l \tag{4.31}$$

où $\overline{n}_l$ est la densité de goutte filtrée.

En appliquant la procédure de filtrage aux équations de conservation Eulériennes de la phase dispersée, on obtient les équations de conservation LES pour le spray :

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{w}}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{F}}_l \; = \; \bar{\mathbf{s}}_l \tag{4.32}$$

où $\overline{\mathbf{w}}_l = (\overline{n}_l, \rho_l \overline{\alpha}_l, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{w}_l, \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta\theta}_l, \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{h}_l)^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec $\hat{u}_l$, $\hat{v}_l$ et $\hat{w}_l$ les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\hat{\mathbf{u}}_l = (\hat{u}_l, \hat{v}_l, \hat{w}_l)^T$. $\bar{\mathbf{s}}_l$ est le terme source filtré et $\overline{\mathbf{F}}_l$ est le tenseur des flux filtrés composé de deux contributions :

$$\overline{\mathbf{F}}_l \quad = \quad \overline{\mathbf{F}}_l^M + \overline{\mathbf{F}}_l^U + \overline{\mathbf{F}}_l^t \tag{4.33}$$

avec

$$\text{tenseur des flux mésoscopiques résolus :} \quad \overline{\mathbf{F}}_l^M \quad = \quad \left(\overline{\mathbf{f}}_l^M, \overline{\mathbf{g}}_l^M, \overline{\mathbf{h}}_l^M\right)^T \tag{4.34}$$

$$\text{tenseur des flux décorrélés résolus :} \quad \overline{\mathbf{F}}_l^U \quad = \quad \left(\overline{\mathbf{f}}_l^U, \overline{\mathbf{g}}_l^U, \overline{\mathbf{h}}_l^U\right)^T \tag{4.35}$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille :} \quad \overline{\mathbf{F}}_l^t \quad = \quad \left(\overline{\mathbf{f}}_l^t, \overline{\mathbf{g}}_l^t, \overline{\mathbf{h}}_l^t\right)^T \tag{4.36}$$

4.3.2 Flux mésoscopiques résolus

Les trois composantes du tenseur des flux mésoscopiques résolus $\overline{\mathbf{F}}_l^M$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}_l^M = \begin{pmatrix} \overline{n}_l \hat{u}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l^2 \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \widehat{\delta\theta}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{h}_l \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}_l^M = \begin{pmatrix} \overline{n}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l^2 \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l \widehat{\delta\theta}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{h}_l \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{h}}_l^M = \begin{pmatrix} \overline{n}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{w} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{w}_l^2 \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{w}_l \widehat{\delta\theta}_l \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{w}_l \hat{h}_l \end{pmatrix} \tag{4.37}$$

4.3.3 Flux décorrélés résolus

Les trois composantes du tenseur des flux résolus du mouvement décorrélé $\overline{\mathbf{F}}_l^U$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xx} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xy} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xz} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,iix} \\ 0 \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xy} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yy} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yz} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,iiy} \\ 0 \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{h}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xz} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yz} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,zz} \\ \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,iiz} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.38}$$

Pour les tenseurs $\widehat{\delta R}_l$ et $\widehat{\delta S}_l$, on utilise la décomposition (partie déviatorique + énergie décorrélée) et la fermeture proposées dans la section 3.4.3 en remplaçant les grandeurs non filtrées par les grandeurs filtrées :

$$\widehat{\delta R}_{l,ij} = \widehat{\delta R^*}_{l,ij} + \frac{2}{3}\widehat{\delta\theta}_l \delta_{ij} \tag{4.39}$$

$$\widehat{\delta R^*}_{l,ij} = -\hat{\nu}_{RUM}\left(\frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{\delta_{ij}}{3}\frac{\partial \hat{u}_{l,k}}{\partial x_k}\right) \tag{4.40}$$

$$\widehat{\delta S}_{l,iij} = -\hat{\kappa}_{RUM}\frac{\partial \widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_j} \tag{4.41}$$

où $\hat{\nu}_{RUM}$ et $\hat{\kappa}_{RUM}$ s'expriment également en fonction des grandeurs filtrées :

$$\hat{\nu}_{RUM} = \frac{1}{3}\overline{\tau}_p \widehat{\delta\theta}_l \tag{4.42}$$

$$\hat{\kappa}_{RUM} = \frac{5}{3}\overline{\tau}_p \widehat{\delta\theta}_l \tag{4.43}$$

où le temps de relaxation filtré $\overline{\tau}_p$ est obtenu via l'approximation suivante :

$$\overline{\tau}_p \approx \left(1 + 0.15\overline{Re}_p^{0.687}\right)\frac{\rho_l d^2}{18\overline{\mu}} \tag{4.44}$$

$$\text{avec :} \qquad \overline{Re}_p \approx \frac{\overline{\rho}|\widetilde{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}_l|d}{\overline{\mu}} \tag{4.45}$$

4.3.4 Flux de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}_l^t$ s'écrivent :

$$\overline{\mathbf{f}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau}_{l,xx}^t \\ -\overline{\tau}_{l,xy}^t \\ -\overline{\tau}_{l,xz}^t \\ \overline{q}_{\theta,x}^t \\ \overline{q}_{h,x}^t \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{g}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau}_{l,xy}^t \\ -\overline{\tau}_{l,yy}^t \\ -\overline{\tau}_{l,yz}^t \\ \overline{q}_{\theta,y}^t \\ \overline{q}_{h,y}^t \end{pmatrix}, \overline{\mathbf{h}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau}_{l,xz}^t \\ -\overline{\tau}_{l,yz}^t \\ -\overline{\tau}_{l,zz}^t \\ \overline{q}_{\theta,z}^t \\ \overline{q}_{h,z}^t \end{pmatrix} \tag{4.46}$$

$\overline{\tau}_l^t$ est le tenseur des contraintes de sous-maille de la phase dispersée défini par :

$$\overline{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \overline{\alpha}_l \left(\widehat{u_{l,i} u_{l,j}} - \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j} \right) \tag{4.47}$$

$\overline{\mathbf{q}}_\theta^t$ est le flux de sous-maille de l'énergie décorrélée défini par :

$$\overline{q}_{\theta,i}^t = \rho_l \overline{\alpha}_l \left(\widehat{u_{l,i} \delta\theta} - \hat{u}_{l,i} \widehat{\delta\theta}_l \right) \tag{4.48}$$

$\overline{\mathbf{q}}_h^t$ est le flux de sous-maille de l'enthalpie sensible liquide défini par :

$$\overline{q}_{h,i}^t = \rho_l \overline{\alpha}_l \left(\widehat{u_{l,i} h_{s,l}} - \hat{u}_{l,i} \hat{h}_l \right) \tag{4.49}$$

Par la suite, on suppose que les effets de sous-maille sur l'enthalpie liquide résolue sont négligeables : $\overline{\mathbf{q}}_h^t = 0$. La modélisation des termes $\overline{\tau}_l^t$ et $\overline{\mathbf{q}}_\theta^t$ est décrite dans la section 4.4. La modélisation du terme $\overline{\tau}_l^t$ est décrite dans la section 4.4.

4.3.5 Termes sources filtrés

Le terme source filtré $\bar{\mathbf{s}}_l$ se décompose en deux parties :

$$\bar{\mathbf{s}}_l = \bar{\mathbf{s}}_{g\text{-}l} + \bar{\mathbf{s}}_\theta$$

$\bar{\mathbf{s}}_\theta$ est défini par :

$$\bar{\mathbf{s}}_\theta = \left(0,0,0,0,0,\overline{\mathbb{U}}_\theta,0\right)^T$$

où $\overline{\mathbb{U}}_\theta$ est le terme filtré de production d'énergie décorrélée par le tenseur des vitesses décorrélées. On l'écrit :

$$\overline{\mathbb{U}}_\theta = -\frac{2}{3}\rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta\theta}_l \frac{\partial \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} - \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R^*}_{l,ij} \frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \overline{\mathbb{U}}_\theta^t$$

où $\overline{\mathbb{U}}_\theta^t$ est un terme de production par le mouvement de sous-maille et s'écrit :

$$\overline{\mathbb{U}}_\theta^t = -\left(\overline{\rho_l \breve{\alpha}_l \delta \breve{R}_{l,ij} \frac{\partial \breve{u}_{l,i}}{\partial x_j}} - \rho_l \overline{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \right)$$

Le modèle de fermeture pour $\overline{\mathbb{U}}_\theta^t$ est décrit dans la section 4.4.

Le terme source filtré $\bar{\mathbf{s}}_{g\text{-}l}$ représente les échange filtrés avec la phase gazeuse et s'écrit :

$$\bar{\mathbf{s}}_l = \begin{pmatrix} 0 \\ -\overline{\Gamma} \\ \overline{\Gamma}_{u,x} + \overline{F}_{d,x} \\ \overline{\Gamma}_{u,y} + \overline{F}_{d,y} \\ \overline{\Gamma}_{u,z} + \overline{F}_{d,z} \\ \overline{\Gamma}_\theta + \overline{W}_\theta \\ \overline{\Lambda}_l + \overline{\Phi}_l \end{pmatrix} \tag{4.50}$$

Les composantes de $\bar{\mathbf{s}}_{g\text{-}l}$ sont modélisées de la façon suivante :

Taux d'évaporation $\overline{\Gamma}$

$$\begin{aligned} \overline{\Gamma} &= -\overline{\breve{n}_l \{\dot{m}_p\}_l} \qquad (4.51) \\ &= \overline{\pi \breve{n}_l d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1+B_M)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \textit{approximation :} \quad \overline{\Gamma} &\approx \pi \overline{n}_l d\, \overline{Sh} \frac{\overline{\mu}}{Sc_F} \ln\left(1+\overline{B}_M\right) \qquad (4.52) \\ \text{avec :} \quad \overline{Sh} &\approx 2 + 0.55 \overline{Re}_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3} \\ \overline{B}_M &\approx \frac{Y_{F,\zeta}(\widehat{T}_l) - \widetilde{Y}_F}{1 - Y_{F,\zeta}(\widehat{T}_l)} \end{aligned}$$

Taux de variation de quantité de mouvement par évaporation $\overline{\Gamma}_u$

$$\begin{aligned} \overline{\Gamma}_{u,i} &= -\overline{\Gamma \breve{u}_{l,i}} \\ \textit{approximation :} \quad \overline{\Gamma}_{u,i} &\approx -\overline{\Gamma} \hat{u}_{l,i} \end{aligned}$$

Taux de variation de d'énergie décorrélée par évaporation $\overline{\Gamma}_\theta$

$$\begin{aligned} \overline{\Gamma}_\theta &= -\overline{\Gamma \delta \breve{\theta}_l} \\ \textit{approximation :} \quad \overline{\Gamma}_\theta &\approx -\overline{\Gamma} \widehat{\delta \theta}_l \end{aligned}$$

Taux de variation d'enthalpie sensible liquide par évaporation $\overline{\Lambda}_l$

$$\begin{aligned} \overline{\Lambda}_l &= -\overline{\Gamma \left(\breve{h}_{s,l} - h_{s,corr}\right)} \\ \textit{approximation :} \quad \overline{\Lambda}_l &\approx -\overline{\Gamma} \left(\hat{h}_l - h_{s,corr}\right) \end{aligned}$$

Taux de variation de quantité de mouvement par la traînée $\overline{\mathbf{F}}_d$

$$\begin{aligned} \overline{F}_{d,i} &= \overline{\frac{\rho_l \overline{\alpha}_l}{\tau_p} (u_i - \breve{u}_{l,i})} \\ \textit{approximation :} \quad \overline{F}_{d,i} &\approx \frac{\rho_l \overline{\alpha}_l}{\overline{\tau}_p} (\widetilde{u}_i - \hat{u}_{l,i}) \end{aligned}$$

Taux de variation (destruction) d'énergie décorrélée par la traînée $\overline{W}_\theta$

$$\begin{aligned} \overline{W}_\theta &= -\overline{\left(\frac{2\rho_l \breve{\alpha}_l}{\tau_p} \delta \breve{\theta}_l\right)} \\ \textit{approximation :} \quad \overline{W}_\theta &\approx -\frac{2\rho_l \overline{\alpha}_l}{\overline{\tau}_p} \widehat{\delta \theta}_l \end{aligned}$$

Taux de variation d'enthalpie sensible liquide par conduction thermique $\overline{\Phi}_l$

$$\begin{aligned} \overline{\Phi}_l &= -\overline{\Lambda}_l - \overline{\Lambda} - \overline{\Phi} \\ \text{avec :} \quad \overline{\Lambda} &= \overline{\Gamma h_{s,F}} \\ \overline{\Phi} &= \overline{\breve{n}_l \left\{\pi d\, Nu\, \lambda \left(T_\zeta - T_\infty\right)\right\}_l} \\ \text{approximés par :} \quad \overline{\Lambda} &\approx \overline{\Gamma} h_{s,F}(\widehat{T}_l) \qquad (4.53) \\ \overline{\Phi} &\approx \pi \overline{n}_l d\, \overline{Nu}\, \overline{\lambda} \left(\widehat{T}_l - \widetilde{T}\right) \frac{ln(\overline{B}_T + 1)}{\overline{B}_T} \qquad (4.54) \end{aligned}$$

On obtient finalement :

$$\begin{aligned}
\overline{\Phi}_l &\approx \overline{\Gamma}\left(\hat{h}_l - h_{s,corr} - h_{s,F}(\widehat{T}_l)\right) - \pi\overline{n}_l d\,\overline{Nu}\,\overline{\lambda}\left(\widehat{T}_l - \widetilde{T}\right)\frac{ln(\overline{B}_T+1)}{\overline{B}_T} \\
\overline{\Phi}_l \approx \overline{\Gamma}\left(\hat{h}_l - h_{s,corr} - h_{s,F}(\widehat{T}_l)\right) &- \pi\overline{n}_l d\,\overline{Nu}\,\overline{\lambda}\left(\widehat{T}_l - \widetilde{T}\right)\frac{ln(\overline{B}_T+1)}{\overline{B}_T} \\
\text{avec :}\quad \overline{Nu} &\approx 2 + 0.55\overline{Re}_p^{1/2} Pr^{1/3} \\
\text{et :}\quad \overline{\overline{B_T}} &\approx (1+\overline{B}_M)^{Sh/(NuLe_F)} - 1 \\
\text{où}\quad \overline{Le_F} &= Sc_F/Pr
\end{aligned}$$

Connaissant le terme source *gaz* → *liquide* filtré $\bar{\mathbf{s}}_{g\text{-}l}$, on en déduit le terme source *liquide* → *gaz* filtré $\bar{\mathbf{s}}_{l\text{-}g}$:

$$\bar{\mathbf{s}}_{l\text{-}g} = \begin{pmatrix} \overline{\Gamma}\hat{u}_{l,x} - \overline{F}_{d,x} \\ \overline{\Gamma}\hat{u}_{l,y} - \overline{F}_{d,y} \\ \overline{\Gamma}\hat{u}_{l,z} - \overline{F}_{d,z} \\ \overline{\Lambda} + \overline{\Phi} + \widetilde{u}_i\left(\overline{\Gamma}\hat{u}_{l,i} - \overline{F}_{d,i}\right) \\ \overline{\Gamma}\delta_{k,F} \end{pmatrix} \tag{4.55}$$

où $\overline{\Lambda}$ et $\overline{\Phi}$ sont donnés par les Eq. 4.53 et 4.54 respectivement.

Densité de particules

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\overline{n}_l\hat{u}_{l,i} = 0 \tag{4.56}$$

où $\hat{\mathbf{u}}_l$ est la vitesse corrélée filtrée de la phase liquide.

Fraction volumique

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\overline{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_{l,i} = -\overline{\Gamma} \tag{4.57}$$

où $\overline{\Gamma}$ est le taux d'évaporation filtré.

Quantité de mouvement Quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_{l,i}\hat{u}_{l,j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta R^*}_{l,ij} - \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{2}{3}\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta\theta}_l + \overline{F}_{d,i} + \overline{\Gamma}_{u,i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\overline{\tau}^t_{l,ij} \tag{4.58}$$

où $\widehat{\delta R^*}_l$ est la partie déviatorique du tenseur décorrélé filtré, $\widehat{\delta\theta}_l$ est l'énergie décorrélée filtrée, $\overline{F}_{d,i}$ est le terme de traînée filtré et $\overline{\Gamma}_{u,i}$ est le terme d'évaporation filtré. $\overline{\tau}^t_l$ représente le tenseur des contraintes de sous-maille liquides :

$$\overline{\tau}^t_{l,ij} = -\rho_l\overline{\alpha}_l\left(\widehat{u_{l,i}u_{l,j}} - \hat{u}_{l,i}\hat{u}_{l,j}\right) \tag{4.59}$$

Énergie décorrélée

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta\theta}_l+\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_{l,j}\widehat{\delta\theta}_l = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta S}_{l,iij}-\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta R^*}_{l,ij}\frac{\partial\hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \tag{4.60}$$

$$-\frac{2}{3}\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta\theta}_l\frac{\partial\hat{u}_{l,j}}{\partial x_j}+\overline{W}_\theta+\overline{\Gamma}_\theta+\Pi_{\delta\theta_l}-\frac{\partial}{\partial x_j}\overline{q}^t_{\theta,j} \tag{4.61}$$

où $\overline{W}_\theta$ et $\overline{\Gamma}_\theta$ représentent respectivement les termes de traînée et d'évaporation filtrés. $\Pi_{\delta\theta_l}$ et $\overline{\mathbf{q}}^t_\theta$ sont respectivement les termes de production et de diffusion par le mouvement de sous-maille :

$$\Pi_{\delta\theta_l} = \overline{\rho_l\breve{\alpha}_l\delta\breve{R}_{l,ij}\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_j}}-\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta R}_{l,ij}\frac{\partial\breve{u}_{l,i}}{\partial x_j} \tag{4.62}$$

$$\overline{q}^t_{\theta,i} = \rho_l\overline{\alpha}_l\left(\widehat{u_{l,i}\delta\theta_l}-\hat{u}_{l,i}\widehat{\delta\theta}_l\right) \tag{4.63}$$

Enthalpie sensible

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\overline{\alpha}_l\hat{h}_l+\frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\overline{\alpha}_l\hat{u}_{l,j}\hat{h}_l=\overline{\Phi}_l+\overline{\Lambda}_l-\frac{\partial}{\partial x_j}q^t_{l,j} \tag{4.64}$$

où $\hat{h}_l$ est l'enthalpie liquide filtrée. $\overline{\Phi}_l$ et $\overline{\Lambda}_l$ sont les termes sources filtrés d'enthalpie liquide par conduction thermique et changement de phase respectivement. $\mathbf{q}^t_l$ représente le flux non résolu d'enthalpie liquide filtrée :

$$q^t_{l,i}=\rho_l\overline{\alpha}_l\left(\widehat{u_{l,i}h_l}-\hat{u}_{l,i}\hat{h}_l\right) \tag{4.65}$$

Par la suite, on suppose que les effets de sous-maille sur l'enthalpie liquide résolue sont négligeables : $\mathbf{q}^t_l=0$.

4.4 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée

Moreau (2006) a montré que la modélisation du mouvement mésoscopique de sous-maille de la phase dispersée nécessitait de prendre en compte les effets de compressibilité. Riber *et al.* (2005) proposent d'utiliser un modèle de type Smagorinsky (1963) pour la partie déviatorique du tenseur de sous-maille des vitesses mésoscopiques $\overline{\tau}^t_l$. Les effets compressibles sont représentés par la partie diagonale de ce tenseur dont l'estimation est donnée par un modèle de Yoshizawa (1986) :

$$\overline{\tau}^t_{l,ij} = -\rho_l\overline{\alpha}_l\left(\widehat{u_{l,i}u_{l,j}}-\hat{u}_{l,i}\hat{u}_{l,j}\right) \tag{4.66}$$

$$\textit{modèle :}\quad \overline{\tau}^t_{l,ij} = 2\rho_l\overline{\alpha}_l\nu_{l,t}\left(\hat{S}_{l,ij}-\frac{1}{3}\hat{S}_{l,kk}\delta_{ij}\right)+2\rho_l\overline{\alpha}_l\kappa_{l,t}\hat{S}_{l,ij}\delta_{ij} \tag{4.67}$$

$$\text{avec :}\quad \hat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\hat{u}_{l,i}}{\partial x_j}+\frac{\partial\hat{u}_{l,j}}{\partial x_i}\right)-\frac{1}{3}\frac{\partial\hat{u}_{l,k}}{\partial x_k}\delta_{ij} \tag{4.68}$$

$$\textit{modèle de Smagorinsky :}\quad \nu_{l,t} = (C_{S,l}\triangle)^2\sqrt{2\hat{S}_{l,ij}\hat{S}_{l,ij}} \tag{4.69}$$

$$\textit{modèle de Yoshizawa :}\quad \kappa_{l,t} = 2C_{V,l}\triangle^2\hat{S}_{l,ij} \tag{4.70}$$

Les constantes du modèle sont fixées à partir de tests *a priori* Moreau *et al.* (2005) : $C_{S,l}=0.16$ et $C_{V,l}=0.012$.

4.4.1 Flux de sous-maille d'énergie décorrélée

Le transport de sous-maille de l'énergie décorrélée filtrée est pris en compte au moyen d'un modèle de diffusion turbulente :

$$\overline{q}^t_{\theta,i} = 2\rho_l \overline{\alpha}_l \frac{\nu_{l,t}}{Pr^t_l} \frac{\partial \widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_i}$$

avec le nombre de Prandtl turbulent liquide fixé à : $Pr^t_l = 0.7$.

4.4.2 Terme de production de sous-maille d'énergie décorrélée

Le terme de production d'énergie décorrélée par le mouvement de sous-maille $\overline{\mathbb{U}}^t_\theta$ agit comme un terme de dissipation dans l'équation d'énergie corrélée de sous-maille. À partir d'une hypothèse d'équilibre sur l'énergie corrélée de sous-maille Riber *et al.* (2005), on modélise $\overline{\mathbb{U}}^t_\theta$ de la façon suivante :

$$\overline{\mathbb{U}}^t_\theta = \overline{\tau}^t_{l,ij} \frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \tag{4.71}$$

Ce modèle s'appuie sur l'hypothèse que toute l'énergie du mouvement corrélé qui est dissipée par les effets de sous-maille est convertie en énergie décorrélée résolue.

4.5 Modèle de combustion turbulente

4.5.1 Modélisation de la combustion turbulente

Les travaux portant sur la modélisation de l'interaction entre la turbulence et la combustion ont débuté il y a plus de trente ans avec les recherches de Spalding (1976) pour la simulation RANS. Les études consacrées à la combustion turbulente pour la LES n'ont commencé que dans les années 90 et de nombreuses questions restent encore ouvertes.

La difficulté de la simulation en combustion turbulente est liée en particulier au rapport d'échelle entre l'épaisseur de la zone réactive (dans le cas où le régime de flammelette est valable) et la dimension des mailles de la grille de calcul. Dans la modélisation de la combustion, on fait généralement une distinction entre les modèles pour les régimes de prémélange, les régimes non prémélangés et partiellement prémélangés. On trouve une description de l'ensemble de ces modèles RANS et LES dans la revue de Veynante & Vervisch (2002). Une revue plus récente de Bilger *et al.* (2005) fait état des différentes théories et modèles pour les trois régimes de combustion turbulente. Pitsch (2006) fait également une revue des modèles spécifiques à la LES.

Dans la plupart des applications industrielles, le régime de combustion est rarement purement prémélangé ou non-prémélangé. La raison principale est que le carburant est généralement injecté sous forme liquide, et les processus d'évaporation couplés aux effets turbulents induisent des stratifications ou inhomogénéités de mélange. Dans ces conditions, la combustion est pilotée par les mécanismes du régime partiellement prémélangé.

Les études de Légier *et al.* (2000) et Boileau *et al.* (2008*b*) ont montré les capacités du modèle de flamme épaissie à traiter des problèmes de combustion partiellement prémélangée en configurations complexes diphasiques. Dans la présente étude, l'objectif est d'utiliser le modèle de flamme épaissie implanté dans AVBP dans des simulations de statoréacteurs, faisant intervenir les trois régimes de combustion.

Les sections suivantes décrivent les différentes déclinaisons du modèle de flamme épaissie : modèle de flamme épaissie en DNS (TF, section 4.5.2), modèle de flamme épaissie en LES (TFLES, section 4.5.3) et enfin le modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES, section 4.5.4) permettant son extension aux cas partiellement prémélangés.

4.5.2 Flamme laminaire épaissie (TF)

Le concept du modèle TF (pour *Thickened Flame* en anglais) est d'augmenter l'épaisseur de la flamme de manière à pouvoir la résoudre sur les maillages LES tout en s'assurant que la vitesse de flamme épaissie reste égale à la vitesse de flamme DNS. Butler & O'Rourke (1977) sont les premiers à avoir proposé d'épaissir artificiellement une flamme laminaire de prémélange pour la propager sur un maillage grossier. Une analyse dimensionnelle classique (Williams, 1985) montre que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par la diffusivité thermique D_{th} et la constante pré-exponentielle A (cf. section 2.7).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \tag{4.72}$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \tag{4.73}$$

En se basant sur les Eqs. 4.72 et 4.73, il est possible d'épaissir une flamme prémélangée sans altérer sa vitesse de propagation. En effet en multipliant les coefficients de diffusion par un facteur F (facteur d'épaississement) et en divisant le taux de réaction de la flamme par ce même facteur, on obtient une flamme d'épaisseur $\delta_L^1 = F\delta_L^0$ dont la vitesse de consommation est préservée par rapport à la DNS : $S_L^1 = \frac{\sqrt{F}}{\sqrt{F}} S_L^0$. Le modèle de flamme épaissie conduit aux modifications suivantes :

$$\begin{aligned} D_{th} &\longrightarrow FD_{th} \\ D_k &\longrightarrow FD_k \\ \dot{\omega}_T &\longrightarrow \dot{\omega}_T/F \\ \dot{\omega}_k &\longrightarrow \dot{\omega}_k/F \end{aligned}$$

où $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont prédits par le schéma cinétique qui utilise une loi d'Arrhénius (cf. Eq. 2.30).

Toutefois, dans le cas d'écoulements turbulents, l'épaississement a pour effet de modifier le rapport entre l'échelle de longueur de la turbulence et l'épaisseur de flamme. Pour les études en LES, le modèle doit donc être complété afin de corriger ces effets. Le modèle complet TF en LES est décrit dans la section 4.5.3.

4.5.3 Modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente (TFLES)

La modification artificielle de l'épaisseur d'une flamme conduit à la modification de son nombre de Damköhler : $Da = \tau_t/\tau_c = (l_t S_l^0)/(u'\delta_l^0)$, d'un facteur F. Il y a donc tout un ensemble de tourbillons qui

n'a plus d'effet sur la flamme LES alors que la flamme DNS y est sensible (les échelles comprises entre δ_l^0 et $F\delta_l^0$).

Le but du modèle TFLES est de corriger la perte de sensibilité à la turbulence de la flamme due à l'épaississement. Une des hypothèses principales du modèle est que l'épaisseur de la flamme est à tout instant plus petite que toutes les échelles de la turbulence auxquelles elle est sensible (le régime de flamme se situe en dessous de la limite de Klimov-Williams (Gokalp, 1987)). Ce régime est dit de flamelette (diagramme de combustion de Peters (1986)). Dans un tel régime, la turbulence modifie la structure de la flamme en augmentant son plissement et son étirement local. Sous ces hypothèses, la vitesse de flamme turbulente (S_T) est liée à la vitesse laminaire (S_l) par la relation (Bray & Cant, 1991) :

$$\frac{S_T}{S_l} = I_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \Sigma \, d\eta = I_0 \frac{A_T}{A_l} \tag{4.74}$$

où I_0 est le facteur d'étirement (Eq. 4.75), Σ la densité de surface de flamme, η la coordonnée normale au plan moyen de flamme et le rapport des surfaces de flammes turbulente et laminaire : A_T/A_l représente le **plissement de la flamme** (Fig. 4.1). Bray & Cant (1991) définissent le facteur d'étirement par la relation suivante :

$$I_0 = \frac{\overline{S}_c}{S_l} \qquad \text{avec} \qquad S_c = \frac{1}{\rho_R} \int \dot{\omega}_R \, d\xi \tag{4.75}$$

où $\overline{S}_c$ est la moyenne temporelle de la vitesse locale de consommation S_c, ρ_R est la densité des gaz non brûlés, $\dot{\omega}_R$ le taux de consommation local de la flamme et ξ est la direction normale au front de flamme. L'épaississement d'une flamme turbulente a donc pour effet de modifier son plissement ainsi que son

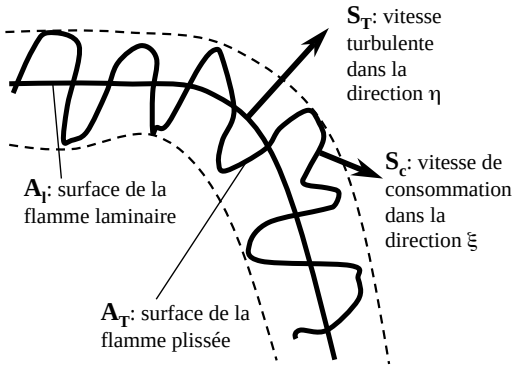


FIG. 4.1 - *Schéma d'une flamme plissée turbulente dans le régime de "flamelet".*

étirement local (cf. Fig. 4.2).

Colin *et al.* (2000) proposent un modèle introduisant une fonction d'efficacité E construite à partir de calculs DNS d'interaction flamme/vortex pour corriger la perte des effets de plissement induite par l'épaississement dans le cadre des flammes prémélangées. **Une hypothèse de ce modèle est que l'étirement dû à la turbulence, augmente la surface de flamme mais son effet sur la vitesse de consommation locale est négligeable**. La vitesse de consommation locale est donc égale à la vitesse d'une flamme laminaire.

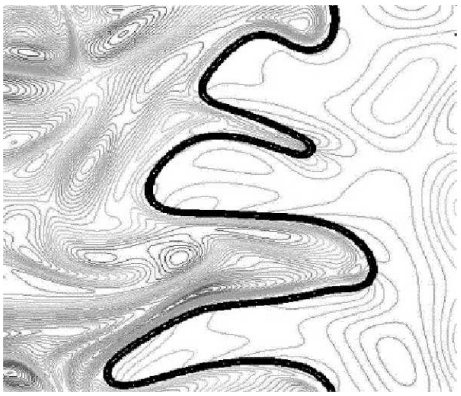
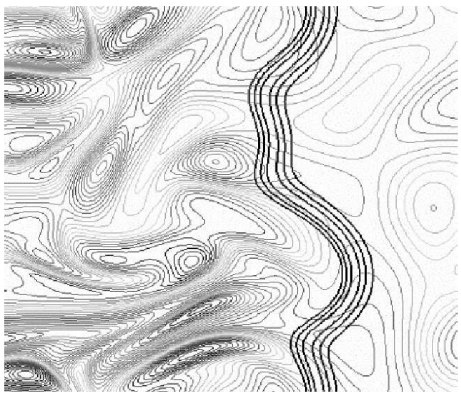
(a.)  (b.) 

FIG. 4.2 - *DNS d'interaction flamme/turbulence Angelberger et al. (1998); Poinsot & Veynante (2005). Flamme non épaissie (a.), flamme épaissie d'un facteur $F = 5$ (b.)*

Fonction d'efficacité E

On trouve une description complète de la fonction d'efficacité E dans l'article de Colin *et al.* (2000). Cette fonction a ensuite été améliorée par Charlette *et al.* (2002). L'étude menée par Colin *et al.* (2000) repose sur l'analyse de l'équation de transport de la densité de surface de flamme. En supposant qu'au niveau du front de flamme il y a un équilibre entre les termes de production et de destruction de la densité de surface de flamme (Colin *et al.*, 2000; Charlette *et al.*, 2002), le coefficient de plissement $\Xi = A_T/A_l$ est lié à la vitesse turbulente locale de sous-maille par la relation :

$$\Xi(\delta_l^0) \simeq 1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0}\right)\frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0} \tag{4.76}$$

où α est une constante du modèle (son calcul est présenté plus bas) et la fonction Γ permet de prendre en compte le taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, dépendant de la fluctuation de vitesse de sous-maille u', de la taille du filtre Δ_e et des caractéristiques de la flamme. Finalement la vitesse locale S_{LES} de la flamme LES corrigée est donnée par la relation liant la vitesse de flamme laminaire S_l^0 et la fonction d'efficacité E :

$$\frac{S_{LES}}{S_l^0} = \frac{A_{LES}}{A_l} = \frac{A_{LES}}{A_T}\frac{A_T}{A_l} = \frac{\Xi(\delta_l^1)}{\Xi(\delta_l^0)} = E$$

où $\Xi(\delta_l^1)$ est le coefficient de plissement de la flamme épaissie : $\delta_l^1 = F\delta_l^0$.

La fluctuation de vitesse de sous-maille u' est estimée à partir du rotationnel de la vitesse résolue (afin d'éliminier la partie dilatation de la vitesse qu'on ne compte pas ici comme faisant partie de la turbulence). L'opérateur permettant de définir u' est le suivant :

$$u' = c_2\Delta^3\left|\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j}\left(\varepsilon_{lmn}\frac{\partial \widetilde{u_n}}{\partial x_m}\right)\right| \tag{4.77}$$

avec $c_2 \approx 2$ et où ε_{lmn} correspond au tenseur des permutations.

Estimation de la constante α

La constante α est estimée de façon à retrouver la théorie de Damköhler : $S_T/S_L^0 \approx 1+\beta u'/S_L^0$ (valable pour les faibles valeurs de u' (Poinsot & Veynante, 2005)) Sous l'hypothèse des flammes minces et quand Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t, le plissement Ξ tend vers un plissement maximum Ξ_{max} défini par l'Eq. 4.78 (Colin *et al.*, 2000). L'Eq. 4.79 qui définit α se déduit de l'Eq. 4.78.

$$\Xi_{max} = 1+\beta u'/S_l^0 = 1+\alpha\Gamma_{l_t}\, u'/S_l^0 \tag{4.78}$$

$$\alpha = \beta\frac{2\ln(2)}{3c_{ms}\left(Re_t^{1/2}-1\right)} \tag{4.79}$$

$$\text{avec :} \qquad Re_t = \frac{u'l_t}{\nu} \qquad \text{et} \qquad c_{ms} = 0.28 \tag{4.80}$$

La constante β est supposée proche de l'unité parColin *et al.* (2000).

4.5.4 Modèle de flamme épaissie dynamique

Principe de fonctionnement

Le modèle de flamme épaissie décrit dans la section 4.5.3 est approprié pour le calcul de flammes parfaitement prémélangées. Pour les flammes partiellement prémélangées, en revanche, ce modèle doit être ajusté pour ne pas perturber les processus de mélange en dehors de la zone de réaction.

Le modèle de flamme épaissie dynamique (Légier *et al.*, 2000) (DTF pour *dynamically thickened flame* en anglais) a été développé de manière à ce que l'épaississement soit égale à F_{max} dans la zone réactive et $F=1$ ailleurs (Fig. 4.3).

L'épaississement dynamique F est défini par l'Eq. 4.81. Le senseur S défini par l'Eq. 4.82 évalue si la zone est réactive $(S=1)$ ou non $(S=0)$ à l'aide de la fonction de présence Ω utilisant des paramètres du schéma cinétique : E_a, ν'_F pour le carburant et ν'_O pour l'oxydant.

$$F = 1+(F_{max}-1)S \tag{4.81}$$

$$S = \tanh\left(\beta'\frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \qquad \text{avec :} \quad \beta' = 500 \tag{4.82}$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F}Y_O^{\nu'_O}\exp\left(-\Gamma_T\frac{E_a}{RT}\right) \tag{4.83}$$

Le paramètre Γ_T est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut typiquement : $\Gamma_T = 0.5$. Ω_0 est déterminé en calculant le maximum de Ω dans une flamme laminaire prémélangée 1D non épaissie.

Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale

Dans les calculs LES où la taille des mailles peut varier beaucoup, il est pratique d'adapter le facteur d'épaississement à la résolution locale d'un maillage. Pour ce faire, on évalue F_{max} selon l'expression

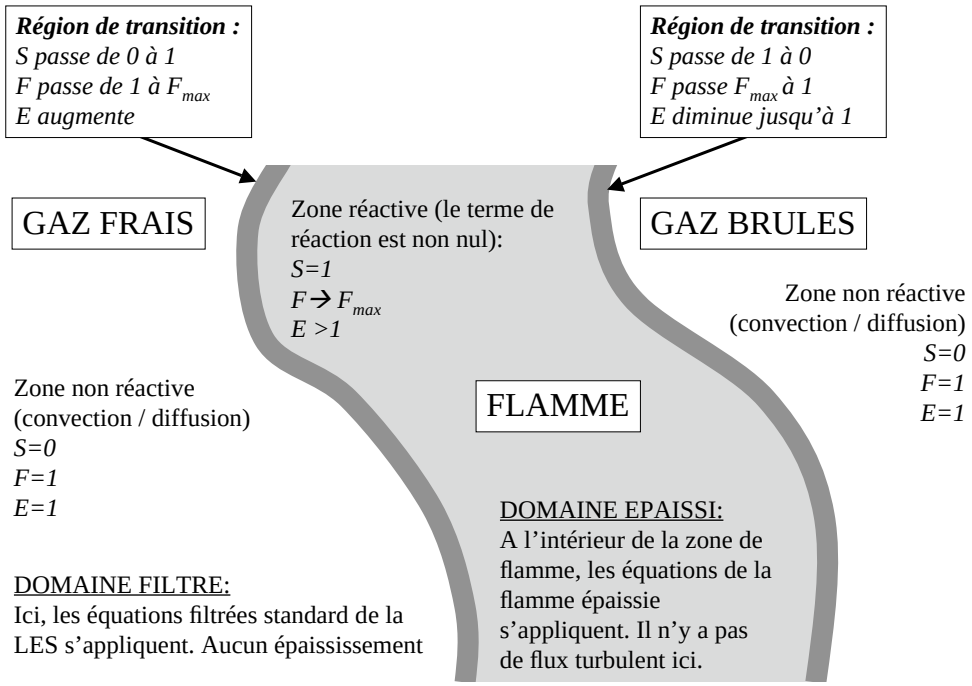


FIG. 4.3 - *Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF.*

suivante :

$$F_{max} = n\frac{\delta_L^0}{\Delta x} \tag{4.84}$$

où Δx est la taille locale de la maille et n est le nombre de cellules contenues dans l'épaisseur du front de flamme épaissi. La valeur $n = 5$ est généralement suffisante pour résoudre correctement le front de flamme en évitant les erreurs numériques dues à des gradients mal résolus.

Chapitre 5

Approche numérique

5.1 Le code AVBP

Le code AVBP a été écrit à l'origine par l'OUCL (Oxford University Computing Laboratory) et le CERFACS en 1993. Il est désormais la propriété du CERFACS et de l'IFP qui le maintiennent et le développent conjointement. Le code a été créé dans le but d'avoir à disposition un solveur des équations de Navier-Stokes capable de supporter des maillages non structurés et hybrides (type de cellule arbitraire) afin d'assurer à l'utilisateur une flexibilité maximale lors de la discrétisation du domaine de calcul. La conception d'AVBP repose sur l'idée de construire une librairie de routines pour obtenir une modularité totale Rudgyard *et al.* (1995); Rudgyard (1995); Schönfeld & Rudgyard (1999) et faciliter le développement et le codage de nouveaux modèles physiques. Il faut de plus noter qu'AVBP a été écrit, dès le départ, pour être utilisé sur des calculateurs parallèles (libraire COUPL, depuis remplacée par MPL) ce qui explique ses performances actuelles sur les super-calculateurs (Rudgyard *et al.*, 1995; Rudgyard, 1995; Schönfeld & Rudgyard, 1999; Staffelbach *et al.*, 2009).
Les méthodes numériques du code AVBP ont été originellement implantées par M. Rudgyard et T. Schönfeld en suivant les travaux réalisés en particulier à Oxford Paisley (1986); Rudgyard (1990); Mackenzie (1991); Crumpton *et al.* (1993); Crumpton (1995) sur les méthodes volumes finis de type *cell-vertex* , qu'on présente dans la suite de ce chapitre.

5.2 Discrétisation *cell-vertex*

Ce chapitre présente succinctement le code AVBP qui a servi à réaliser les simulations aux grandes échelles pour ce travail. Pour plus de renseignement, le lecteur pourra se référer à la thèse de Lamarque (2007) qui le présente en détail.

Le code de mécanique des fluides AVBP utilise un solveur aux volumes finis avec une discrétisation *cell-vertex* . Cette dernière méthode a été introduite par Ni (1982), modifiée par Hall (1984) et étudiée par divers auteurs et en particulier par l'équipe de K.W. Morton (Roe, 1987; Morton, 1988; Radespiel, 1989; Rudgyard, 1990; Mackenzie, 1991; Swanson & Radespiel, 1991; Rudgyard, 1993*a*,*b*; Catalano *et al.*, 1995).

Les bilans des lois de conservation sont appliqués dans les cellules du maillage primal alors que les solutions sont définies aux noeuds. Ainsi le flux à l'arête f est défini (en 2D) généralement de la manière suivante :

$$\vec{\mathscr{F}}_f = \vec{\mathscr{F}}(\frac{\mathbf{U}_A + \mathbf{U}_B}{2}) = \frac{1}{2}(\vec{\mathscr{F}}(\mathbf{U}_A) + \vec{\mathscr{F}}(\mathbf{U}_B)),$$

ce qui revient à appliquer la méthode des trapèzes pour le calcul de l'intégrale de la partie spatiale (et assumer que les flux varient linéairement le long des arêtes). Ici le flux a donc été intégré le long des arêtes (on calcule un flux avec une moyenne qui *traverse* la surface d'intégration). Ainsi, la méthode *cell-vertex* présente une forte affinité avec les éléments finis (Morton, 1988; Morton *et al.*, 1997). De nombreuses études concernant la précision de cette méthode ont été réalisées (Rudgyard, 1993*b*). On citera notamment celles de Roe (1987), de Morton (1988) et de Swanson & Radespiel (1991). Des études beaucoup plus rigoureuses d'un point de vue mathématique ont été aussi réalisées par Süli (1989); Morton *et al.* (1997). Ils ont démontré que la méthode *cell-vertex* est plus précise que les méthodes *cell-vertex* ou *cell-centre* et surtout bien plus robuste aux distorsions de maillage.

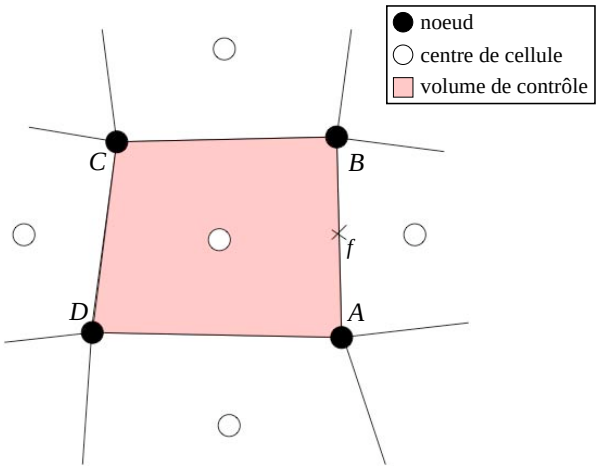


FIG. 5.1 - *Maillage utilisé avec la méthode cell-vertex . Les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules et les variables sont stockées aux noeuds.*

Un des problèmes de la méthode *cell-vertex* reste que le nombre d'équations de bilan est différent du nombre d'inconnues, ce qui nécessite d'écrire des équations nodales lors de la mise à jour temporelle Rudgyard (1993*a*); Crumpton *et al.* (1993), ce qui peut s'avérer relativement coûteux. Par ailleurs, au même titre que les autres méthodes, la formulation *cell-vertex* souffre aussi de la présence de *wiggles* (oscillations en damiers), ce qui, là aussi, implique l'utilisation de viscosité artificielle, comme on le verra par la suite. Un autre problème lié à ce type de méthode est la gestion des coins avec en particulier la définition d'une normale au noeud associé à ce point particulier d'une configuration.

5.2.1 Métriques

Avant de donner les détails du calcul du résidu, on va rappeler comment sont définies les métriques dans AVBP . La méthode *cell-vertex* repose sur une définition des métriques basée aux cellules.

A l'exception des bords du domaine noté Ω, où le traitement est particulier (Lamarque, 2007), les normales utilisées dans AVBP sont définies aux sommets des éléments. Pour simplifier le codage et

pouvoir appliquer la même formule de calcul du résidu ou des gradients quel que soit le type d'élément considéré, on définit les normales de la manière suivante :

1. On calcule d'abord les normales $\vec{S}_f$ aux faces f des cellules (pointant vers l'extérieur). Ce calcul inclut la pondération de la normale par l'aire de la face concernée. Il est à noter qu'en général dans le cas des faces quadrangulaires, les 4 sommets n'appartiennent pas à un même plan. La face est donc divisée en quatres triangles (deux divisions selon les diagonales) et la normale $\vec{S}_f$ est une moyenne des normales aux triangles (voir Fig.5.2). Cette manière de calculer les normales permet en particulier de préserver la linéarité d'une solution (ce qui revient à assurer une convergence du schéma à l'ordre 2 pour des maillages suffisamment réguliers).

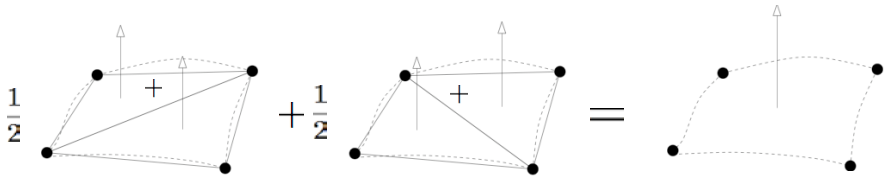


FIG. 5.2 - *Calcul de la normale d'une face dont les sommets n'appartiennent pas tous au même plan.*

2. La normale $\vec{S}_k$ au sommet k est une combinaison linéaire des normales aux faces adjacentes à k et s'écrit :

$$\vec{S}_k = \sum_{f \ni k} -\frac{d}{n_v^f} \vec{S}_f \tag{5.1}$$

Le signe "$-$" apparaît car on a choisi une normale $\vec{S}_k$ pointant vers l'intérieur de la cellule. n_v^f est le nombre de sommets sur la face f et d le nombre de dimensions de Ω. Il faut noter que la normale $\vec{S}_k$ est pondérée par une surface (sa norme n'est pas unitaire). Un exemple pour un quadrilatère est donné sur la figure (5.3).

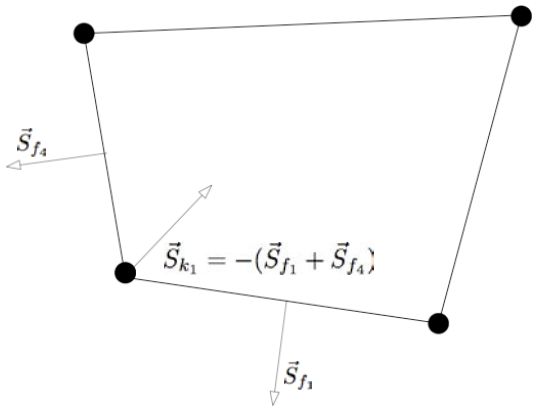


FIG. 5.3 - *Calcul des normales aux noeuds dans un quadrilatère quelconque.*

Par ailleurs, dans le cas d'éléments linéaires (triangles et tétraèdres), ce calcul revient à obtenir une normale $\vec{S}_k$ égale à la normale de la face opposée au sommet k (figure (5.4)).

Afin d'assurer la consistance des schémas numériques, on vérifie que : $\sum_{k \in K_e} \vec{S}_k = \vec{0}$.

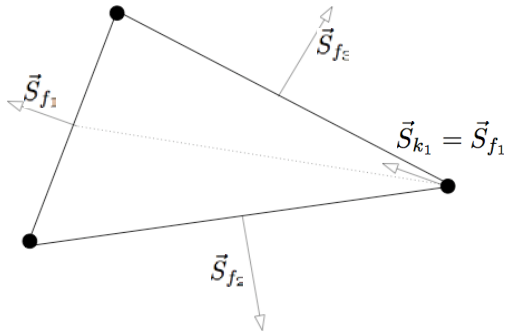


FIG. 5.4 - *Calcul des normales aux noeuds dans un triangle quelconque.*

5.2.2 Approche des résidus pondérés

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

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{0} \tag{5.2}$$

où $\mathbf{w}$ est le vecteur des variables conservatives et $\mathbf{F}$ est le tenseur de flux correspondant. Ce tenseur est décomposé en une partie visqueuse et une partie non visqueuse au travers de l'Eq. 5.3. Les termes spatiaux sont approchés dans chaque volume de contrôle lié à la cellule Ω_j pour en déduire le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'Eq. 5.4.

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I(\mathbf{w}) + \mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \tag{5.3}$$

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial \Omega_j} \mathbf{F} \cdot \vec{n} \, d\mathscr{S} \tag{5.4}$$

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'Eq. 5.4 est d'abord calculé pour chaque cellule en utilisant une loi d'intégration simple appliquée aux faces du volume de contrôle. Pour des faces triangulaires, les composantes individuelles du flux sont supposées varier linéairement. Il est utile d'écrire le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j}$ défini par l'Eq. 5.4 au travers d'une cellule quelconque. L'Eq. 5.4 devient alors l'Eq. 5.5.

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \mathbf{F}_i \cdot \vec{S}_i, \tag{5.5}$$

où $\mathbf{F}_i$ est une approximation de $\mathbf{F}$ au nœud i, 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 $\vec{S}_i$ qui sont associés aux noeuds individuels de la cellule et non à ses faces. $\vec{S}_i$ est la moyenne des normales pondérées par les surfaces des faces triangulaires d'un nœud commun i, $i \in \Omega_j$. La linéarité de l'opérateur de divergence est préservée si le volume V_{Ω_j} est défini par l'Eq. 5.6.

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d^2} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{x}_i \cdot \vec{S}_i, \qquad \text{avec} \qquad \nabla \cdot \vec{x} = N_d \tag{5.6}$$

Une fois les résidus calculés, le schéma semi-discret est défini par l'Eq. 5.7.

$$\frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j|k\in\Omega_j} D^k_{\Omega_j} V_{\Omega_j} R_{\Omega_j}, \tag{5.7}$$

où $D^k_{\Omega_j}$ est la matrice de distribution qui fait une projection pondérée du centre de la cellule 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 $\sum_{k\in\Omega_j} D^k_{\Omega_j} = I$. La définition de cette matrice définit le schéma d'intégration spatiale.

Dans le contexte présent, l'Eq. 5.7 est résolue en utilisant une méthode explicite Euler ou une méthode Runge-Kutta à plusieurs étapes en temps, afin d'obtenir une solution stationnaire. On notera cependant que pour la plupart des schémas usuels d'AVBP comme Lax-Wendroff, TTGC ou TTG4A, l'intégration temporelle est associée directement à l'intégration spatiale.

5.3 Schémas numériques

Pour la phase gazeuse, trois schémas numériques ont été utilisés lors de cette thèse. Ceux-ci ne sont pas présentés en détail et le lecteur se référera aux publications originelles ou à la thèse de Lamarque (2007) pour plus de renseignements . Cependant, les points essentiels caractérisant ces deux schémas sont présentés :

schéma Lax-Wendroff (Lax & Wendroff, 1960) De type volumes finis, d'ordre 2 en temps et hybride "centré-décentré" d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC mais environ deux fois plus rapide. On notera qu'une version *éléments finis* est également disponible dans AVBP.

schéma TT4A (Donea, 1984) De type éléments finis, d'ordre 4 en temps, d'ordre 3 en espace, précis sur des maillages non structurés, approprié à l'étude LES en géométrie complexe.

schéma TTGC (Colin & Rudgyard, 2000) De type éléments finis, d'ordre 3 en temps, d'ordre 3 en espace, précis sur des maillages non structurés, approprié à l'étude LES en géométrie complexe.

La caractéristique première des schémas Taylor-Galerkin est la diminution significative de l'erreur de dispersion très présente pour les schémas d'ordre 2, tout en maintenant un niveau de dissipation numérique globalement très faible.

5.4 Modèles de viscosité artificielle

5.4.1 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[1] (*wiggles*) dans les régions de forts gradients (Hirsch, 1988). Une méthode simple 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 5.4.2) et les opérateurs (section 5.4.3) de la VA disponible dans AVBP.

[1] Toutes les variables sont stockées au même endroit, au noeud

5.4.2 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 une 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 $\zeta^J_{\Omega_j}$ (Jameson *et al.*, 1981) et le senseur de Colin $\zeta^C_{\Omega_j}$ (Colin & Rudgyard, 2000) qui est dérivé du senseur de Jameson mais dédié à la SGE.
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.

Senseur de Jameson

Le senseur de Jameson $\zeta^J_{\Omega_j}$ lié à la cellule Ω_j (défini par l'Eq. 5.8) est le maximum de tous les senseurs ζ^J_k liés aux sommets k (définis par l'Eq. 5.9). 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. 5.10. 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.

$$\zeta^J_{\Omega_j} = \max_{k\in\Omega_j} \zeta^J_k \tag{5.8}$$

$$\zeta^J_k = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + |S_k|} \tag{5.9}$$

$$\Delta^k_1 = S_{\Omega_j} - S_k \qquad \Delta^k_2 = (\vec{\nabla}S)_k.(\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \tag{5.10}$$

où $\vec{x}_{\Omega_j}$ représente les coordonnées du centre de la cellule considérée Ω_j et $\vec{x}_k$ celles du noeud k.

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. 5.11 à 5.15.

- $\zeta^C_{\Omega_j}$ 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 de 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.

On a alors :

$$\zeta^C_{\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\Psi-\Psi_0}{\delta}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{-\Psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{5.11}$$

$$\text{avec :} \quad \Psi = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k|+\varepsilon_1 S_k}\zeta^J_k\right) \tag{5.12}$$

$$\Delta^k = |\Delta^k_1 - \Delta^k_2| - \varepsilon^k \max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right) \tag{5.13}$$

$$\varepsilon^k = \varepsilon_2\left(1-\varepsilon_3\frac{\max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right)}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+S_k}\right) \tag{5.14}$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \qquad \delta = 1.10^{-2} \qquad \varepsilon_1 = 1.10^{-2} \qquad \varepsilon_2 = 0.95 \qquad \varepsilon_3 = 0.5 \tag{5.15}$$

5.4.3 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 l'un des deux senseurs décrits précédemment. Ainsi, le schéma numérique garde son ordre de précision dans les zones à faible gradient tandis que la VA 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 pour vu que celui-ci soit détecté par le senseur.

4ème ordre
Cet opérateur est utilisé pour diminuer les oscillations noeud-à-noeud. Il est appliqué partout sauf dans les endroits où une AV du 2ème ordre est ajoutée.

Les contributions à la cellule de l'opérateur du 2ème ordre (Eq. 5.17) et de l'opérateur du 4ème ordre (Eq. 5.18) sont reportées sur les nœuds de cette cellule Ω_j (Eq. 5.16).

$$dw_k = \sum_j R^2_{k\in\Omega_j} + \sum_j R^4_{k\in\Omega_j} \tag{5.16}$$

$$\text{avec :} \quad R^2_{k\in\Omega_j} = -\frac{1}{N_v}\frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}}\varepsilon^2_f\,\zeta_{\Omega_j}(w_{\Omega_j}-w_k) \tag{5.17}$$

$$\text{avec :} \quad R^4_{k\in\Omega_j} = \frac{1}{N_v}\frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}}\varepsilon^4_f\left[(\vec{\nabla}w)_{\Omega_j}\cdot(\vec{x}_{\Omega_j}-\vec{x}_k) - (w_{\Omega_j}-w_k)\right] \tag{5.18}$$

Notation : ε^2_f et ε^4_f sont des coefficients sans dimension fixés par l'utilisateur.

Chapitre 6

Méthodes pour la capture de chocs

Ce chapitre fait état des modèles de viscosité artificielle existant ou non au début de la thèse dans le code AVBP pour traiter les discontinuités de choc. En effet, si l'utilisation de schéma centré pour la SGE a montré tout son potentiel, le passage à des maillages non structurés pour les géométries complexes diminue fortement les stencils des schémas afin de limiter le temps de calculs. Dans ce contexte, les schémas numériques centrés souffrent d'erreur de dispersion ainsi que du phénomène de Gibbs, provoquant des oscillations artificielles à haute fréquences (*ripples*) ce qui diminue fortement la stabilité de la simulation (Gibbs, 1898; Hirsch, 1988). Une solution communément adoptée pour éliminer ces ondes non physiques est l'utilisation de viscosité artificielle (*AV*) du second et du quatrième ordre appliquée localement et en faible quantité (Von Neumann & Richtmeyer, 1950; Hirsch, 1990; Jameson *et al.*, 1981; Crumpton, 1995). Si cette méthode a été validée sur de nombreuses configurations, académques ou industrielles, dans certaines simulations, des gradients très importants comme des chocs peuvent apparaître et d'autres solutions doivent être mises en place.

Dans une première partie, la problématique est présentée, *i.e.* quels sont les points qu'une méthode de capture de choc, dans le contexte du code AVBP, doit corriger. La seconde partie présente les différents modèles testés et la dernière les principaux résultats obtenus sur un tube à choc de Sod et une tuyère choquée 3D pulsée en sortie par un bruit blanc, identique aux diffuseurs présents dans le statofusée étudié par la suite.

6.1 Problématique

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, le principe du statoréacteur à combustion subsonique repose en premier lieu sur l'admission d'air et la compression du fluide en entrée dans les diffuseurs. L'écoulement dans une tuyère débouchant dans l'atmosphère à une pression P_a donnée peut se diviser en différentes parties selon les valeurs "phares" de la pression génératrice amont P_{i_0}. Ces différents états de l'écoulement sont résumés par la Fig. 6.1 :

1. L'écoulement initial est subsonique que ce soit dans le convergent ou le divergent,
2. Le col s'amorce ensuite : celui-ci est sonique mais le reste de l'écoulement reste subsonique,
3. Un choc normal apparaît dans le divergent et se dirige vers la sortie,
4. Le choc fort devient oblique

5. Un choc faible oblique apparaît ainsi qu'un choc réfléchi détaché,
6. Le choc réfléchi devient attaché
7. Les différents chocs s'affaiblissent jusqu'à disparaître : la tuyère est adaptée.

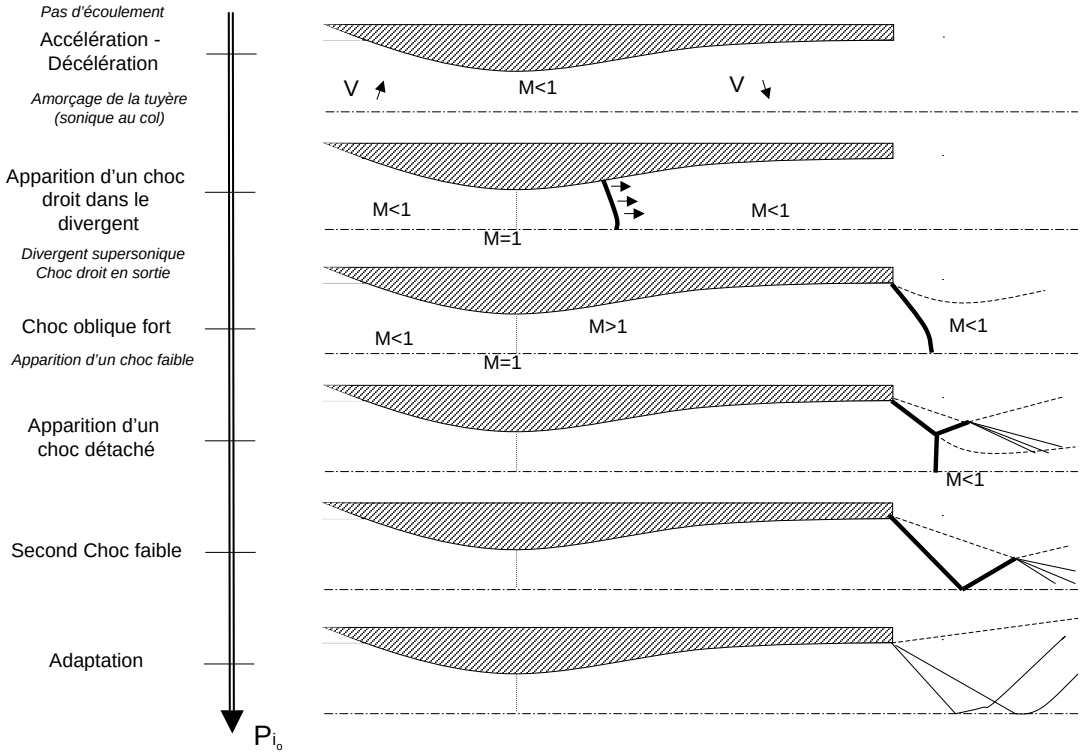


FIG. 6.1 - *Résumé des écoulements possibles dans une tuyère en fonction de la pression génératrice amont.*

En compressible, la SGE doit faire le compromis entre deux aspects distincts, d'une part mettre en oeuvre des schémas numériques capable de résoudre les petites échelles de la turbulence en parallèle d'une viscosité turbulente additionnelle (dans le cas où celle-ci n'est pas implicite au schéma) et d'autre part capturer des chocs ce qui nécessite un schéma robuste. Différents problèmes sont alors mis en avant : garantir la conservation de masse, ne pas induire d'oscillation hautes fréquences au niveau des chocs...

6.2 Les Méthodes de capture de choc

6.2.1 Introduction : la viscosité de volume

La forme générale de l'équation de conservation du moment contient un terme[1] $\sigma = \tau - p.\delta$ représentant les contraintes subies par le fluide et où δ est le symbole de Kronecker. Dans le cas d'un fluide Newtonien, il se décompose sous la forme d'un terme de pression et du tenseur des contraintes visqueuses τ rapellé par l'Eq. 6.1 où interviennent les viscosités de cisaillement et de compression. Ce dernier terme peut se récrire sous la forme de l'Eq. 6.2 où le tenseur se décompose entre sa partie

[1] On utilise dans cette partie une notation tensorielle différente du reste de la thèse pour une meilleure lisibilité.

déviatrice (à coefficients diagonaux nuls) et sa partie diagonale. On a alors introduit le coefficient de viscosité de volume $\kappa = \lambda + 2/3 \times \mu$.

$$\tau = \underbrace{2\,\mu\,S}_{\text{Viscosité de cisaillement}} + \underbrace{\lambda\,\nabla\cdot\mathbf{u}}_{\text{Viscosité de compression}} \tag{6.1}$$

$$\tau = \underbrace{2\,\mu\,S - \frac{2}{3}\,\mu\,\nabla\cdot\mathbf{u}}_{\text{Partie déviatrice}} + \underbrace{\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\nabla\cdot\mathbf{u}}_{\text{Partie diagonale}} \tag{6.2}$$

Pour des conditions de pression et de températures proches des conditions standards, l'hypothèse de Stokes est appliqué : $\kappa = 0$.

6.2.2 La viscosité artificielle d'ordre 2 et le senseur de Jameson

Celle-ci a été définie en Sec. 5.4.2.

6.2.3 Modèle de Von Neumann & Richtmeyer

Ce modèle historique date de 1950. La méthode de Von Neumann & Richtmeyer (1950) permet d'épaissir artificiellement le choc par l'intermédiaire d'un terme supplémentaire de pression sans avoir recours à une méthode numérique supplémentaire. Le tenseur des contraintes visqueuses est alors modifié par l'ajout d'un terme κ' semblable à une viscosité de compression :

$$\tau_{modifie} = (\kappa' - \frac{2}{3}\,\mu)\,\nabla.\mathbf{u}\,\delta + 2\,\mu\,S \qquad \text{avec} \qquad \kappa' = \mathrm{C}^{\mathrm{te}}\,(Vol)^{2/3}\,\rho\sqrt{(\nabla\cdot\mathbf{u})^2}$$

La pression est ainsi modifiée par $p' = -\kappa'\,\nabla\cdot\mathbf{u}$. L'estimation de κ' dépend de la divergence de $\mathbf{u}$ (basée sur le gradient des variables conservatives dans AVBP), la taille de la cellule et la densité. La valeur optimale de la constante Cte est fixée 1 à partir de tests *a posteriori*.

6.2.4 Modèle de Cook&Cabot

Cook & Cabot (2005) ont proposé un modèle de viscosité artificielle permettant de traiter à la fois les chocs et la turbulence. Seule la partie traitant des chocs est décrite ici. L'idée est d'inclure un nouveau terme de viscosité de volume. L'avantage de cette formulation est que ce terme peut être très grand en dehors des chocs mais il n'y aura pas d'impact sur les régions où $\nabla\cdot\mathbf{u} \approx 0$. Dans le cas d'un écoulement réactif où l'expansion thermique due à la combustion peut venir activer le senseur, la pression induite reste négligeable comme il l'est vu par la suite.

Le tenseur des contraintes visqueuses s'écrit alors :

$$\tau_{modifie} = (\beta - \frac{2}{3}\mu)\ \nabla.\mathbf{u}\ \delta + 2\,\mu\,S \qquad \text{avec} \qquad \beta = C^{te}\rho(\Delta x)^4|\widetilde{\nabla^2\mathscr{S}}|$$

où $\mathscr{S} = \sqrt{S:S}$. Le $\tilde{}$ dénote un filtre gaussien tronqué (approximé dans AVBP par une moyenne sur les cellules) éliminant les oscillations hautes fréquences dues à la valeur absolue. La constante est fixée *a priori* à 5.

6.3 Comparaison des méthodes

6.3.1 Cas test : Tube à choc

Cette expérience numérique simule le cas d'un tube 1D contenant un diaphragme séparant deux zones à des états différents :

$$\{u = u_L, p = p_L, \rho = \rho_L, x < x_0, t = 0\} \qquad \text{et} \qquad \{u = u_R, p = p_R, \rho = \rho_R, x > x_0, t = 0\}$$

A $t = 0$, le diaphragme est retiré. Si les effets visqueux sont négligés, une solution analytique des équations d'Euler peut être obtenue basée sur les caractéristiques se propagent dans le tube, alors supposé infiniment long, comme le montre la figure 6.2.

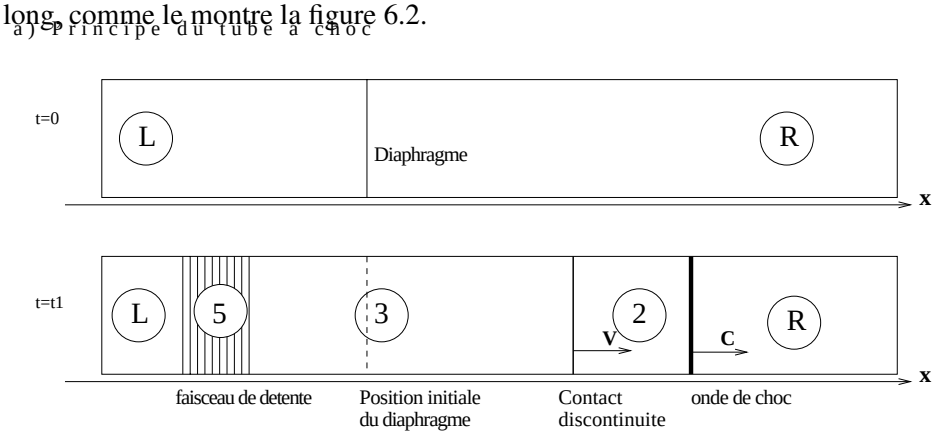


FIG. 6.2 - *Le problème de Riemann.*

Les résultats présentés sont basés sur des calculs avec le schéma TTG4A (Donea, 1984) sans viscosité artificielle additionelle du second ou du quatrième ordre (à part si le senseur de Jameson est utilisée). La pression à gauche est de 10^5 Pa et à droite 10^3 Pa. Le maillage (*triangle*) est composé de 500x2 noeuds avec des périodicité en haut et en bas. Quatre cas sont présentés :

1. La solution analytique de **Riemann**
2. La solution avec la viscosité artificielle de **Jameson**
3. La solution avec la viscosité artificielle de Von Neumann Richtmeyer : **VNR**
4. La solution avec la viscosité artificielle de **Cook**

La Fig. 6.3 présente l'évolution de la vitesse axiale, de la pression, de la température et de la densité le long de l'axe du tube à choc 5 ms après la rupture du diaphragme. Pour une meilleure lisibilité, seule la simulation avec le senseur de Cook est utilisée. Les zones d'interêt sont la détente et le choc, *i.e.* là où le senseur est censé se déclencher. Il est ainsi normal de voir des problèmes de positivité au niveau de la discontinuité.

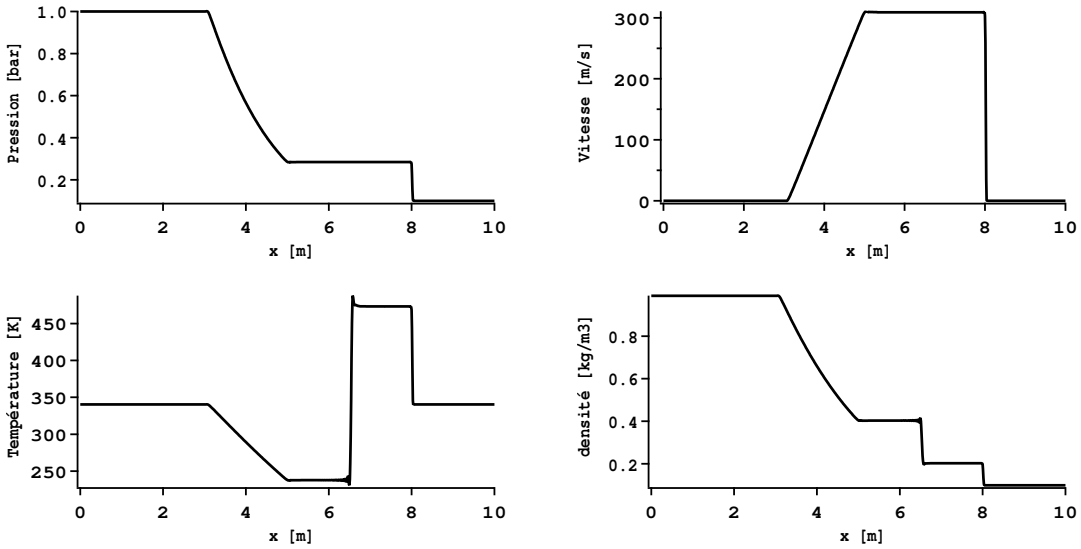


FIG. 6.3 - *Résultats avec TTG4A et le senseur de Cook & Cabot (2005).*

La Fig. 6.4 compare l'entropie dans le calcul utilisant **Cook** et la solution analytique. De bons accords sont observés.

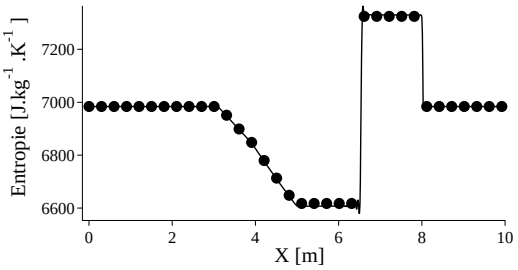


FIG. 6.4 - *Résultats avec TTG4A et le senseur de Cook & Cabot (2005) pour l'évolution spatiale de l'entropie.* — *:* AVBP, ● *: Rieman.*

Afin de mieux appréhender le travail de chacun des trois senseurs, un zoom est réalisé sur le choc ainsi que le faisceau de détente et les trois simulations sont comparées à la solution analytique. Ces résultats sont présentés en Fig. 6.5 pour la vitesse axiale ainsi que les niveaux de pression induits par les méthodes **VNR** et **Cook**. Au niveau du choc, le phénomène de Gibbs induit des dépassements des bornes de la solution (en lien avec l'utilisation de schéma centré). Seule la méthode **Cook** permet d'épaissir suffisament le choc pour définir ce dernier sur suffisament de cellules. Ce résultat est en particulier visible sur la pression induit par les deux hyperviscosités : le senseur **VNR** est très localisé tandis que

Cook agit également au niveau des "*undershoot*" et "*overshoot*". Aucune valeur non-physique n'est ainsi observée avec **Cook**. Le fait le plus marquent se situe au niveau du faisceau de détente où une pression non négligeable est introduite par l'approche **VNR** au contraire de **Cook** (mis à part en début et fin de faisceau).

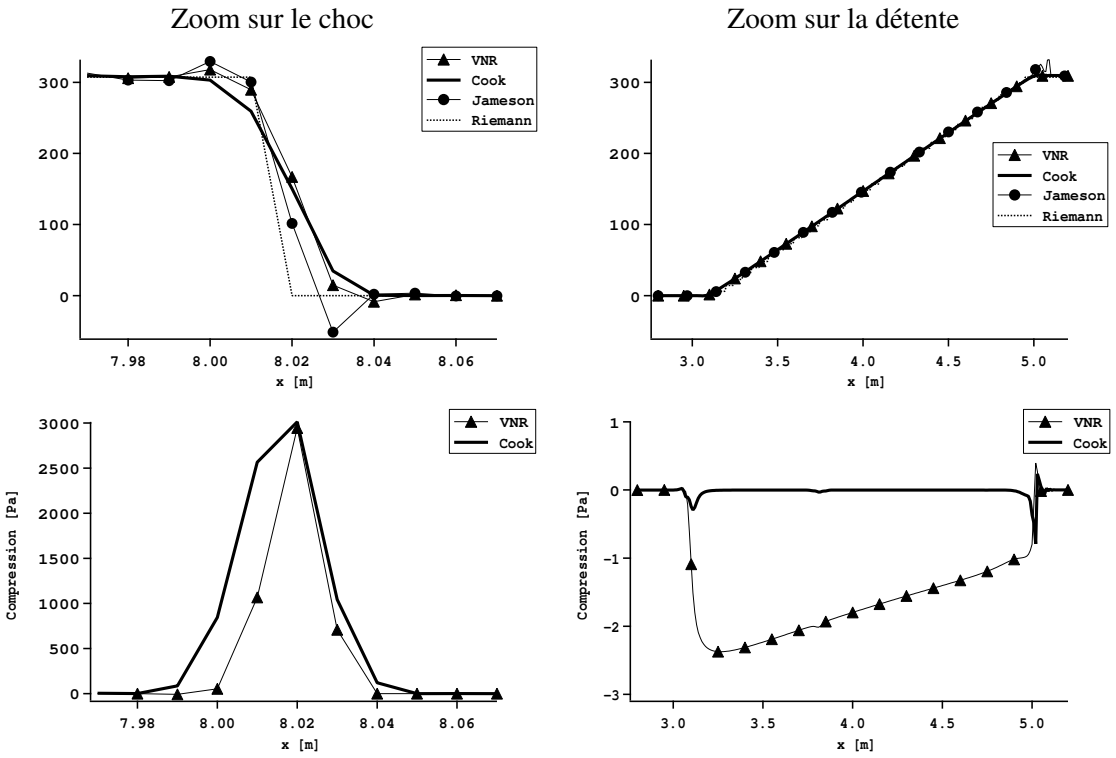


FIG. 6.5 - *Comparaison des différentes méthodes à la solution analytique au niveau des zones d'interêt, le choc et la détente. Vitesse axiale en haut et pression résultants des hyperviscosités* **VNR** *et* **Cook** *en bas.*

Au regard de ces résultats, seules la viscosité de Cook & Cabot (2005) sera utilisée pour les calculs nécessitant une méthode pour la capture de chocs.

6.3.2 Cas test 3D : Calcul d'une tuyère

La géométrie calculée correspond à l'une des deux tuyères alimentant le "statoréacteur de recherche". Cette tuyère présente un col amorcé ainsi qu'un choc en aval. Les niveaux de viscosité induits par l'utilisation de viscosité artificielle avec le senseur de Jameson sont trop importants pour ce calcul. De même, la simulation avec la méthode **VNR** mène à l'échec de la simulation, en raison du mauvais comportement de l'hyperviscosité artificielle dans les zones de détente. Seule la simulation avec la méthode de Cook & Cabot (2005) donne des résultats qualitativement satisfaisants. La Fig. 6.6 résume le cas apparaissant dans le statoréacteur de recherche pour un régime de haute altitude.

Afin de tester la robustesse de la méthode, la simulation a été pulsée par un bruit blanc injecté en sortie de configuration afin de reproduire les sollicitations dues aux fluctuations de pression provenant de la chambre de combustion du statoréacteur.

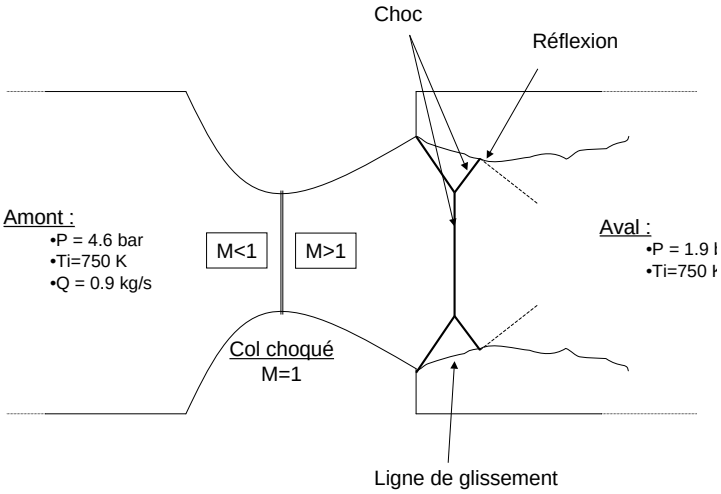


FIG. 6.6 - *Cas de haute altitude pour le Statoréacteur de Recherche de l'Onera*

Pour cela, un bruit blanc avec une fréquence de coupure de 15,000 Hz est généré à l'aide d'un signal aléatoire et d'un filtre passe-bas de Butterworth d'ordre 4. Une fluctuation maximale de 10^4 Pa est imposée. Une sortie à pression imposée caractéristique est utilisée en sortie et le signal de pression généré à partir du bruit blanc est ajoutée à l'onde entrante dans le domaine. Les Figs. 6.7 et 6.8 montrent une coupe dans le plan médian de la tuyère colorée par les valeurs moyennes et fluctuantes de pression et de température. La Fig. 6.9 montre l'évolution instantanée à travers le choc de la pression, la vitesse axiale et la pression induite par l'hyperviscosité de **Cook**. Ces corrections sont locales et empêchent la formation d'oscillations numériques ("*undershoot*" et "*overshoot*").

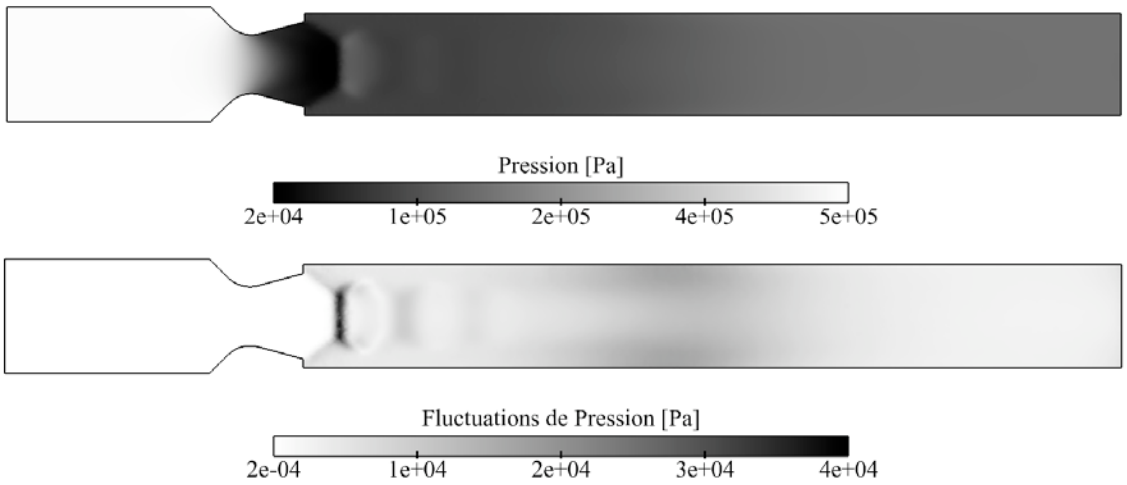


FIG. 6.7 - *Champs moyen et déviation standard de pression*

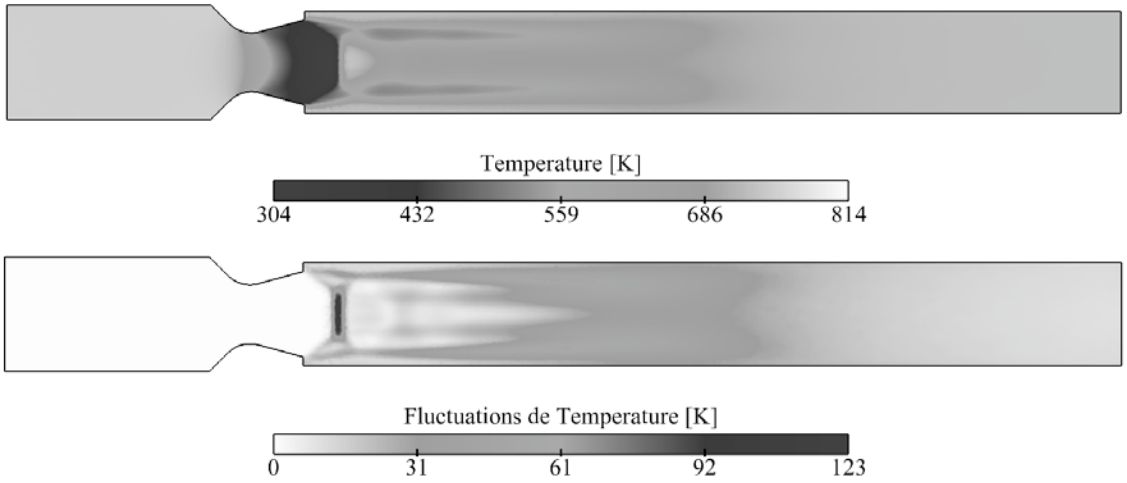


FIG. 6.8 - *Champs moyen et déviation standard de la température*

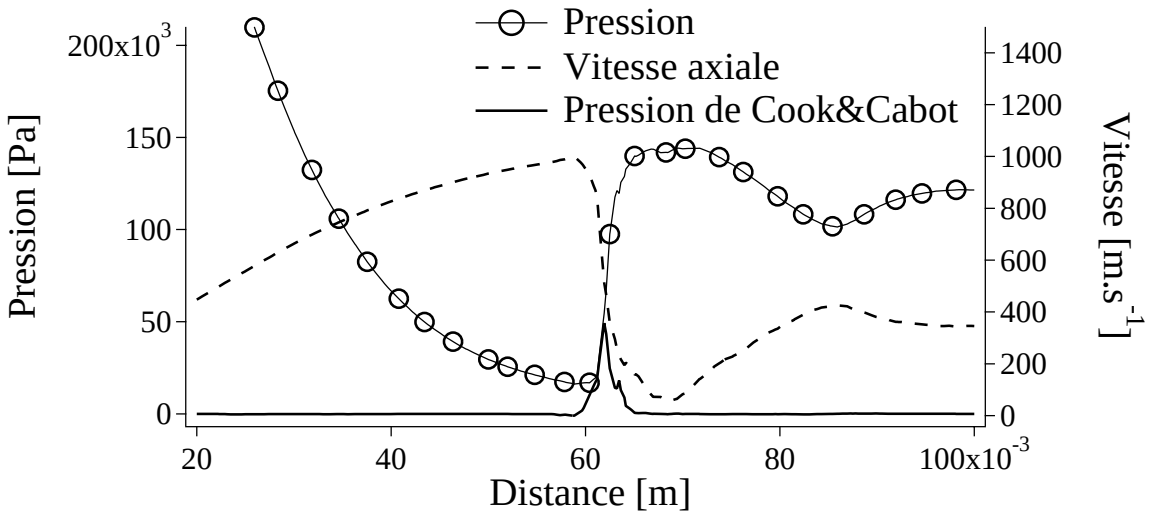


FIG. 6.9 - *Evolution spatiale de la vitesse axiale, de la pression et de la pression induite par le senseur de* **Cook** *à travers le choc droit.*

Chapitre 7

Outils de post-traitement et d'aide à la compréhension

La simulation aux grandes échelles donne accès à une somme considérable d'informations dont le traitement systématique n'est pas aisé, en particulier pour la description de l'écoulement instantané. Des méthodes de diagnostics avancés sont donc nécessaires pour explorer de manière ordonnée les oscillations liées à la stabilisation d'un cycle limite par exemple. Ce chapitre décrit trois diagnostics différents : l'utilisation d'un solveur de Helmholtz, de cartes spectrales et le recours à une décomposition en modes propres de l'écoulement.

7.1 Les cartes spectrales

Le premier diagnostic est l'utilisation de cartes spectrales qui offrent une représentation spatiale des régions où une fréquence donnée est présente. Pour de telles cartes, une transformée de Fourier est appliquée sur une variable donnée à tous les noeuds du maillage, la résolution spectrale étant liée à la fréquence de sauvegarde des clichés donnés par la SGE.

7.2 Le solveur de Helmholtz

Cette méthodologie permet de distinguer les modes hydrodynamiques des modes acoustiques par la résolution de l'équation de Helmholtz. Par cette approche, on cherche les modes propres acoustiques d'une géométrie connaissant l'écoulement moyen ($\overline{c}^2$) et en cherchant les solutions de l'Eq. 7.1 dans le domaine fréquentiel.

$$\nabla.\left(\overline{c}^2 \nabla p'\right) - \omega^2 p' = 0 \tag{7.1}$$

où p' est la perturbation acoustique de pression, $\overline{c}$ la vitesse locale moyenne du son (généralement issue du calcul SGE ou RANS). Le code utilisé est **AVSP**, développé au CERFACS (Nottin, 2000; Benoit & Nicoud, 2005; Nicoud *et al.*, 2007; Sensiau, 2008). L'approche est basée sur une hypothèse de nombre de

Mach nul, ce qui est raisonnable en début de tube à flamme[1]. La tuyère avale doit être traitée séparément. Celle-ci est alors remplacée par une impédance équivalente (Lamarque *et al.*, 2009) correspondant à une tuyère compacte amorçée (Marble & Candel, 1977). Cette hypothèse de nombre de Mach nul reste toutefois limitante comme l'ont montré Nicoud & Wieczorek (2009) bien que seule la fréquence des modes propres nous intéresse ici et non l'amortissement de ces derniers.

7.3 La Décomposition en Modes Propres (*POD*)

La Décomposition en Mode Propre (POD[2]) a été introduite initialement pour l'analyse de données expérimentales d'écoulements turbulents incompressibles (Berkooz *et al.*, 1993; Citriniti & George, 2000). L'objectif de cette approche est de représenter les quantités d'intérêt en une série de fonctions orthogonales obtenues en minimisant l'erreur associée à un opérateur de projection. De cette description modale de l'écoulement, il résulte une distribution énergétique des structures, chacune caractérisée par une évolution spatiale et temporelle propre. Des études précédentes ont montré l'intérêt de l'utilisation d'une telle méthode (Huang *et al.*, 2006; Kodal *et al.*, 2003) pour l'étude de chambre de combustion de turbines à gaz. En particulier, Huang *et al.* (2006) l'ont utilisé pour définir les modes les plus énergétiques dominant la chambre de combustion d'une turbine à gaz en soulignant les différents mécanismes prenant place lors de la combustion pour deux nombres de swirl différents. C'est pourquoi un outil POD a été développé pendant cette thèse pour mieux étudier les résultats obtenus par la SGE.

7.3.1 Théorie associée

Le principe de la POD est de déterminer une base $(\varphi_i, i = 1,2,...,n)$ choisie afin de maximiser la fonction suivante :

$$\max_{\psi} \frac{\langle |\{\mathbf{u},\psi\}|^2 \rangle}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle |\{\mathbf{u},\varphi\}|^2 \rangle}{\|\varphi\|^2} \tag{7.2}$$

où $\{\mathbf{u},\varphi\}$ est le produit scalaire associé à la projection, $\mathbf{u}(x,t)$ est la quantité d'intérêt étudiée[3] et $<>$ est la moyenne temporelle. Les vecteurs de la base POD sont des fonctions propres du noyau K défini par :

$$K(x,x') = \langle \mathbf{u}(x,t), \mathbf{u}(x',t) \rangle \text{ où } x \text{ et } x' \text{ sont deux coordonnées spatiales et } t \text{ le temps}$$

Dans le cadre de données obtenues par simulations numériques comme la SGE, l'approche "POD snapshots" est préférée. Celle-ci, introduite par Sirovich (1987), permet de définir les fonctions propres φ sans calculer explicitement le noyau K. Avec cette méthode, la décomposition est basée sur le recueil de clichés $\mathbf{q}(\mathbf{x},t_n)$ régulièrement espacés dans le temps (*i.e.* : $n = 1,\cdots,N$) permettant de discrétiser proprement les différents temps caractéristiques d'intérêt présents dans la simulation du domaine spatial

[1] Le nombre de Mach maximum est de l'ordre de 0.3 ce qui donne une erreur maximale sur les fréquences de résonance de $M^2 \simeq 9$ %.

[2] *Proper Orthogonal Decomposition.* en anglais

[3] comme la pression, la vitesse ou bien encore l'entropie.

Ω. On peut alors montrer que les fonctions propres de K sont une combinaison linéaire des clichés :

$$\varphi = \sum_{i=1}^{N} a_i \times \mathbf{q}(\mathbf{x}, t_i). \tag{7.3}$$

Les coefficients a_i satisfont le problème aux valeurs propres suivant où $\mathscr{C}$ est la matrice de corrélation, $\mathscr{T}$ la durée de la simulation et $\Psi^{(n)}(\mathbf{x})$ le vecteur propre spatial correspondant au $n^{\text{ème}}$ mode propre :

$$\int_{\mathscr{T}} C(t,t')\, a^{(n)}(t')\, dt' = \lambda^{(n)}\, a^{(n)}(t) \Leftrightarrow \mathscr{C}_{ij} = \frac{1}{M}\left\{\mathbf{q}(\mathbf{x}, t_i).\mathbf{q}(\mathbf{x}, t_j)\right\} \tag{7.4}$$

Les vecteurs propres de $\mathscr{C}$ permettent de construire la base POD[4] tandis que les valeurs propres déterminent l'importance de chaque vecteur propre.

Basée sur la description modale fournie par la POD, le champ $\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t)$ peut se réécrire par combinaison linéaire des vecteurs propres :

$$\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^{N} a^{(n)}(t)\Psi^{(n)}(\mathbf{x}). \tag{7.5}$$

7.3.2 L'opérateur de projection

La dernière étape consiste à définir le produit scalaire et la norme à utiliser. Différentes variables peuvent être utilisée. Toutefois, afin que le processus de minimisation conserve un sens physique, il est important de choisir une norme en lien avec une énergie. Cette dernière doit pouvoir s'exprimer à partir d'une fonction quadratique des quantités d'intérêt comme l'énergie acoustique (Huang *et al.*, 2006) qui permet de définir la norme L_2 par :

$$||\mathbf{q}||_2^2 = \{\mathbf{q}, \mathbf{q}\} = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} u' u' + \frac{1}{2} v' v' + \frac{1}{2} w' w' + \frac{p' p'}{\overline{\rho}^2 \overline{c}^2} \right) d\mathbf{x},$$

Dans l'Eq. (7.6), $\overline{\rho}, \overline{c}$ sont respectivement la densité et la vitesse du son locales moyennes. Dans le cas où les fluctuations de vitesse acoustique sont faibles ou négligeables devant les fluctuations hydrodynamiques de vitesse, cette norme peut être définie à partir du signal de pression seul :

$$\{\mathbf{q}, \mathbf{q}\} = \int_{\Omega} \frac{p' p'}{\overline{\rho}^2 \overline{c}^2}\, d\mathbf{x}, \tag{7.6}$$

Il est intéressant de noter que l'énergie moyenne limite peut être retrouvée à partir de la connaissance des valeurs propres issues de la décomposition :

$$E = \int_{\mathscr{T}} \int_{\Omega} \left(\frac{p'^2}{\overline{\rho}^2 \overline{c}^2} \right) d\mathbf{x}\, dt = \sum_{n} \lambda^{(n)}, \tag{7.7}$$

où $\lambda^{(n)}$ est la $n^{\text{ème}}$ valeur propre POD.

[4] On note que les vecteurs propres représentent l'évolution temporelle de ces modes

7.4 Exemple d'application des trois diagnostics

On considère ici l'exemple d'une cavité acoustique 2D de forme carrée de L=10 cm de côté. Le but est de comparer les résultats obtenus par les trois diagnostics et de voir s'ils sont à même de capter les différents modes acoustiques excités ainsi que le degré d'informations qu'ils fournissent.

7.4.1 Solution analytique

En supposant une évolution harmonique des ondes, les fluctuations temporelles et spatiales de pression p' peuvent s'écrire (Poinsot & Veynante, 2005) :

$$p' = \mathscr{R}\left(\hat{p}_\omega \exp^{-i\omega t}\right)$$

où $\hat{p}_\omega \in \mathbb{C}$, espace des complexes, et ω est la pulsation. Dans un écoulement homogène et isotrope, la linéarisation des équations de continuité et de quantité de mouvement mène à l'équation de Helmholtz :

$$\nabla^2 \hat{p}_\omega + k_\omega^2 \hat{p}_\omega = 0, \qquad \text{avec la relation de dispersion :} \qquad k_\omega^2 = \left(\frac{\omega}{c_0}\right)^2 \tag{7.8}$$

où c_0 est la vitesse moyenne du son. La géométrie considérée étant de forme carrée, on choisit d'appliquer la méthode de séparation des variables sous la forme :

$$\hat{p}_\omega(x,y) = X(x)Y(y). \tag{7.9}$$

En remplaçant l'Eq. 7.9 dans l'Eq. 7.8, on obtient :

$$\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + k^2 = 0. \tag{7.10}$$

En utilisant la relation $k_\omega^2 = k_x^2 + k_y^2$, l'Eq. 7.10 peut être séparée comme suit :

$$\frac{X''}{X} + k_x^2 = 0, \qquad \frac{Y''}{Y} + k_y^2 = 0 \tag{7.11}$$

Les conditions aux limites sont :

$$\left.\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0,L} = 0, \qquad \left.\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}y}\right|_{y=0,L} = 0. \tag{7.12}$$

La solution de l'Eq. 7.11 associée aux conditions aux limites (Eq. 7.12) est alors :

$$X(x) = \cos(k_x x), \qquad Y(y) = \cos(k_y y),$$

pour lesquelles les nombres d'onde k_x et k_y doivent satisfaire la condition suivante :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \sin(k_x L) & = & 0 \\ \sin(k_y L) & = & 0 \end{array}\right. \Longrightarrow \left\{\begin{array}{rcl} k_x & = & n_x \pi / L \\ k_y & = & n_y \pi / L \end{array}\right. ,$$

où n_x et n_y sont des entiers positifs. Les modes propres acoustiques sont finalement donnés par :

$$\hat{p}_\omega = P_{amp} \times \cos(n_x \pi x/L) \times \cos(n_y \pi y/L)$$

où P_{amp} représente l'amplitude des fluctuations de pression. Les variables p', u' and v' s'écrivent finalement :

$$\begin{array}{rcrcrcrcl} p'(x,y,t) & = & P_{amp} & \times & \cos(n_x \pi x/L) & \times & \cos(n_y \pi y/L) & \times & \cos(\omega t + \frac{\pi}{2}) \\ u'(x,y,t) & = & \frac{\pi n_x}{\rho_0 \omega L} P_{amp} & \times & \sin(n_x \pi x/L) & \times & \cos(n_y \pi y/L) & \times & \cos(\omega t) \\ v'(x,y,t) & = & \frac{\pi n_y}{\rho_0 \omega L} P_{amp} & \times & \cos(n_x \pi x/L) & \times & \sin(n_y \pi y/L) & \times & \cos(\omega t) \end{array}$$

La fréquence associée au mode (n_x, n_y) est alors $\mathscr{F}(n_x, n_y) = \frac{c}{2}\left[\left(\frac{n_x}{l_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{l_y}\right)^2\right]^{(1/2)}$ avec dans notre cas $l_x = l_y = L$.

7.4.2 Solveur acoustique

Un champ moyen où les quantités d'intêret -vitesse et pression- sont constantes est initialisé pour le calcul des modes propres de la configuration à l'aide du solveur acoustique.

La Fig. 7.1 représente la partie réelle des fluctuations de pression adimensionalisée pour les 19 premiers modes propres acoustiques de la configuration. Les différents vecteurs propres calculés représentent une base possible pour cette configuration. En effet, toute combinaison linéaire de deux vecteurs propres de cette base est également vecteur propre. Ceci explique explique pourquoi les deux premiers modes donnés par le solveur acoustique sont par exemple $\{(1,0)-(0,1),(1,0)+(0,1)\}$ et non pas plus simplement $\{(1,0),(0,1)\}$.

Le code acoustique permet ainsi de déterminer l'ensemble des modes propres acoustiques de la configuration.

7.4.3 Simulation de référence

Les trois diagnostics vont être appliquées sur les résultats obtenus à partir d'un ensemble de clichés construits de manière analytiquement. Trois modes ont été initialisés (cf Fig. 7.2) : les modes $\{n_x, n_y\} = \{1,1\},\{2,2\},\{3,3\}$. Une fluctuation de vitesse constante de 0.01 m.s^{-1} est imposée soit une fluctuation de pression de 5.7 Pa environ.

40 ms sont simulées et 800 clichés sont sauvegardés pour le post-traitement, soit une fréquence d'échantillonnage de 20.000 Hz et une résolution fréquentielle de 25 Hz.

7.4.4 Cartes spectrales

Trois cartes spectrales sont construites aux fréquences des modes propres initialisés. La Fig. 7.6 représente l'amplitude et la phase des coefficients de Fourier pour ces trois fréquences ainsi que la re-

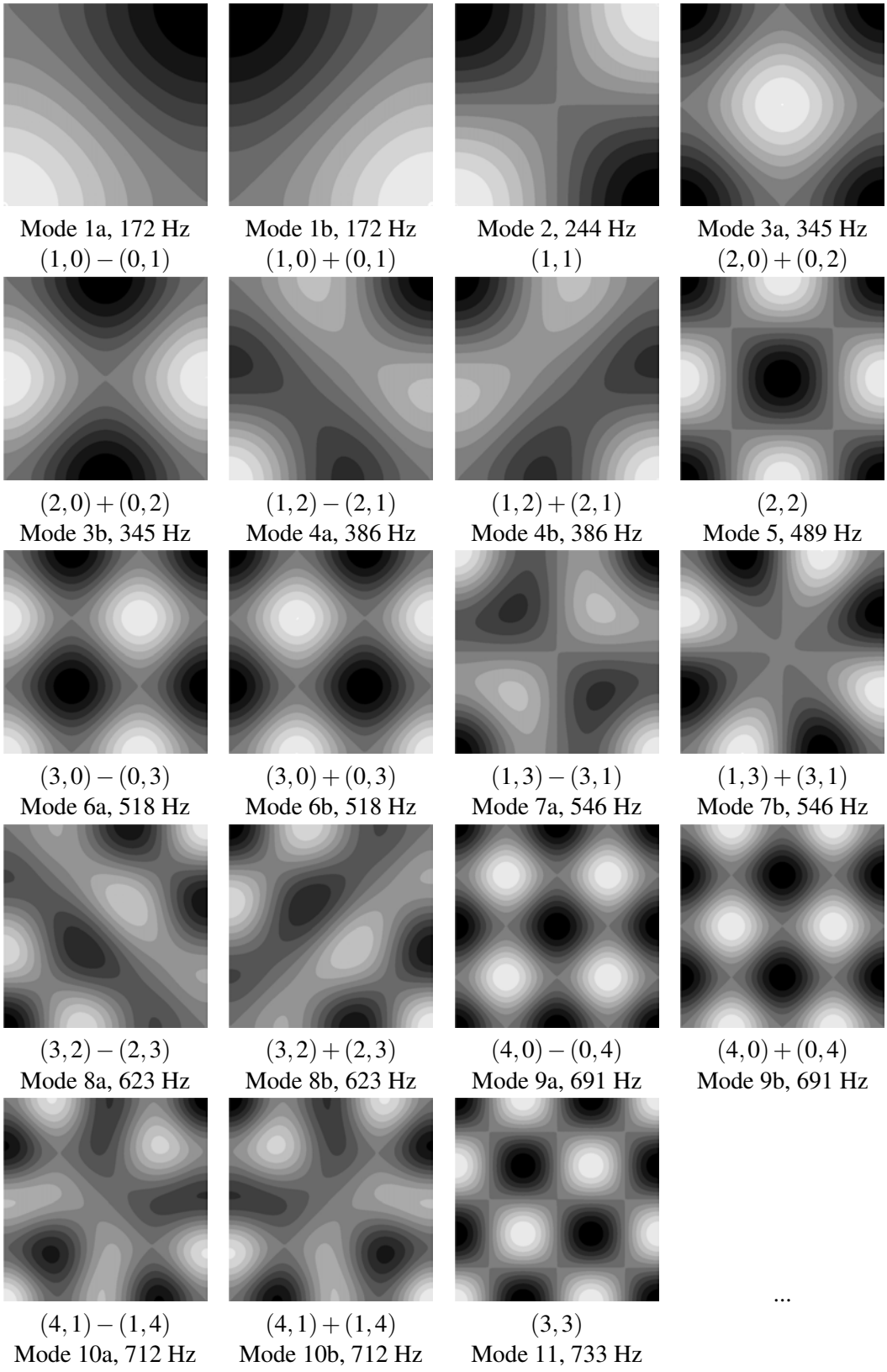
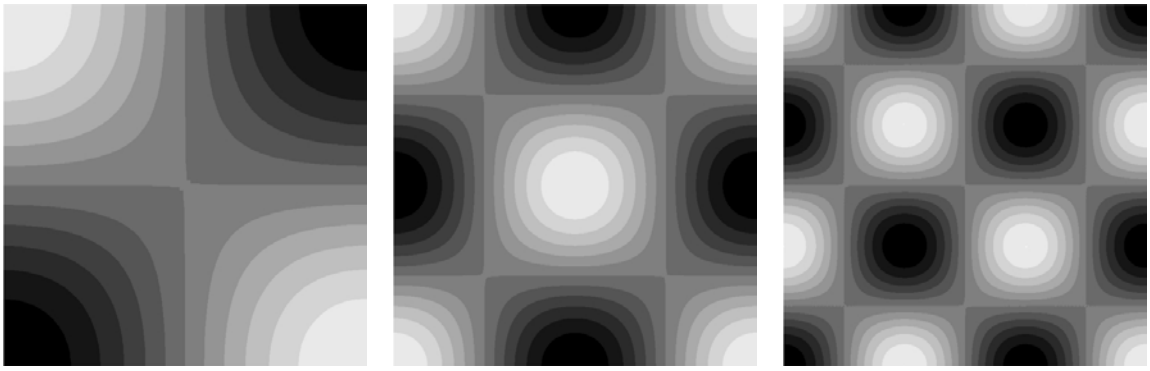


FIG. 7.1 - *Partie réelle des fluctuations de pression adimensionnalisées données par le solveur acoustique. La structure des modes (n_x, n_y) est également indiquée. Du noir (-1) au blanc (1).*



{1,1} F=244 Hz | {2,2} F=489 Hz | {3,3} F=733 Hz

FIG. 7.2 - *Structures des trois modes initialisés pour la simulation* AVBP. *Fluctuations de pression.*

construction de la partie réelle des fluctuations de pression pour un temps nul. Les trois modes sont bien retrouvés. On note que les fluctuations de pression ne sont pas toutes identiques car la durée du signal ne correspond pas à un nombre entier de période de chaque mode.

7.4.5 Décomposition en Modes Propres

Finalement, une décomposition en mode propre est appliquée. Le produit scalaire est basé sur l'énergie acoustique ($\mathbf{q} = \{u', v', p'\}$). La Fig. 7.4 montre la valeur des dix premiers modes propres. Seules six valeurs sont non nulles. Ces six modes permettent de représenter l'évolution des fluctuations de pression et de vitesse des trois modes acoustiques. Chaque mode acoustique est représenté par un doublet de modes POD.

La Fig. 7.5 montre l'évolution temporelle des vecteurs propres POD. Les deux signaux issus d'un même doublets sont en quadrature de phase comme le montre les Fig. 7.5 -droite- et évoluent à la même fréquence, celle du mode acoustique. Ce déphasage est expliqué par l'Eq. 7.13. La pression et les composantes de vitesse sont déphasées de $\pi/2$ et la POD permet de rendre compte de ce phénomène. On note que les modes sont classés par énergie décroissante et que le mode à 733 Hz apparaît en premier suivi du mode à 489 Hz et enffet du mode à 244 Hz.

Ainsi, si on s'intéresse maintenant à la projection spatiale des modes POD en Fig. 7.6, on peut voir que chaque doublet est composé d'un mode où les fluctuations de vitesse sont négligeables et pas celles de pression et l'inverse pour le second mode. La POD permet ainsi de rendre compte de la structure, de la fréquence mais aussi de la composition de modes acoustiques. Il est intéressant de souligner qu'il existe une certaine distorsion des résultats au fur et à mesure que la fréquence du mode diminue et donc que celui-ci est représenté par de moins en moins de périodes.

On notera toutefois que dans une simulation de géométrie complexe, les fluctuations de vitesse dues à l'acoustique sont généralement faibles devant celles liées à l'aérodynamique et que la norme utilisée peut se réduire à l'utilisation des fluctuations de pression.

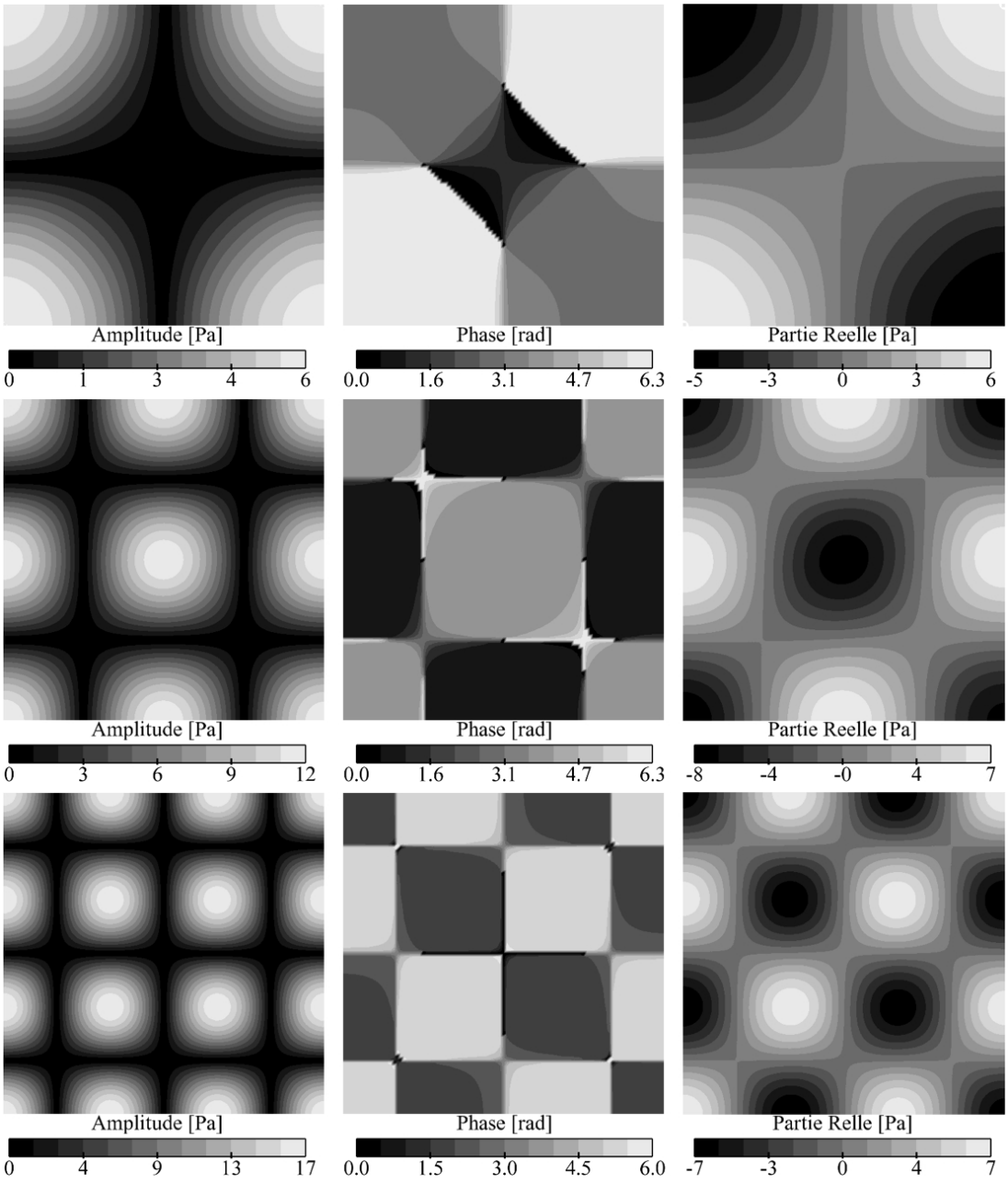


FIG. 7.3 - *Amplitude, phase et partie réelle des fluctuations de pression données par l'outil de carte spectrale.*

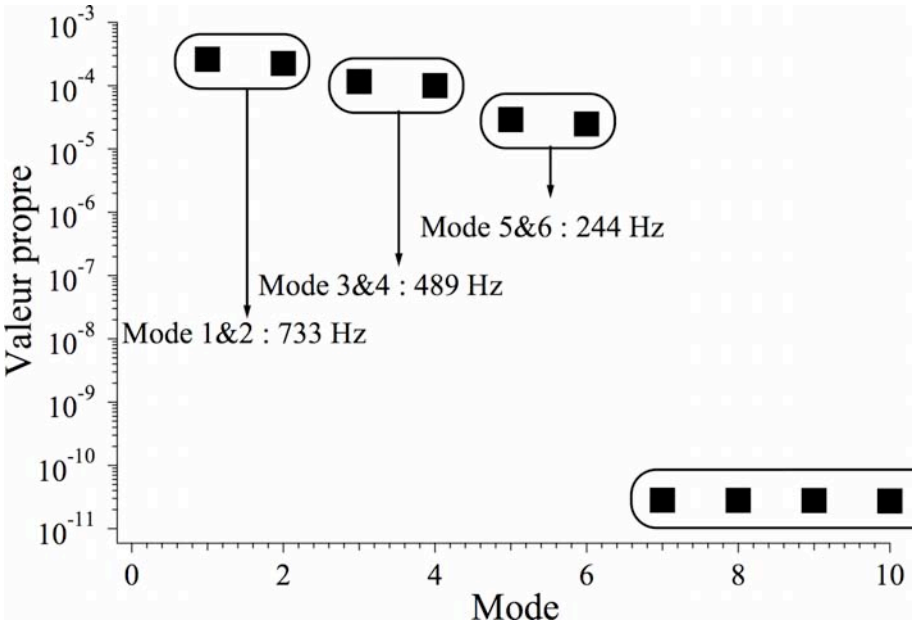


FIG. 7.4 - *Valeurs propres $\lambda^{(n)}$ des modes issus de la POD.*

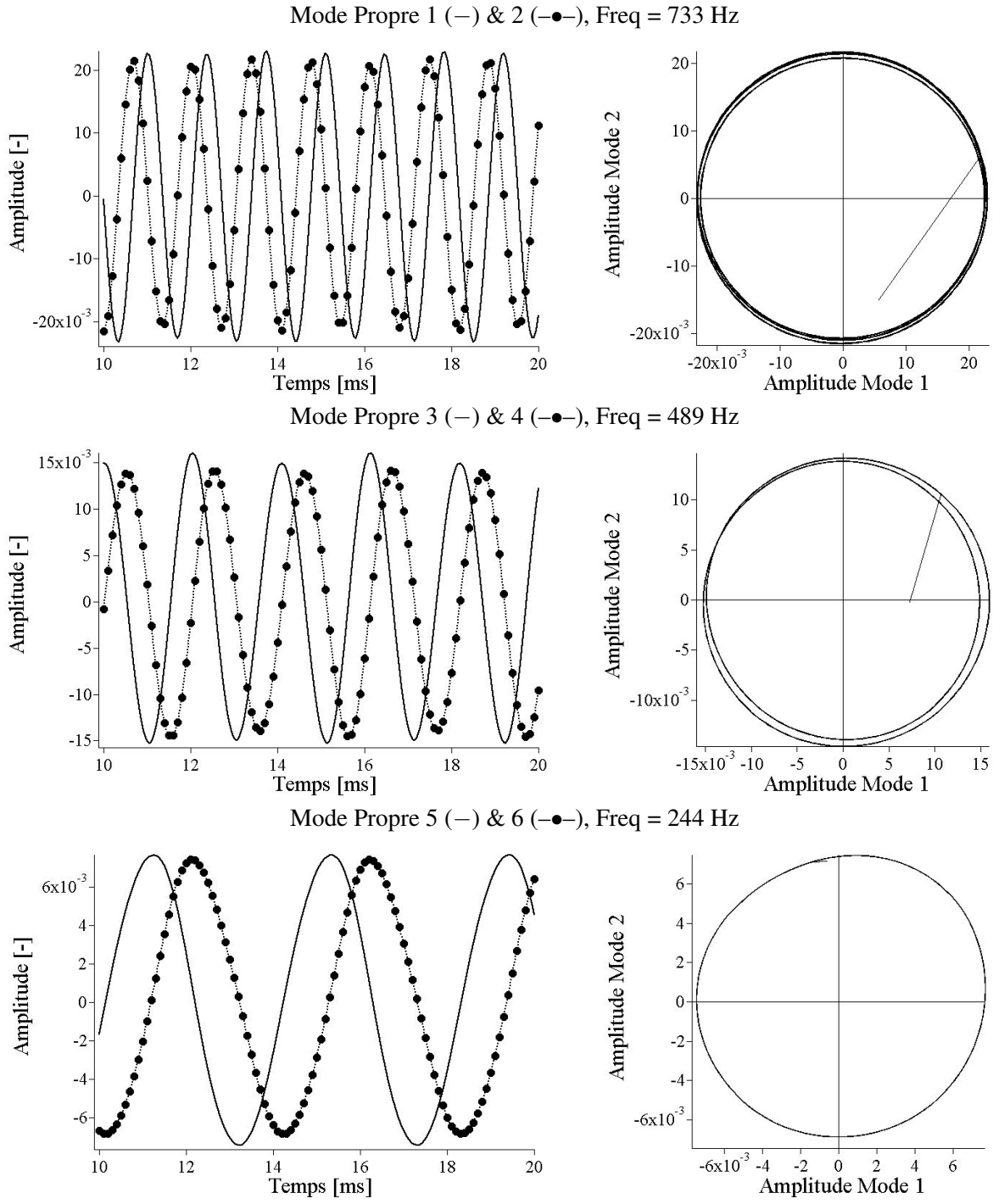


FIG. 7.5 - *Les six premiers modes propres $a^{(n)}(t)$ obtenus par l'outil POD. Evolution temporelle des doublets de vecteurs propres à gauche et évolution jointe des deux modes à gauche.*

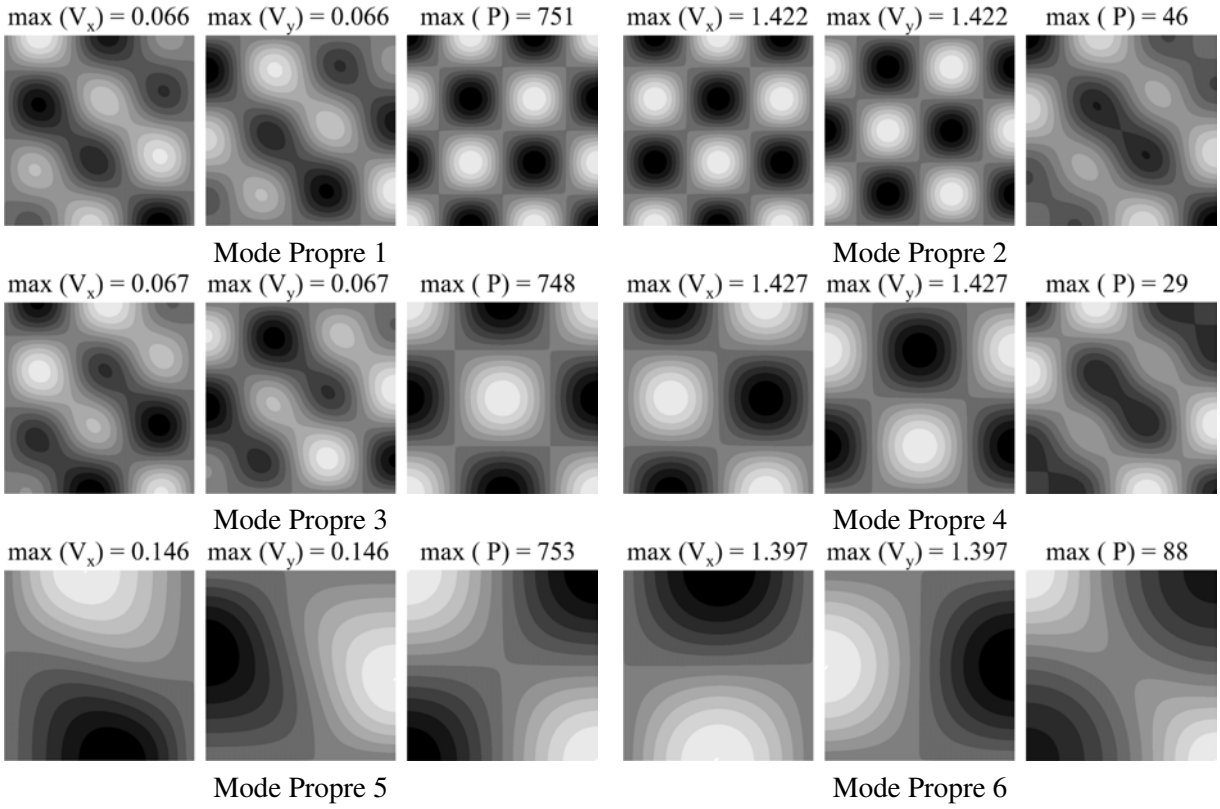


FIG. 7.6 - *Projection spatiale des modes POD, $\Psi^{(n)}(\mathbf{x})$, obtenus par l'outil POD. Champs de vitesse axiale, verticale et de pression adimensionnées par la valeur maximale indiquée au-dessus de chaque sous-figure. Du noir (-1) au blanc (1).*

Deuxième partie

Simulation aux Grandes Echelles d'un statoréacteur

Table des Matières

8 Présentation de la configuration **113**
8.1 Le programme “Statoréacteur de Recherche” . . . 113
8.2 Configuration . . . 117
8.2.1 Géométrie . . . 117
8.2.2 Maillage . . . 118
8.2.3 Conditions aux limites . . . 119
8.2.4 Conditions initiales et allumage de la configuration . . . 120
8.2.5 Paramètres de la simulation . . . 121
8.2.6 Schéma de cinétique chimique . . . 121
8.2.7 Grandeurs caractéristiques de l’écoulement réactif . . . 123

9 Topologie de l’écoulement à froid **125**
9.1 Structure de l’écoulement moyen . . . 125
9.2 Structure de l’écoulement instantanné . . . 131

10 Calculs réactifs de la géométrie simplifiée **133**

11 Impact de la cinétique chimique **171**

12 Phénoménologie de la combustion au sein du “Statoréacteur de Recherche” **213**
12.1 Topologie de l’écoulement moyen . . . 214
Comportement moyen dans la chambre principale . . . 214
Comportement de l’écoulement dans les tuyères amonts . . . 220
Rendement de la chambre . . . 220
12.2 Résultats instationnaires . . . 222
12.2.1 Principaux modes excités dans le statofusée . . . 222
Fréquences caractéristiques liées aux zones réactives . . . 225
12.3 Processus de combustion dans le statofusée . . . 228
12.3.1 Etude détaillée du **Mode 3**, cas C (ϕ=0.75) . . . 228
12.3.2 Etude détaillée du **Mode 1**, cas A . . . 240
12.3.3 Couplage entre les modes . . . 244
12.4 Conclusion . . . 255

Cette partie est dédiée à l'étude de l'écoulement monophasique réactif dans la configuration du "Statoréacteur de Recherche" étudié expérimentalement et numériquement (méthodes RANS et SGE) par l'ONERA.

Les statoréacteurs sont très sensibles aux instabilités et leur prédiction ne peut être traitée de manière adéquate par que par la simulation aux grandes échelles[5]. Avec cette technique, les solveurs peuvent être implicites ou explicites, manipuler des maillages structurés ou non, mono-éléments ou hybrides... Les modèles de turbulence et de combustion sont d'autres sources de différences. Les méthodes numériques et les modèles physiques doivent ainsi permettre de simuler avec précision les différents phénomènes physiques mis en jeu et ceci pour des longueurs d'onde très différentes (en omettant les discontinuités de chocs, on citera les échelles de la turbulence ou les modes acoustiques longitudinaux). L'impact de ces modèles a en particulier été étudié en collaboration avec l'ONERA mais n'est pas présenté dans cette partie. Pour plus de précision, le lecteur pourra se reporter à l'annexe B qui est un article soumis aux Compte-Rendus de Mécanique de l'Académie des Sciences et qui compare les résultats obtenus par le code SGE CEDRE de l'ONERA[6] et AVBP du CERFACS et de l'IFP.

1. Le Chap. 8.1 présente l'expérience du "Statoréacteur de Recherche" étudiée par l'ONERA avec en particulier le comportement de la combustion pour un régime de vol de haute altitude et à richesse variable.
2. Le Chap. 8.2 présente brièvement une description de la topologie de l'écoulement non-réactif. Les principales structures caractéristiques de l'écoulement dans une configuration à prise d'air et à élargissement brusque sont décrites. L'accent n'est pas mis toutefois sur le comportement instationnaire de la chambre.
3. Les premiers calculs sur la configuration du "Statoréacteur de Recherche" sont présentés au Chap. 10 et ont été effectués sur une configuration simplifée de la chambre, ne comprenant ni les diffuseurs des entrées d'air ni la chambre de préinjection de carburant (présentée au Chap. 9). Cette première étape a permis d'identifier les points durs de la configuration. En particulier, il est montré que l'impédance acoustique des entrées et des sorties d'air est déterminante dans la description des modes acoustiques longitudinaux de la chambre, fait parfaitement retrouvé dans la littérature (Tsien, 1952; Marble & Candel, 1977; Dowling, 1995; Lamarque & Poinsot, 2008). Le deuxième point identifié grâce au calcul sur la géométrie simplifiée est la présence de hautes fréquences, *a priori* absent de l'expérience. On note toutefois que la fréquence maximale des capteurs de pression ne permet toutefois pas d'atteindre ces hautes fréquences. L'utilisation de différents diagnostics a permis d'identifier leur nature ainsi que le transfert d'énergie entre les modes et a fait l'objet d'une publication dans Combustion&Flame. Leur amplification a été reliée au mauvais comportement du schéma cinétique simplifié pour des gammes riches de richesse.
4. Le Chap. 11 est dédié à l'étude de l'impact de la description de la cinétique chimique sur l'écoulement réactif monophasique. Il est montré qu'en raison du régime partiellement prémélangé dans la chambre, une bonne description de l'évolution de la vitesse de flamme en fonction d'une gamme de richesse élargie est nécessaire pour reproduire le processus de combustion au sein du statofusée. Ce chapitre a fait l'objet d'un article soumis au journal Combustion&Flame.
5. Une fois le schéma cinétique déterminé, le régime de vol est exploré dans le Chap. 12 et les différents mécanismes de stabilisation de la flamme ainsi que les différents modes exités dans la

[5] La simulation directe reste bien sûr la méthode ultime mais reste inaccessible aujourd'hui pour ces applications en raison de temps de calculs trop importants.

[6] www.onera.fr

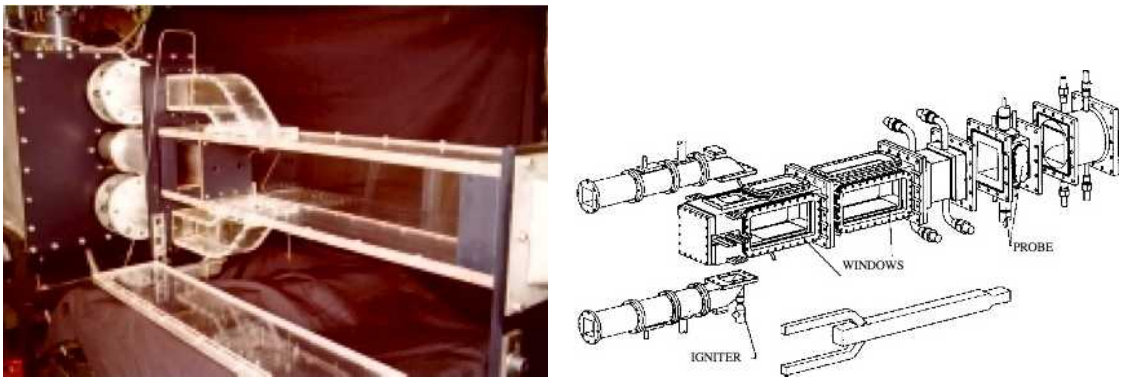
chambre sont décrits. L'accent est en particulier mis sur l'apport de la SGE aux conclusions tirées de l'expérience.

Chapitre 8

Présentation de la configuration

8.1 Le programme “Statoréacteur de Recherche”

En 1995, l'Office National d'Etudes et de Recherche Aérospatiale (*ONERA*) a lancé un programme de recherche sur les statoréacteurs à combustion subsonique. Les motivations de ces études étaient doubles : il s'agissait en premier lieu d'améliorer la compréhension de l'écoulement au sein d'un tel propulseur. Pour cela, deux grands axes ont été développés. D'une part, une maquette de statoréacteur a été installée à l'ONERA Toulouse pour étudier le mélange à pression atmosphérique dans les différentes zones de la chambre de combustion ainsi que l'aérodynamique interne de celle-ci à l'aide de visualisation hydraulique. D'autre part, une maquette dédiée à l'étude du champs réactif a été montée à l'ONERA Palaiseau (Fig. 8.1).



Mélange Combustion

FIG. 8.1 - *Vue des deux maquettes réalisées dans le cadre du “Statoréacteur de Recherche”.*

En parallèle, le développement des derniers statoréacteurs comme l'ASMP (*Air-Sol Moyenne Portée*) de MBDA s'étant effectué essentiellement à l'aide d'expériences, le principal but de l'ONERA était de créer une base de données expérimentale complète (champs aérodynamique, vitesse, concentration des espèces, émission de radical OH*, mesures de pression..) permettant la validation de codes de simulation numérique afin d'alléger le nombre d'essais nécessaires à la réalisation d'un nouveau propulseur.

La maquette pour les essais aéroliques (Heid & Ristori, 2003, 2005) a permis de caractériser le mélange dans le statoréacteur. Cette maquette est à l'échelle 1,6 :1 par rapport à la configuration réactive. Le débit imposé dans les manches à air est de 1,1 kg.s^{-1} au lieu de 0,9 kg.s^{-1} et la température de l'air de 293 K. Le rapport de débit entre les deux configurations a été respecté, soit $\dot{Q}_{C_3H_8}/\dot{Q}_{air} = \dot{Q}_{CO_2}/\dot{Q}_{air}$.

Pour la maquette combustion, une large gamme de régimes de vol a été explorée, ceux-ci sont récapitulés en Tab. 8.1.

Régime de vol	$T_i^{injection1}$	Débit d'air	Limite d'extinction	
			Pauvre	Riche
Quasi-moyenne altitude	635 K	1,35 $kg.s^{-1}$	Non déterminée	Non déterminée
Haute Altitude	750 K	0,9 $kg.s^{-1}$	0,28-0,32	0,95-1,0

TAB. 8.1 - *Régimes de vol étudiés expérimentalement par l'ONERA*

Parmi les résultats expérimentaux les plus intéressants décrits par Ristori *et al.* (1999, 2005); Heid & Ristori (2003, 2005); Reichstadt *et al.* (2007), l'émission de radical OH permet de décrire la distribution spatiale moyenne des zones réactives. La Fig. 8.2 montre l'émission de radical OH intégrée dans la profondeur pour un régime de haute altitude à trois richesses globales[2] différentes : 0.35, 0.5 et 0.75. Deux zones se détachent clairement. D'une part, une prémière zone de combustion au droit des entrées d'air dans le latéral qui se caractérise par une intensité lumineuse importante. Celle-ci est en particuler associée aux couches de cisaillement identifiées en sortie de manche à air. Il est également intéressant de noter que ces zones réactives moyennes sont de plus en plus détachées des couches de mélange issues des manches à air au fur et à mesure que la richesse augmente et se détachent de l'axe de symmétrie du statofusée à faible richesse. La seconde zone se situe dans le dôme de la chambre et se caractérise par une intensité plus faible. Celle-ci est d'autant moins intense que la richesse globale est importante et est même absente pour le cas ϕ=0,75. Ce phénomène peut s'expliquer *a priori* par l'extinction de la flamme en raison d'une richesse trop importante dans le dôme et permet d'expliquer le déplacement de la zone réactive vers l'aval de la chambre de combustion, dans une région où l'oxygène est plus disponible. Il est ainsi essentiel de pouvoir prédire avec exactitude le mélange dans cette zone.

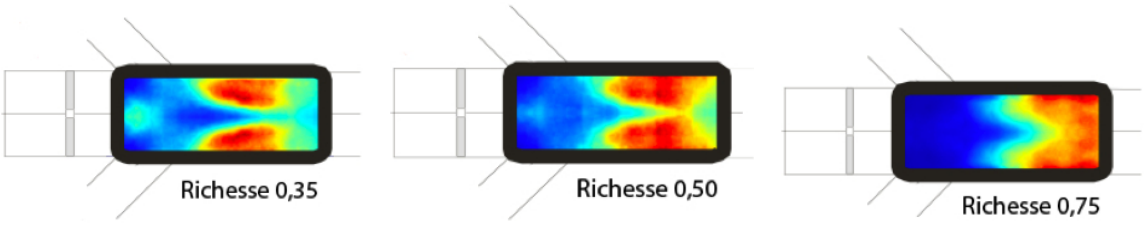


FIG. 8.2 - *Localisation des zones réactives dans le "statoréacteur de recherche" - Emission intégrée sur la profondeur de la chambre - : (a) $\phi = 0.35$, (b) : $\phi = 0.5$, (c) : $\phi = 0.75$*

Le cas à richesse 0.75 est le régime qui a été le plus étudié expérimentalement. Il s'agit du cas le plus stable, celui à richesse 0.35 étant proche de l'extinction pauvre (cf Tab. 8.1). Ce cas ϕ=0.75 servira donc

[2]La richesse globale est définie comme étant le rapport des débits de carburant et d'air pondéré par $s = 3.636$.

de référence pour comparer les résultats issus des simulations numériques à l'expérience. La gamme de vol sera ensuite explorée afin de voir si le changement de comportement de la flamme est bien perçu.

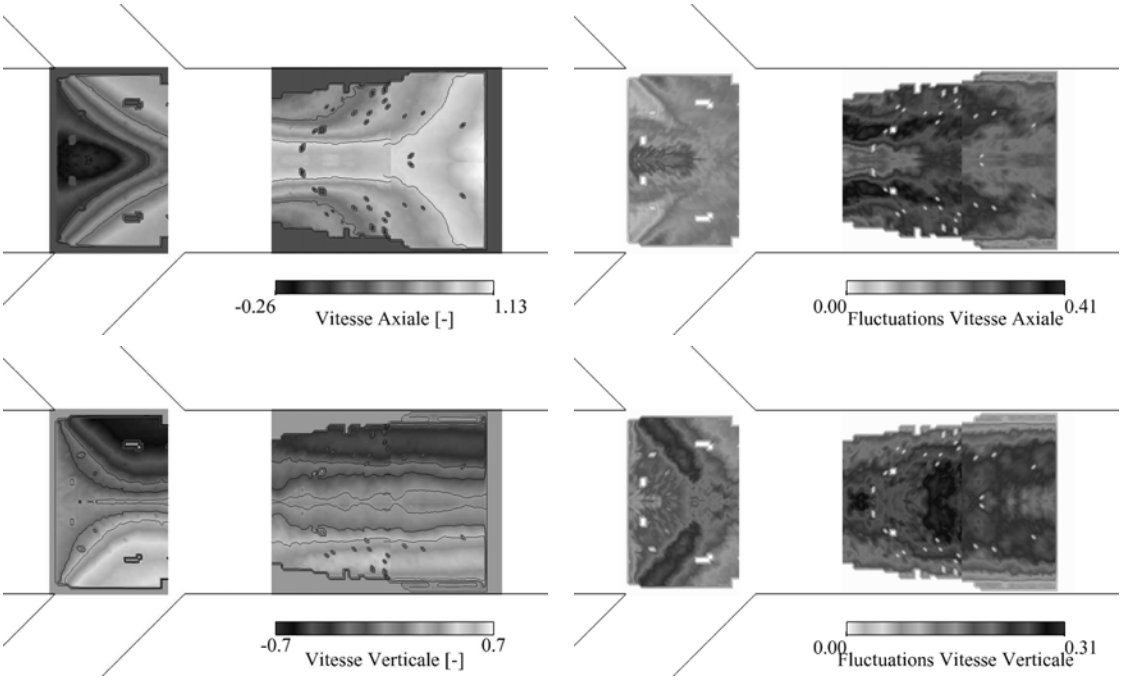


FIG. 8.3 - *Vitesses moyennes et fluctuantes obtenues dans le plan médian $Z = 0$mm, les vitesses sont adimensionnées par la vitesse débitante dans les manches à air*

Différents phénomènes peuvent être analysés fréquentiellement. Tout d'abord, la répartition de capteurs de pression instationnaire permet d'évaluer les différentes fréquences excitées dans la configuration. La Fig. 8.4 montre la densité spectrale de puissance du signal de fluctuation de pression en trois points de la chambre pour la richesse $\phi = 0,75$ en fonction du nombre de Strouhal $\mathrm{St} = \frac{\mathrm{f \cdot D}}{U_{bulk}}$ où D correspond à la hauteur des manches à air et U_{bulk} la vitesse caractéristique dans ces dernières. Trois fréquences principales sont identifiées à des nombres de Strouhal de 0.03, 0.067 et 0.09.

L'acquisition numérique vidéo de vues de la flamme, la caméra (dont la fréquence d'acquisition est de 4000 Hz) étant équipée de filtres interférentiels permettant la détection des radicaux OH* ou CH*, permet également de caractériser le spectre.

Sondes	X(mm)	Y(mm)	Z(mm)
A	295	50	0
B	539	50	0
C	539	0	0

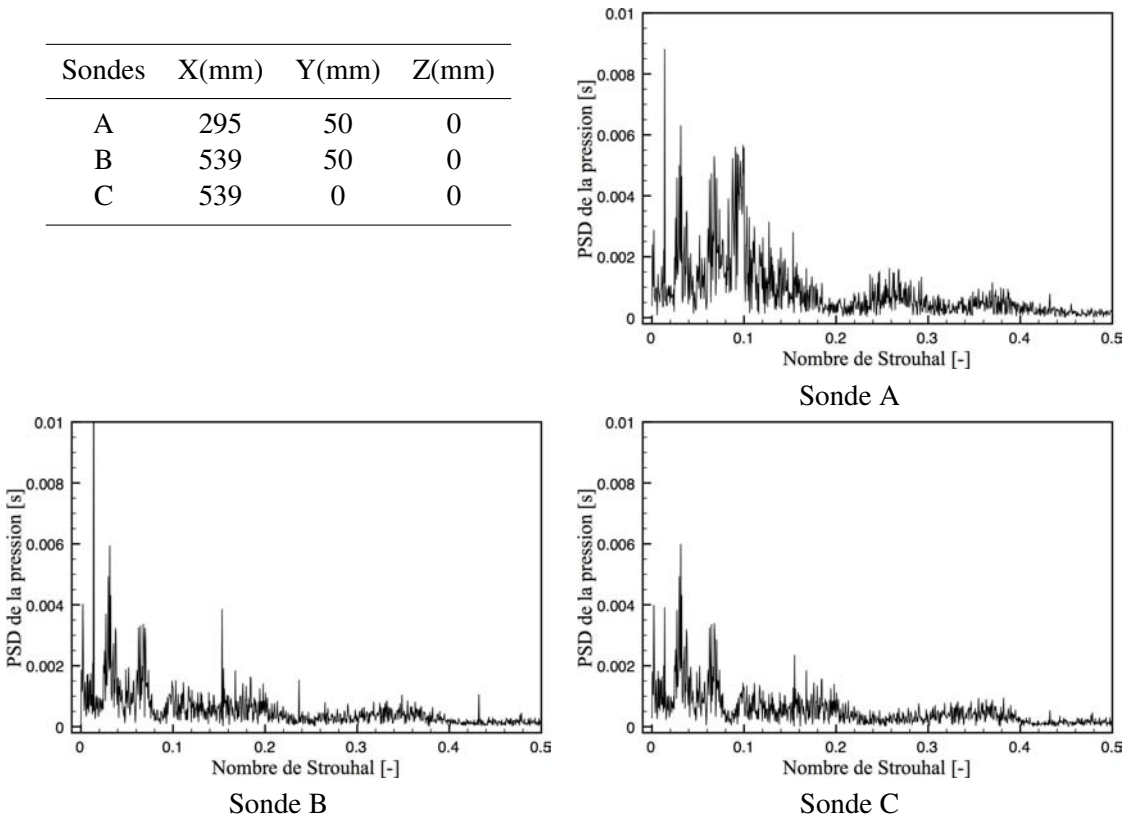


FIG. 8.4 - *Densité spectrale de puissance des fluctuations de pression dans la chambre de combustion issues de l'expérience à* $\phi = 0,75$ *(Reichstadt* et al.*, 2007)*

8.2 Configuration

8.2.1 Géométrie

La Fig. 8.5 présente les principaux modules du “Statoréacteur de Recherche” et la Fig. 8.6 les détails géométriques liés à la chambre de combustion principale :

- L’air pénètre dans deux tuyères de section circulaire de 56 mm de diamètre en amont et de 24,4 mm au col.
- Celui-ci pénètre dans deux manches à air de 900 mm de long de section carrée de 50 mm de côté puis pénètre dans la chambre principale par deux coudes inclinés de 45 degrés et positionnés de part et d’autre de la chambre.
- La chambre de combustion est de section carrée de 100 mm de côté et mesure 1206 mm de long. La position longitudinale des manches à air permet de définir deux zones : la région du dôme en amont de celles-ci et la région avale. La chambre se termine par une tuyère circulaire de 55,8 mm au col.
- Le carburant est injecté par 8 trous de 1,6 mm de diamètre dans une boîte de pré-injection située en amont du dôme. Ces deux zones communiquent entre elles par deux tubes de 11 mm de diamètre. La présence de cette boîte est liée au dispositif d’acquisition par PIV (Particle Image Velocimetry). En effet, cette méthode de mesure de la vitesse nécessite l’utilisation d’une nappe laser dans laquelle le déplacement de particules (l’écoulement est ici ensemencé de particules d’oxyde de magnésium) va être étudié. Afin de générer des plans de mesures parallèles à l’axe du statoréacteur, il est donc nécessaire de générer cette nappe en amont du fût et c’est pourquoi la cavité d’injection de propane en silice a été réalisée.

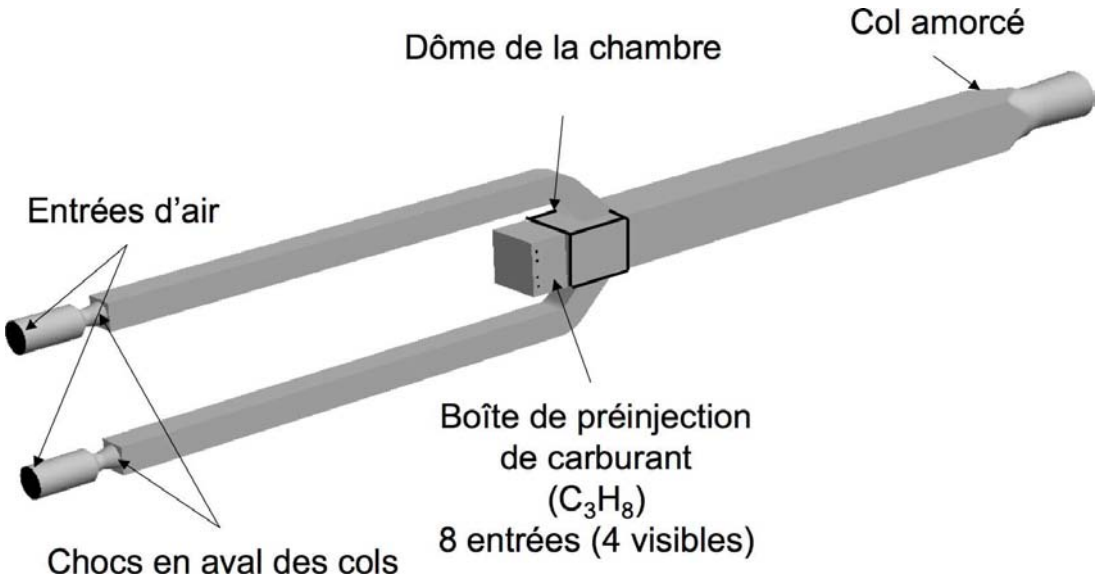


FIG. 8.5 - *Vue d’ensemble de la configuration du “Statoréacteur de Recherche”.*

Il est important de noter que la géométrie simulée diffère de l’expérience : cette dernière possède des manches qui ont une longueur inférieure de 80 mm par rapport à celle utilisée pour la SGE. Cette erreur n’a toutefois pas eu de conséquences majeures sur les résultats numériques présentés ci-après.

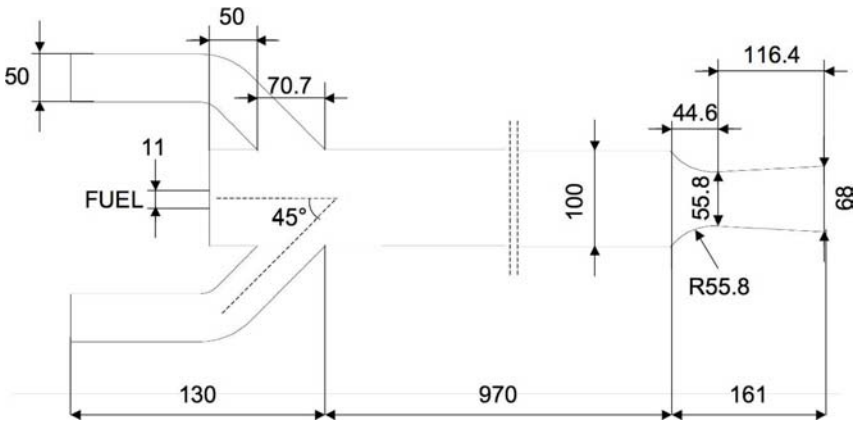


FIG. 8.6 - *Schéma de la chambre de combustion (les dimensions sont en mm).*

8.2.2 Maillage

Le maillage employé pour les différentes simulations est présenté en Fig. 8.8. Même si la configuration se prête facilement à un maillage constitué d'hexaèdres, le domaine de calcul a été maillé au moyen du logiciel *CentaurSoft* avec des tétrahèdres. La géométrie étant relativement volumineuse, la discrétisation devient vite importante sans atteindre pour autant des tailles de cellules suffisantes dans les zones d'intérêt (en proche paroi par exemple ou dans la zone de réaction).

Deux géométries différentes ont été utilisées :

1. Géométrie 1
   La première géométrie ne contient ni la boîte de pré-injection de carburant ni les diffuseurs amonts. Celle-ci est représentée par la Fig. 8.6 et a été utilisée à des fins de validation de la SGE. En effet, au début de la thèse, les capacités de calcul étaient moins importantes qu'aujourd'hui et la simulation de la chambre complète s'est avérée impossible. Le maillage correspondant est représenté en Fig. 8.7. Le maillage est alors constitué de 1,200,000 cellules pour environ 200,000 noeuds. La taille de maille caractéristique dans les zones de flamme est de l'ordre de $\Delta_x \approx 1\,mm$.
2. Géométrie 2
   Pour la géométrie complète, la grille obtenue comporte environ 910,000 noeuds pour un peu moins de 5,000,000 de cellules. Les cellules les plus petites sont localisées dans le dôme et légèrement en aval des entrées d'air dans la chambre de combustion. La taille de maille caractéristique est alors de $\Delta_x = 1\,mm$ pour un pas de temps issu des contraintes du CFL acoustique et en calcul réactif de l'ordre de $\Delta_t = 3.10^{-7}\,s$ (celui-ci n'est pas fixé dans le calcul et il ne s'agit donc que d'un ordre de grandeur). Une attention particulière a toutefois été donnée pour la discrétisation des deux cols amonts et particulièrement l'aval de ces derniers où un réseau de chocs s'installe. La taille caractéristique de cellule est également de l'ordre de $\Delta_x = 1\,mm$. La taille des cellules les plus "grossières" est de l'ordre de $\Delta_x \approx 6\,mm$.

Il est à noter que, hors des zones raffinées, même si le maillage est plus lache, les mailles sont peu étirées pour être en accord avec les contraintes numériques liées au code AVBP où la taille caractérisque de la cellules est évaluée par $V^{1/3}$ où V est le volume de cette dernière.



FIG. 8.7 - *Vue du maillage de la géométrie 1*

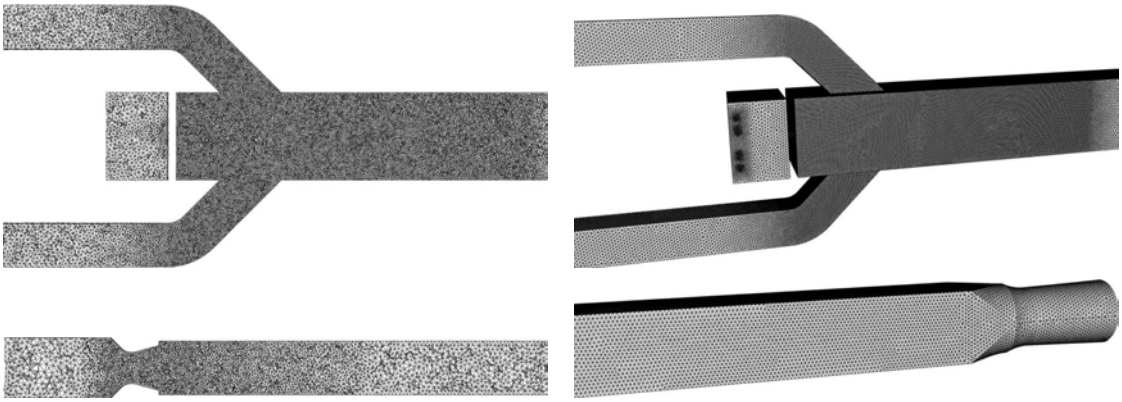


FIG. 8.8 - *Vues du maillage de la géométrie 2*

8.2.3 Conditions aux limites

La Fig. 8.5 résume les différentes conditions aux limites du calcul avec la géométrie 2 dont les principaux paramètres physiques sont rappelés en Tab. 8.2. Il y a deux entrées distinctes (respectivement deux d'air et huit de propane). Le fait d'associer entre elles les deux entrées d'air ou les huit de carburant se justifie par le fait qu'elles sont alimentées respectivement par un même tuyau en amont. L'une des spécificités du calcul est d'avoir une configuration fermée acoustiquement par des cols amorcés voir choqués. Du fait des fortes vitesses présentes dans les différents cols de la configuration, une condition aux limites avec parois glissantes adiabatique a été imposée pour limiter de trop forts gradients de vitesse (celle-ci peut atteindre plus de 1500 $m.s^{-1}$). Ailleurs, des conditions aux limites avec lois de parois adiabatiques sont utilisées.

Il est important de préciser que lors de l'expérience et en raison du confinement important de la flamme dans la chambre de combustion principale, un fort refroidissement est appliqué aux parois par la circulation d'un grand débit d'eau. Les échanges thermiques aux parois n'ont pas été étudiés dans le

présent travail même s'il semble nécessaire de les modéliser par la suite. Ils ont en effet un impact non seulement sur la flamme mais aussi sur les hautes fréquences présentes dans la chambre.

Trois gammes de richesse ($\phi = 0,35, \phi = 0,50$ et $\phi = 0,75$) sont étudiées avec en particulier un régime proche de l'extinction pauvre et un de croisière.

Nom	**Type de frontière**	**Paramètres physiques**	
Entrées d'air	Entrée (non réfléchissante)	Vitesse Débitante : Température Totale : Débit massique :	$U \approx 85\,m.s^{-1}$ $T_i = 750\,K$ $\dot{Q}_{air} = 0,9\,kg.s^{-1}$
Entrées de carburant C_3H_8	Entrée (non réfléchissante)	Vitesse Débitante : Température Statique : Débit massique :	$U \approx 100\,m.s^{-1}$ $T_s = 350\,K$ $\dot{Q}_{\phi=0,35} = 0,020\,kg.s^{-1}$ $\dot{Q}_{\phi=0,50} = 0,030\,kg.s^{-1}$ $\dot{Q}_{\phi=0,75} = 0,044\,kg.s^{-1}$
Sortie	Sortie supersonique	-	
Parois des cols	Murs glissants adiabatiques	-	
Autres parois	Loi de paroi adiabatiques	-	

TAB. 8.2 - *Conditions aux limites et paramètres physiques des trois différents régimes pour la géométrie 2.*

Pour la géométrie 1, une condition aux limites d'entrée de type débit-température-fractions massiques caractéristique est utilisée (Poinsot & Lele, 1992). Le coefficient de relaxation utilisé a été imposé de manière à limiter au maximum la réflexion d'onde en entrée. Quant au carburant, celui-ci est injecté directement en fond de chambre avec là-encore un coefficient de relaxation optimal pour la non-réflexion. Les autres conditions (aux murs) sont des lois de parois.

8.2.4 Conditions initiales et allumage de la configuration

L'allumage du foyer en mode statofusée est assuré expérimentalement par une torche H_2-O_2 et réalisé à une richesse globale variable entre 0,6 et 0,8. Dans le cadre de la simulation aux grandes échelles de l'écoulement réactif monophasique, une telle méthode d'initialisation est difficilement reproductible. A la place, une solution est générée à température et pression ambiante avec vitesse nulle et l'écoulement non-réactif est simulé (avec injection de carburant jusqu'à ce que la boîte de préinjection de carburant soit rempli à 95% de propane. Une partie des gaz présents dans le dôme est alors remplacé par des gaz brûlés afin de reproduire l'allumage par la torche H_2-0_2 appliqué dans l'expérience. Cinq temps convectifs sont alors calculés avant de prendre les moyennes.

Pour les deux autres richesses, le calcul repart d'une solution à la richesse supérieure et le débit de carburant est diminué en fonction du régime visé.

8.2.5 Paramètres de la simulation

Le Tab. 8.3 résume les paramètres numériques utilisés pour la simulation monophasique du "Statoréacteur de Recherche". Deux schémas ont été utilisés : le schéma Lax-Wendroff ainsi que TTG4A associé à l'opérateur de viscosité de Colin. Le modèle de sous-maille utilisé est celui de Smagorinsky et de Yoshizawa. L'opérateur de diffusion 2Δ a été utilisé. Un ordre de grandeur du temps de calcul nécessaire est donné en Tab. 8.4.

Paramètres	**Choix / Valeurs Géométrie 1**	**Choix / Valeurs Géométrie 2**
Schéma de convection	TTGC *cell-vertex* (CFL) : $\nu = 0.7$	TTG4A *cell-vertex* (CFL) : $\nu = 0.7$
Schéma de diffusion	Opérateur 2Δ	Opérateur 2Δ
Modèle de sous-maille	Smagorinsky $C_S = 0.18$	Smagorinsky $C_S = 0.18$
Modèle de viscosité artificielle	Modèle de Colin $\varepsilon^{(2)} = 0.07$ $\varepsilon^{(4)} = 0.01$	Modèle de Colin $\varepsilon^{(2)} = 0.4$ $\varepsilon^{(4)} = 0.05$

TAB. 8.3 - *Paramètres numériques du calcul monophasique du "Statoréacteur de Recherche".*

Nombre d'itérations	**Schéma**	**Temps physique** (*ms*)	**Proc.**	**Temps de restitution** (*h*)
20000	LW *cell-vertex*	~ 6	512	$\sim 4,3$
20000	TTG4A *cell-vertex*	~ 6	512	$\sim 6,8$

TAB. 8.4 - *Temps caractéristiques de calcul pour la géométrie 2 sur une machine IBM BlueGene (11.4 teraflops) équipée de 4096 coeurs PowerPC.*

8.2.6 Schéma de cinétique chimique

Le choix de la cinétique chimique est une étape importante pour la mise en place du calcul.

Le carburant utilisé dans l'expérience du "Statoréacteur de Recherche" est du propane gazeux dont la formule brute est C_3H_8. Représenter la combustion de façon précise de ce composé demande le transport d'un grand nombre d'espèces et la résolution de nombreuses réactions et ainsi un temps de calcul prohibitif. Une cinétique chimique simplifiée est donc utilisée. Les principaux mécanismes sont ainsi modélisés par l'équation bilan globale suivante réunissant cinq espèces (C_3H_8, O_2, CO_2, H_2O et N_2) :

$$C_3H_8 + 5\,O_2 \longrightarrow 3\,CO_2 + 4\,H_2O \tag{8.1}$$

Le taux d'avancement pour cette réaction est défini par une loi d'Arrhénius :

$$q = A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}}\right)^{n_{C_3H_8}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{O_2}} exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \tag{8.2}$$

où A est la constante préexponentielle, E_a l'énergie d'activation, $Y_{C_3H_8}$ et Y_{O_2} les fractions massiques de propane et d'oxygène de masse molaire respective $W_{C_3H_8}$ et W_{O_2}, $n_{C_3H_8}$ et n_{O_2} sont des constantes de la réaction. Ces paramètres sont définis en Tab. 8.2.6.

Constantes	Valeurs
A	$3.2916\,10^{+10}\,cm^3.mol^{-1}.s^{-1}$
$n_{C_3H_8}$	0,856
n_{O_2}	0.503
E_a	31,126 $cal.mol^{-1}$

TAB. 8.5 - *Constantes intervenant dans le calcul du taux d'avancement*

Ces paramètres ont été ajustés afin d'obtenir le meilleur accord à richesse pauvre. La Fig. 8.9 met en évidence le défaut d'une telle chimie à richesse élevée où les erreurs sont conséquentes. Pour comparaison, les vitesses de flamme et la température de fin de combustion obtenues avec le schéma cinétique complexe de Peters & Rogg (1993) sont ajoutées.

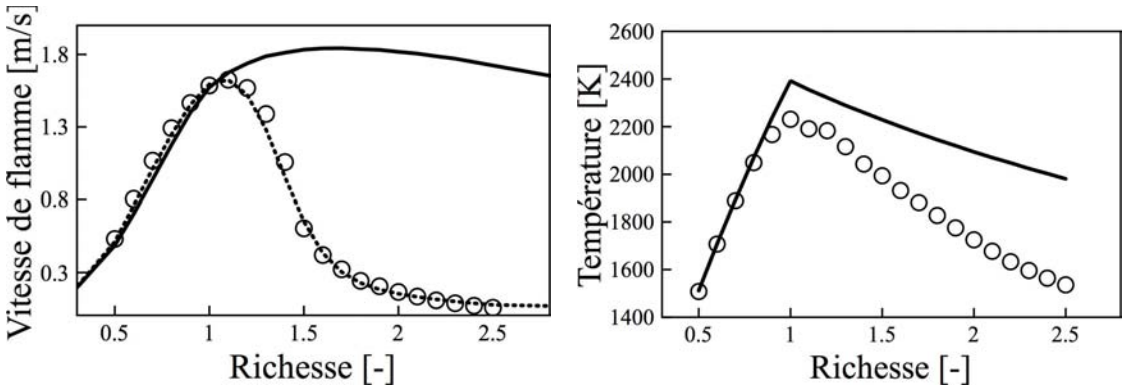


FIG. 8.9 - *Vitesse de flamme laminaire et température adiabatique de fin de combustion en fonction de la richesse. ∘ : Schéma détaillé de Peters & Rogg (1993) ; − : Schéma une étape ; - - : Schéma une étape PEA.*

Pour pallier à ce problème, la constante préexponentielle peut être modifiée (Linan & Williams, 1993). En effet, la vitesse de flamme laminaire S_l^0 est proportionnelle à la racine carrée de A (cf Eq. 4.72). Il est donc possible de modifier le comportement de S_l^0 en faisant varier A en fonction de la richesse considérée. Le taux de production devient alors :

$$q = f(\phi)\left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}}\right)^{n_{C_3H_8}}\left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{O_2}} exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \tag{8.3}$$

Avec :

$$f(\phi) = \frac{1}{2}\left(1+tanh\left(\frac{0,8-\phi}{1,5}\right)\right)+\frac{2,11}{4}\left(1+tanh\left(\frac{\phi-0,11}{0,2}\right)\right)\left(1+tanh\left(\frac{1,355-\phi}{0,24}\right)\right) \tag{8.4}$$

Cette méthode, nommée *PEA* a été utilisée avec succès (Légier *et al.* (2000)). Il est à noter cependant qu'elle nécessite d'utiliser un nombre de Schmidt identique pour les cinq espèces afin d'être à même de calculer localement une fraction de mélange. L'accord entre la cinétique simplifiée et le schéma complexe est alors très satisfaisant bien que la température de fin de combustion ne soit pas modifiée.

L'impact du schéma cinétique est étudié en Section 11.

8.2.7 Grandeurs caractéristiques de l'écoulement réactif

Avant de présenter les résultats, on définit quelques paramètres caractéristiques de la configuration :

– le temps convectif global moyen $\tau_{cv} = \frac{m_{tot}}{\dot{m}_{tot}}$ où m_{tot} et $\dot{m}_{tot}$ sont respectivement la masse totale présente dans la configuration et le débit d'air injecté en entrée. Le débit de carburant n'est pas pris en compte pour donner un temps de traversée moyen quelque soit la richesse globale injectée.

$$\tau_{cv} = \frac{m_{tot}}{\dot{m}_{tot}} = \frac{136,9 \cdot 10^{-2}}{0,9} \approx 15\,ms \tag{8.5}$$

– Le nombre de Reynolds basé sur la vitesse débitante u_{bulk} en sortie de manche à air et sa largeur L_{manche} :

$$\mathrm{Re} = \frac{u_{bulk} \times L_{manche}}{\nu} \approx 330.000 \tag{8.6}$$

Chapitre 9

Topologie de l'écoulement à froid

Cette première phase de l'étude de la phénoménologie de la combustion dans un statoréacteur est dédiée à la description succincte du champ aérodynamique non réactif au sein de la configuration et obtenu par un calcul SGE sur la géométrie complète, ceci afin de mieux appréhender les différents phénomènes qui pourront être à même de stabiliser ou au contraire de déstabiliser la flamme dans le calcul réactif. Il est également important de comprendre les phénomènes à la base du mélange dans une telle configuration à élargissement brusque. La première partie s'intéresse à la description de l'écoulement moyen tandis que dans une seconde section plus courte, les résultats instationnaires sont soulignés.

9.1 Structure de l'écoulement moyen

L'impact et l'interaction avec les parois des deux jets provenant des manches à air constituent la principale caractéristique d'une chambre à élargissement brusque à deux entrées d'air et ont été étudiés par Nosseir & Behar (1986) et Liou & Hwang (1989). La Fig. 9.1 montre un champ moyen obtenu par le calcul SGE. La moyenne[1] temporelle d'une grandeur $\phi(\vec{x}_i,t^n)$ est calculée au cours du calcul :

$$\langle\phi(\vec{x}_i,t)\rangle = \frac{1}{T_m}\sum_{n=1}^{N_T}\phi(\vec{x}_i,t^n)\Delta t_m \tag{9.1}$$

où T_m correspond à la durée simulée, N_T le nombre total d'échantillons et Δt_m la durée associée à la fréquence d'acquisition de ces échantillons. Ici $T_m \approx 0.1$s. Les grandeurs fluctuantes associées sont calculées par :

$$\phi^{RMS}(\vec{x}_i,t) = \sqrt{\langle\phi(\vec{x}_i,t)^2\rangle - \langle\phi(\vec{x}_i,t)\rangle^2} \tag{9.2}$$

L'interaction entre les jets issus des manches à air est d'abord identifiée grâce à une isosurface de vitesse axiale à 250 $m.s^{-1}$. L'enveloppe ainsi obtenue englobe les jets en provenance des manches à air avant d'être déviée latéralement vers les parois. Celle-ci est caractéristique de la cohalescence de deux jets (Nosseir & Behar, 1986). Cette figure met en avant la relation entre l'impact et la déviation des jets et

[1] il s'agit ici d'une moyenne au sens de Reynolds

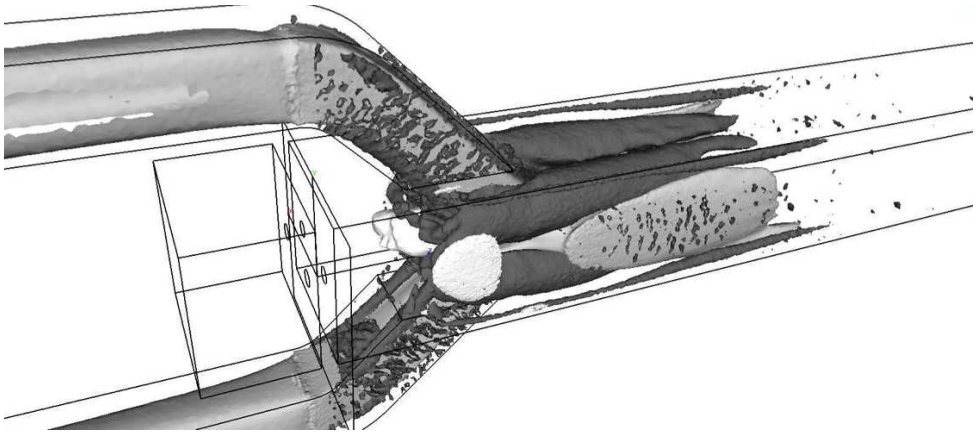


FIG. 9.1 - *Visualisation des principales structures de l'écoulement à froid : isosurfaces de vitesse axiale à 250 $m.s^{-1}$ en gris clair et à -40 $m.s^{-1}$ en blanc et isosurface de critère Q en gris foncé.*

la création de quatre structures tourbillonaires dans les coins du statoréacteur identifiées par les lignes de courant moyennes en Fig. 9.2 et Fig. 9.3. Celles-ci sont mises en évidence par une isosurface de critère Q proposé par Hussain & Jeong (1995) qui compare le tenseur des déformations S_{ij} et le tenseur des vitesses de rotation Ω_{ij}. Son expression est la suivante :

$$Q = \frac{1}{2}\left(\Omega_{ij}\Omega_{ji} - S_{ij}S_{ji}\right) \qquad \text{avec} \begin{cases} \Omega_{ij} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \\ S_{ij} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \end{cases} \tag{9.3}$$

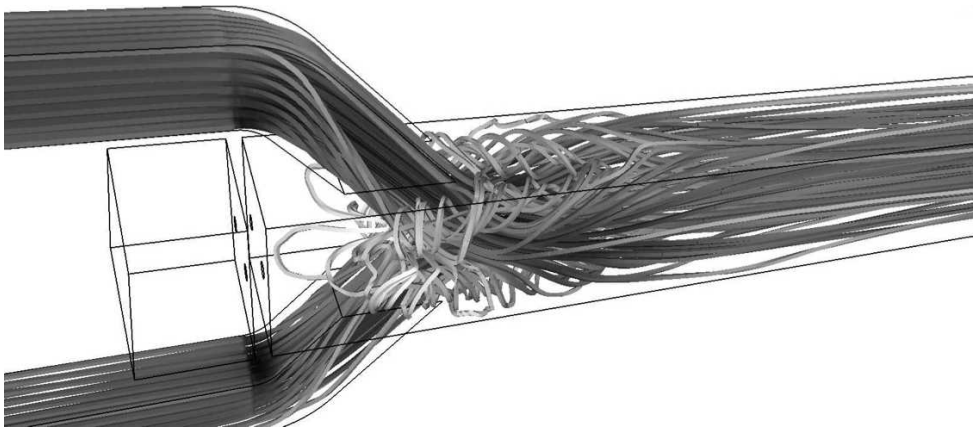


FIG. 9.2 - *Lignes de courant issues des manches à air construites avec la vitesse moyenne*

La présence des tourbillons de coins est critique en écoulement réactif car ils permettent de convecter le carburant présent dans le dôme vers l'aval. En effet, l'interaction jet-jet crée un blocage aérodynamique qui vient piéger l'air dans le dôme. Ce phénomène est mis en évidence par la principale zone de recirculation illustrée par l'isosurface de vitesse négative à -40 $m.s^{-1}$ et située dans le dôme. Des zones secondaires se situent de part et d'autre des jets d'air dans la chambre principale près des murs inférieurs

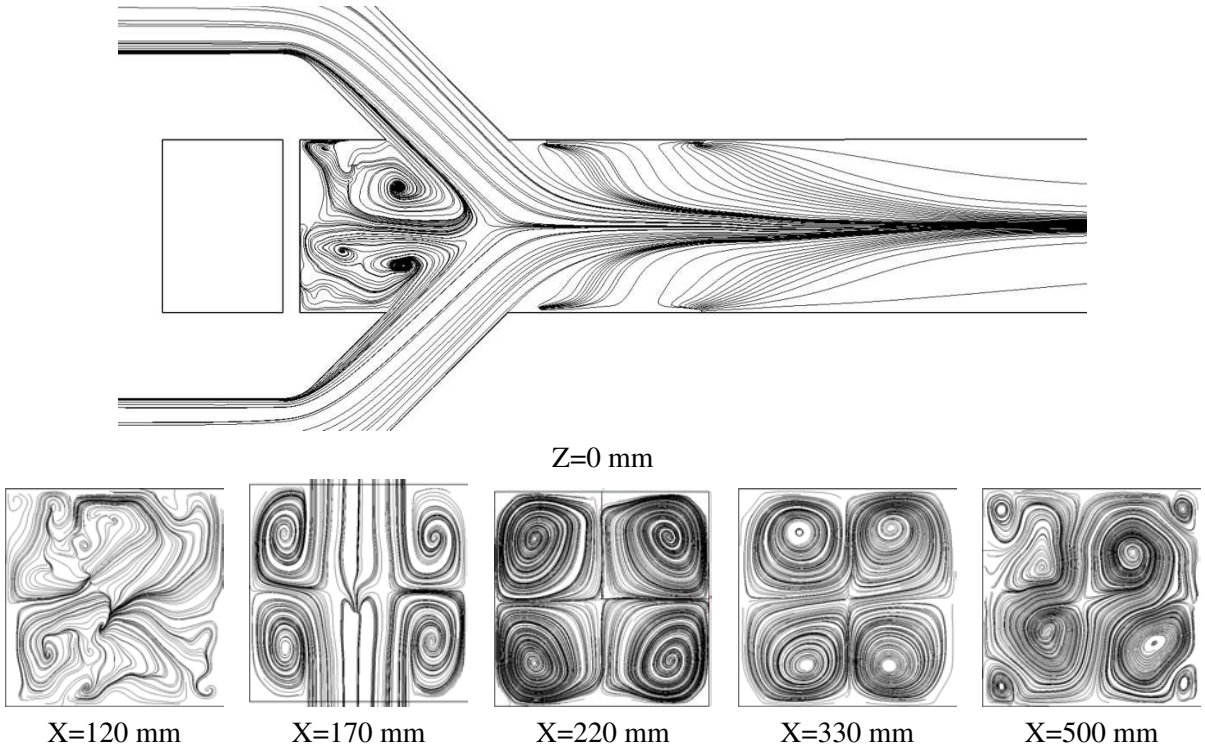


FIG. 9.3 - *Lignes de courant construites avec la vitesse moyenne projetée sur différents plans de la configuration*

et supérieurs (cf Fig. 9.3). Ces caractéristiques sont liées directement à la géométrie et à l'élargissement brusque. En effet, l'inclinaison des manches à air à 45 degré provoque un décollement dans les deux coudes des entrées d'air. Derrière ces points de décollement, des zones de recirculation diminuent la section de passage dans les manches à air ce qui augmente la vitesse de passage. La soudaine ouverture vue par les deux jets explique les zones de recirculation inférieure et supérieure. L'effet de ce décollement n'est pas négligeable car il permet d'alimenter le dôme en gaz frais comme montré par la Fig. 9.3.

La dynamique moyenne de l'écoulement dans le plan médian $Z = 0$ m (cf Fig. 9.4) est montré Fig. 9.5. Le décollement dans les manches à air est bien visible. La zone d'impact, intense, des deux jets est ainsi décalée vers l'aval et un battement des jets est observé grâce aux composantes fluctuantes de vitesse. Les effets tridimensionnels sont particulièrement visibles en Fig. 9.5 c) sur la composante de vitesse verticale au droit des manches à air où les interactions des tourbillons de coin sont visibles.

La Fig. 9.6 représente l'évolution de la vitesse axiale moyenne et fluctuante adimensionalisée par la vitesse débitante dans les manches le long de l'axe de symétrie. L'évolution de la vitesse axiale moyenne est comparée aux données obtenues par Brossard *et al.* (2002) pour les mêmes conditions de fonctionnement avec un ensemencement de particules d'oxyde de magnésium MgO. La position du point de stagnation est bien captée par la simulation. Les principaux phénomènes apparaissant dans la chambre sont représentés : l'impact des jets et la recirculation dans le dôme. On notera que bien que les effets aérodynamiques sont principalement dus à l'interaction jet/jet, l'injection de carburant dans le dôme modifie la taille de la zone de recirculation. L'accord avec l'expérience est très bon en particulier au niveau de l'impact des jets où la survitesse est bien représentée. Les écarts détectés dans la zone de recirculation peuvent peut-être s'expliquer par le faible temps de convergence (le calcul non-réactif n'étant ici qu'une

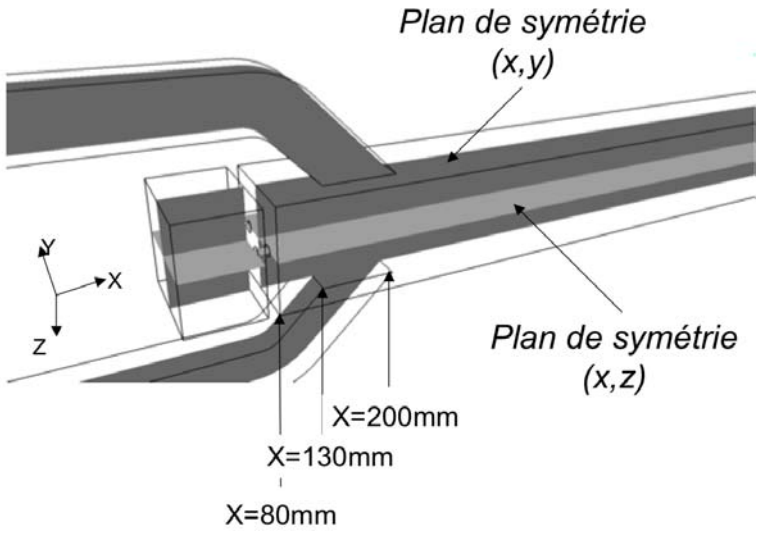
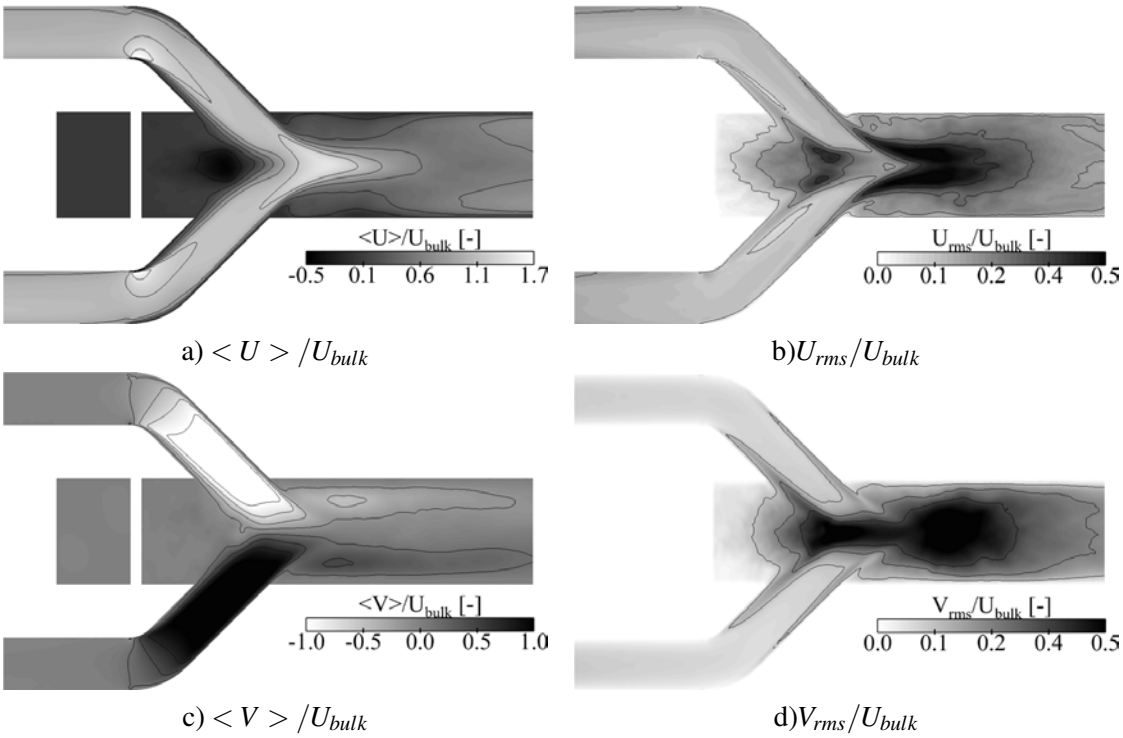


FIG. 9.4 - *Plans de symétrie du "Statoréacteur de Recherche" et principales coordonnées axiales de la chambre*



a) $< U > /U_{bulk}$ b)U_{rms}/U_{bulk}

c) $< V > /U_{bulk}$ d)V_{rms}/U_{bulk}

FIG. 9.5 - *Champs moyens et fluctuants de vitesse adimensionnés par la vitesse débitante U_{bulk} dans les manches.*

phase de calcul pour la simulation réactive) ainsi que par l'injection de carburant en fond de dôme.

Les Fig. 9.7 et 9.8 montrent différents profils de vitesses axiales moyenne et fluctuante dans le plan de symmétrie $Y = 0$ m du statofusée. Cinq abscisses sont retenues : deux dans le plan contenant les entrées d'air ($X = 147$ et $X = 171$ mm) et trois en aval ($X = 217, 250$ et 336 mm). Les tendances sont assez bien

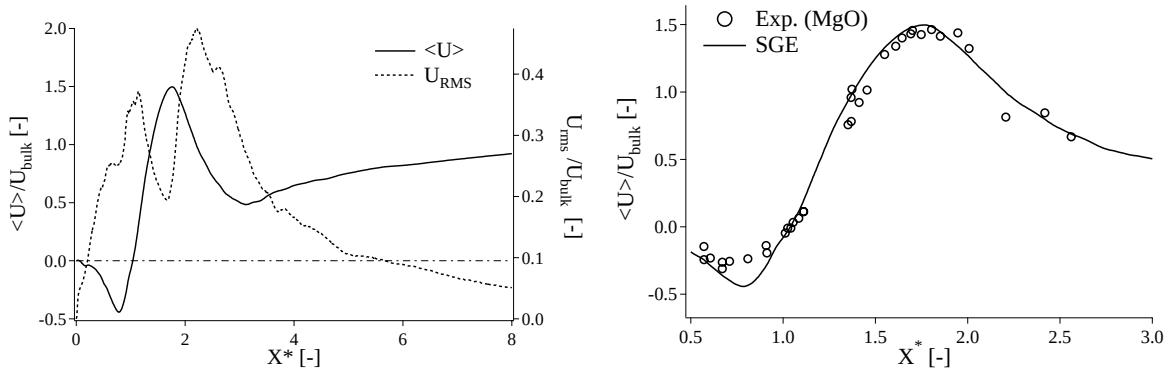


FIG. 9.6 - *Evolution de la vitesse axiale moyenne et fluctuante le long de l'axe de symétrie à gauche et comparaison avec l'expérience pour la vitesse axiale moyenne à droite (Brossard et al., 2002). Les vitesses sont adimensionalisée par la valeur de la vitesse débitante dans les manches. X∗ représente la distance au dôme adimensionnalisé par la hauteur de ce dernier.*

reproduites malgré des écarts sensibles sur les niveaux en particulier pour les deux premières abscisses. On notera que le calcul diffère de l'expérience en raison de l'injection de carburant dans le dôme ce qui peut expliquer ces différences. De même, cette dernière région est le siège de phénomènes à basses fréquences et la simulation n'a pas été menée suffisamment longtemps pour y atteindre la convergence.

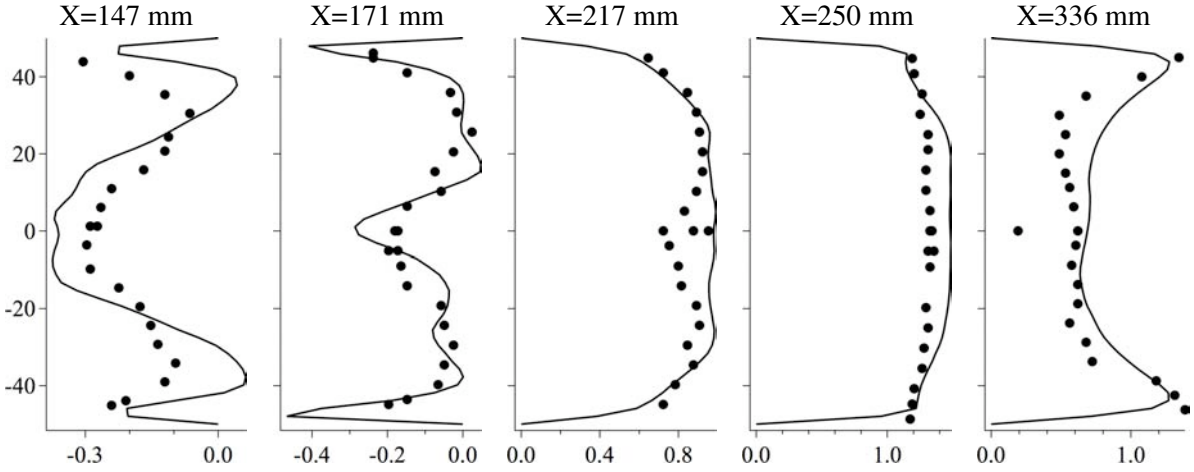


FIG. 9.7 - *Profils de vitesse axiale moyenne adimensionalisée par la vitesse débitante dans les manches [-] en fonction de Z [mm] dans le plan $Y = 0$ m. • : Exp., − : SGE*

Différentes corrélations (Liou & Hwang, 1989; Ahn & Yoon, 2006) existent pour évaluer la position du point d'impact des jets. La plus simple est représentée Fig. 9.9 et consiste à prolonger les manches à air jusqu'à leur intersection le long du plan médian. Le point d'intersection est alors défini par $L/H = 0.5/tan(\theta)$. Cette approche ne prend pas en compte un éventuel décollement (effectivement détecté en Fig. 8.8). Liou & Hwang (1989) ont effectués des études paramétriques en fonction de l'angle des manches à air ainsi que de la taille du dôme et ont obtenu l'expression $L/H = 0.5/tan(\theta) + 0.1 = 0.6$ en bon accord avec la valeur de 0.54 obtenue par l'expérience et le calcul présenté ici.

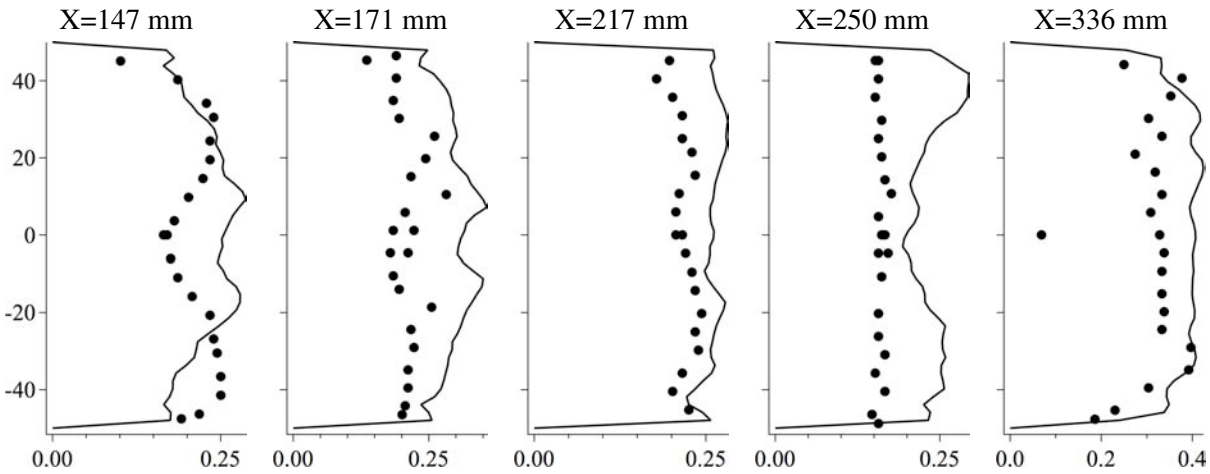


FIG. 9.8 - *Profils de vitesse axiale fluctuante adimensionalisée par la vitesse débitante dans les manches [-] en fonction de Z [mm] dans le plan Y = 0 m. • : Exp., − : SGE*

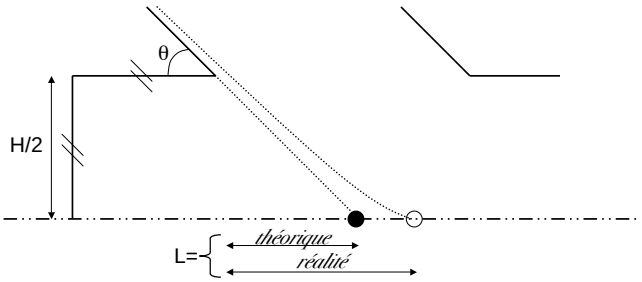


FIG. 9.9 - *Schéma représentant le point d'impact théorique et réel des jets impactants.*

9.2 Structure de l'écoulement instantanné

L'écoulement non réactif instationnaire est dominé par l'interaction jet-jet et l'oscillation de la nappe ainsi créée. Les jets coaslescents sont successivement déviés vers les parties inférieures et supérieures comme montré par la Fig. 9.10.

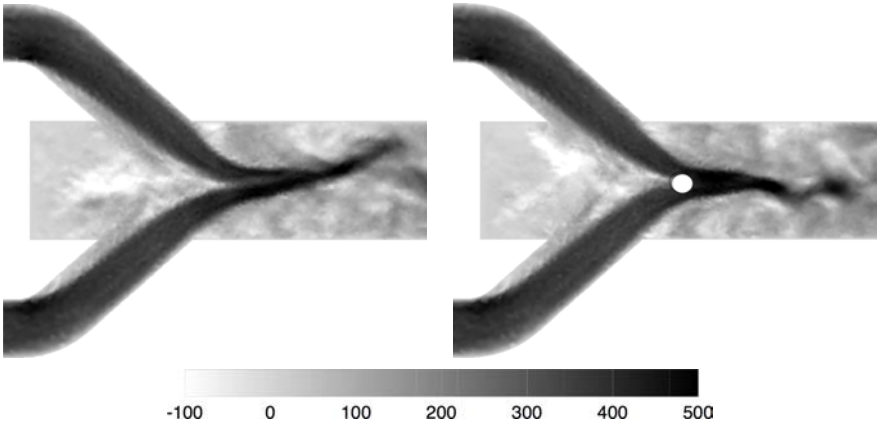


FIG. 9.10 - *Deux champs instantanés de vitesse axiale en $m.s^{-1}$ dans le plan $Y = 0$ illustrant le battement des jets. A droite : position de la sonde de pression.*

La caractérisation exacte de ce mode est rendu difficile car la vitesse associée à ce phénomène (de l'ordre de 500 $m.s^{-1}$) est proche de la vitesse du son. Ainsi, discriminer un phénomène de nature hydrodynamique ou acoustique n'est pas facile. Ce point dur sera absent pour les différents calculs réactifs qui présentent un nombre de Mach beaucoup plus faible ($M \approx 0,3$).

Chapitre 10

Calculs réactifs de la géométrie simplifiée

Cette section se présente sous la forme d'un article publié dans le journal *Combustion and Flame* en Janvier 2008 dans le volume 152, pages 154 à 175. La simulation monophasique réactive de la configuration simplifiée du statofusée est ici étudiée. Dans le cadre de la thèse, cette étude a pour objectif de tester le code AVBP dans sa version initiale sur un cas simple où les difficultés géométriques de la configuration ont été retirées, *i.e.* les diffuseurs d'entrée. Ainsi, le but recherché est d'évaluer le code tant en terme de prévisibilité de l'écoulement aérodynamique au sein de la chambre qu'en terme d'instationnarité, en particulier, est-il possible de prédire les différents modes identifiés dans l'expérience.

Après avoir comparé les résultats SGE aux valeurs expérimentales décrites par Ristori *et al.* (2005) pour le cas à richesse 0,50, les résultats instationnaires pour la richesse 0,75 sont décrits. La présence de modes à hautes fréquences est identifiée. La résolution spectrale dans l'expérience n'étant pas suffisantes pour statuer sur la réalité physique ou non de ces modes, les trois diagnostics présentés en Sec. 7 sont conjointement utilisés afin de décrire leur structure ainsi que leurs interactions.

Large eddy simulation of mean and oscillating flow in a side-dump ramjet combustor

A. Roux[a], L.Y.M. Gicquel[a,*], Y. Sommerer[1], T.J. Poinsot[b]

[a] *CERFACS, 42 Av. G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France*

[b] *IMFT, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France*

Abstract

Ramjet flows are very sensitive to combustion instabilities that are difficult to predict using numerical simulations. This paper describes compressible Large Eddy Simulation on unstructured grids used to investigate non-reacting and reacting flows in a simplified twin-inlet ramjet combustor. The reacting mean flow is compared to experimental results published by ONERA in terms of mean fields. Simulations show a specific flow topology controlled by the impingement of the two air jets issuing from the twin air inlets and by multiple complex recirculation zones. In a second part, all unsteady modes appearing in the reacting LES are analyzed using spectral maps and POD (Proper Orthogonal Decomposition) tools. A Helmholtz solver also computes the frequencies and structures of all acoustic modes in the ramjet. Pure longitudinal, transverse and combined modes are identified by all three diagnostics. In addition, a mode-by-mode analysis of the Rayleigh criterion is presented thanks to POD. This method shows that the most intense structure (at 3750 Hz) is the first transverse acoustic mode of the combustor chamber and the Rayleigh criterion obtained with POD illustrates how this transverse mode couples with unsteady combustion.

Key words: Large Eddy Simulation, Combustion, Acoustic, Ramjet, Proper Orthogonal Decomposition

1. Introduction

Combustion instabilities are common in ramjet engines [1, 2, 3]: they can lead to vehicle damage and still remain a difficult problem to predict or even solve at the design stage. Recent progresses in Computational Fluid Dynamics (CFD), such as reacting Large Eddy Simulations (LES) [4, 5, 6, 7], and the continuously increasing computer power offered by the newly developed parallel computer architectures (www.top500.org), allow to investigate flame dynamics. The hope of this new design path is to diminish development costs through important reductions of the number of flight tests.

*Corresponding author. Tel: +33-5-61-19-30-46; fax: +33-5-61-19-30-00.
Email addresses: lgicquel@cerfacs.fr (T.J. Poinsot)

Side-dump combustor ramjet technology is currently investigated as an alternative to coaxial-dump combustor devices. Among all the undesired effects, combustion instability is of the foremost importance. In ramjets, a common oscillatory mode is linked to the longitudinal acoustic modes of the combustion chamber. This natural acoustic state of the system strongly depends on the burner length as well as the operating point of the engine. Such low frequency instabilities are found both in side-dump [1, 2, 8, 9] and coaxial-dump [10, 11, 12, 13] ramjet combustors. Oscillatory phenomena linked to the jet-on-jet impingement region are also common for non-reacting configurations [14]. However self-sustained instabilities due to jet flapping are usually not observed in the propulsive mode. In the case of side-dump combustors, higher instability frequencies can occur. These high-frequency oscillations are usually due to screech mechanisms [3, 15] and depend on fuel injection characteristics.

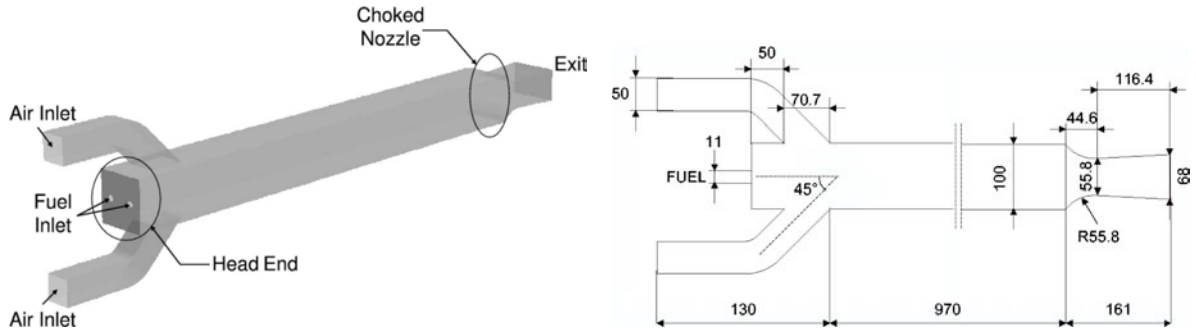
The aim of this study is to demonstrate the ability of LES to study and predict combustion instabilities for highly compressible reacting flows as found in ramjet engines. Current state-of-the-art LES has indeed proved its potential in many configurations [16, 17, 18, 19, 20], but its applicability to highly compressible flows with chemical reactions remains to be demonstrated. In practice, such flows induce large density gradients which are difficult to handle with low-dissipation numerical schemes as commonly used in LES [5, 21]. The present study shows an example of LES with combustion, high Mach numbers and acoustics in a ramjet geometry. The configuration corresponds to the experimental ONERA ramjet combustor for which comprehensive measurements are reported in [22]. The main characteristics of the mean flow topology are first identified. The validation of the fully reacting case is then obtained by comparisons between experimental data and LES results. Combustion instabilities are studied using LES, which reveals self-excited modes for an equivalence ratio of $\phi = 0.75$. A lower value of the equivalence ratio ($\phi = 0.5$) yields similar LES predictions with a self-sustained oscillation but with lower amplitude. Multiple modes are observed involving both longitudinal and transverse activity. The fully unsteady flow fields obtained by LES are analyzed to investigate the coupling mechanisms by which self-sustained oscillations appear. To do so, diagnostics such as Proper Orthogonal Decomposition (POD) [23, 24, 25, 26, 27], Spectral Maps (SM) [6, 28], Fast Fourier Transforms (FFT) and a Helmholtz Solver (HS) dedicated to the prediction of acoustic eigenmodes are used to analyse unsteady LES results. POD is especially useful to investigate pressure/combustion coupling on a mode-by-mode basis to identify the most active ones.

The document is organized as follows. The ramjet configuration is presented in section 2 and the LES solver in section 3. Section 4 presents the operating points simulated by LES and for which experimental data is available. The methodology for meshing, initialization and boundary conditions is also described. Section 5 discusses the LES results for the various cases. Validation (sub-section 5.2) is obtained through comparisons with measurements of the mean velocity fields for the hot flow configuration. A description and an identification of the main flow structures are also presented for the non-reacting flow. A brief synopsis (sub-section 6) presents the methodolgy and theories used for the analysis of the self-oscillatory LES before discussing the various modes appearing during

the self-sustained oscillating regimes (sub-section 6.4).

2. Experimental facility

The configuration is a two-inlet side-dump ramjet combustor burning gaseous propane with air. The main combustion chamber of $100 \times 100\ mm^2$ rectangular cross section is fed by two $50 \times 50\ mm^2$ lateral rectangular cross section air inlets. Propane is injected into the head-end (also called dome) of the combustor by two 11 *mm* diameter fuel inlet circular holes. The combustion chamber is 1261 *mm* in length and the exhaust nozzle, which has a minimum section of $55.8 \times 100\ mm^2$, is choked. Figure 1 is a schematic representation of the ramjet. This academic ramjet geometry is studied by ONERA [22, 29, 30, 31, 32] and experimental data are available both for non-reacting and reacting flows. A first set of experiments allows to characterize the cold flow at atmospheric pressure and investigates the flow pattern, the mixing and the influence of the equivalence ratio on the fuel jet penetration. Particle Doppler Anemometer (PDA) and Laser Doppler Velocimetry (LDV) measurements provide experimental data for mean and fluctuating velocities as well as estimates of the turbulence intensity. The reacting case is studied using Particle Laser Induced Fluorescence (PLIF) imaging techniques (*OH* or *CH* emissions) and high speed cameras (Fig. 2) to characterize the flame structure. The reported highest frequency resolved is $2000\,Hz$ for the experimental apparatus.



(a) (b)

Figure 1: Schematic of the experimental ramjet along with its dimensions: (a) computational domain, (b) from [32].

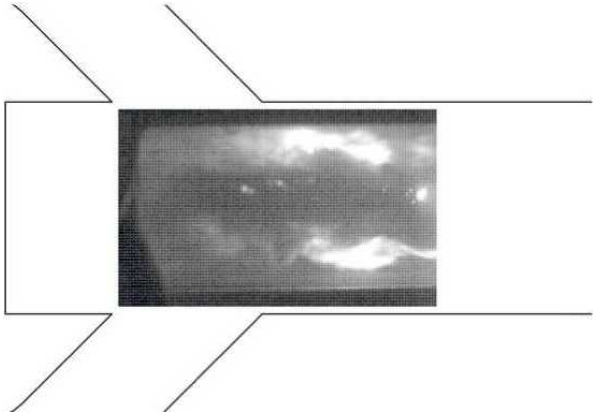


Figure 2: Instantaneous view of the flame by Ristori [22].

3. Numerical approach

3.1. Governing equations and LES models

LES for reacting flows involves the spatial Favre filtering operation that reduces for spatially, temporally invariant and localised filter functions [33, 34] to:

$$\widetilde{f(\mathbf{x},t)} = \frac{1}{\overline{\rho(\mathbf{x},t)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{x}',t)\, f(\mathbf{x}',t)\, G(\mathbf{x}'-\mathbf{x})\, d\mathbf{x}', \tag{1}$$

where G denotes the filter function.

In the mathematical description of compressible turbulent flows with chemical reactions and species transport, the primary variables are the species volumic mass fractions $\rho_\alpha(\mathbf{x},t)$, the velocity vector $u_i(\mathbf{x},t)$, the total energy $E(\mathbf{x},t) \equiv e_s + 1/2\, u_i u_i$ and the density $\rho(\mathbf{x},t) = \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha(\mathbf{x},t)$.

The multispecies fluid follows the ideal gas law, $p = \rho\, r\, T$ and $e_s = \int_0^T C_p\, dT - p/\rho$, where e_s is the mixture sensible energy, T the temperature, C_p the fluid heat capacity at constant pressure and r is the mixture gas constant. The LES solver takes into account changes of heat capacity with temperature and composition using tabulated values of individual species heat capacities. The viscous stress tensor, the heat diffusion vector and the species molecular transport use classical gradient approaches. The fluid viscosity follows Sutherland's law, the heat diffusion coefficient follows Fourier's law, and the species diffusion coefficients are obtained using a species Schmidt number along with the Hirschfelder and Curtiss approximation [4] and velocity corrections for mass conservation. The application of the filtering operation to the instantaneous set of compressible Navier-Stokes transport equations with chemical reactions yields the LES transport equations [4] which contain so-called Sub-Grid Scale (SGS) quantities that need modelling [6, 35]. The unresolved SGS stress tensor $\overline{\tau_{ij}}^t$, is modelled using the Boussinesq

assumption [36, 37, 38]:

$$\overline{\tau_{ij}}^t - \frac{1}{3}\overline{\tau_{kk}}^t\,\delta_{ij} = -2\,\overline{\rho}\,\nu_t\,\widetilde{S}_{ij},\ \text{with,}\ \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\frac{\partial\widetilde{u}_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij}. \tag{2}$$

In Eq. (2), $\widetilde{S}_{ij}$ is the resolved strain rate tensor and ν_t is the SGS turbulent viscosity. The Wall Adapting Linear Eddy (WALE) model [39] is chosen to model the SGS viscosity:

$$\nu_t = (C_w\Delta)^2\frac{(s^d_{ij}s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s^d_{ij}s^d_{ij})^{5/4}},\ \text{with,}\ s^d_{ij} = \frac{1}{2}\left(\widetilde{g_{ij}}^2 + \widetilde{g_{ji}}^2\right) + \frac{1}{3}\widetilde{g_{kk}}^2\delta_{ij} \tag{3}$$

In Eq. (3), Δ denotes the filter characteristic length (approximated by the cubic-root of the cell volume), C_w is a model constant equal to 0.49 and $\widetilde{g_{ij}}$ is the resolved velocity gradient.

The SGS species flux $\overline{J^\alpha_i}^t$ and the SGS energy flux $\overline{q_i}^t$ are respectively modelled by use of the species SGS turbulent diffusivity $D^\alpha_t = \nu_t/Sc^\alpha_t$, where Sc^α_t is the turbulent Schmidt number ($Sc^\alpha_t = 0.7$ for all α). The eddy diffusivity is also obtained from ν_t by $\lambda_t = \overline{\rho}\,\nu_t\,C_p/Pr_t$ where Pr_t is a constant turbulent Prandtl number:

$$\overline{J^\alpha_i}^t = -\overline{\rho}\left(D^\alpha_t\frac{W_\alpha}{W}\frac{\partial\widetilde{X}_\alpha}{\partial x_i} - \widetilde{Y}_\alpha V^c_i\right),\ \text{with,}\ \overline{q_i}^t = -\lambda_t\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{N}\overline{J^\alpha_i}^t\,\widetilde{h}^\alpha_s. \tag{4}$$

In Eq. (4), the mixture molecular weight W and the species molecular weight W_α can be combined with the species mass fraction to yield the expression for the molar fraction of species α: $X_\alpha = Y_\alpha W/W_\alpha$. V^c_i is the diffusion correction velocity resulting from the Hirschfelder and Curtiss approximation [4] and $\widetilde{T}$ is the Favre filtered temperature which satisfies the modified filtered state equation $\overline{p} = \overline{\rho}\,r\,\widetilde{T}$ [40, 41, 42, 43]. Finally, $\widetilde{h}^\alpha_s$ stands for the enthalpy of species α. Although the performances of the closures could be improved through the use of a dynamic formulation [40, 44, 45, 46, 47] they are considered sufficient to address the present flow configuration.

LES of turbulent reacting flows imply the modelling of SGS combustion terms. The model employed here is the Dynamic Thickened Flame (DTF) model [48]. Following the theory of laminar premixed flames [49], the flame speed S^0_L and the flame thickness δ^0_L may be expressed as:

$$S^0_L \propto \sqrt{\lambda A}\quad\text{, and,}\quad \delta^0_L \propto \frac{\lambda}{S^0_L} = \sqrt{\frac{\lambda}{A}}, \tag{5}$$

where λ is the thermal diffusivity and A the pre-exponential constant. Increasing the thermal diffusivity by a factor F, the flame speed is kept unchanged if the pre-exponential factor is decreased by the same factor [50]. This operation leads to a flame thickness which is multiplied by F and easily resolved on a coarser mesh. Additional information needs however to be supplied so as to properly reproduce the effect of the subgrid-scale interaction between turbulence and chemistry [51, 52, 53]. This is the intent of the so-called efficiency function, E [54]. When thickening is applied everywhere in the flow, the model is limited to fully premixed combustion. To compute

partially premixed or non-premixed flames [4], a modified version of the Thickened Flame model (DTF) is used here [53, 55, 56].

With the DTF model, the SGS fluxes are modified to become:

$$\overline{J_i^{\alpha}}^t = -(1-S)\,\overline{\rho} D_t^{\alpha} \frac{W_{\alpha}}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_{\alpha}}{\partial x_i} + \overline{\rho}\,\widetilde{Y}_{\alpha} V_i^c, \text{ with, } \overline{q_i}^t = -(1-S)\,\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{N} \overline{J_i^{\alpha}}^t \widetilde{h}_s^{\alpha}, \tag{6}$$

where S is a sensor detecting reaction zones. The local thickening factor depends on the local mesh size: typically thickening must ensure that enough points are present within the flame zone and the thickening factor F is given by:

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\,S, \text{ and, } F_{max} = \frac{N_c}{\Delta_x}\delta_L^0, \tag{7}$$

where N_c is the number of points used to resolve the flame front ($N_c = 5$ to 10).

Although this approach is still being developed and further validations are needed, its ease of implementation and it success in prior applications [55, 56, 57] suggest its suitability for the problem addressed in this work.

3.2. Chemistry model

The air-propane chemical scheme takes into account five species (C_3H_8, O_2, CO_2, H_2O and N_2) through one irreversible reaction:

$$C_3H_8 + 5\,O_2 \longrightarrow 3\,CO_2 + 4\,H_2 \tag{8}$$

The rate of heat release for this reaction reads [55]:

$$q = A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}}\right)^{0.856} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.503} exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \tag{9}$$

with a pre-exponential factor $A = 3.2916\,10^{+10}\,cm^3/mol/s$ and an activation energy, $E_a = 31126\,cal/mol$. The premixed flame velocity and thickness for this one-step mechanism at stoichiometry are $\delta_L^0 = 0.25\,mm$ and $S_L^0 = 0.45\,m/s$ respectively which results in a characteristic chemical frequency of $1800\,Hz$. The evolution of laminar flame speed versus the equivalence ratio is given in Fig. 3. For comparison, the values obtained from the detailed mechanism of [58] are added. The one-step scheme over-estimates flame speeds for large values of the equivalence ratio (Fig. 3). However Fig. 4 shows the distribution of points burning in a premixed or a diffusive regime using the Takeno index [59] and for the configuration under study. Most points belong to diffusive flames, thus burning at an equivalence ratio equal to unity, where the one-step scheme performs well.

3.3. Numerical schemes

The parallel LES code [21, 55, 60, 61, 62] solves the full compressible Navier-Stokes equations using a cell-vertex finite-volume approximation. The numerical integration uses Lax-Wendroff type or Taylor-Galerkin

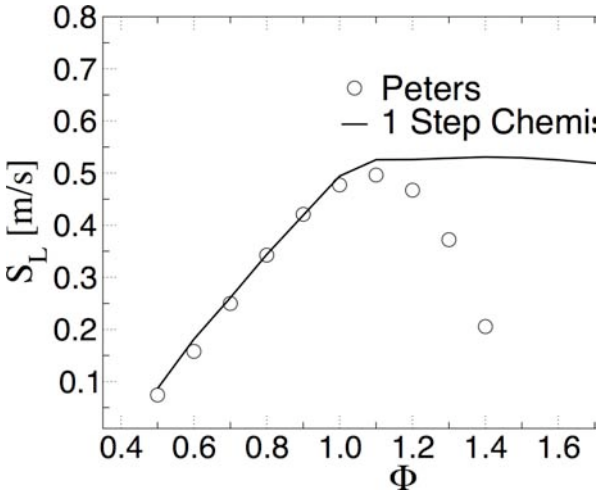


Figure 3: Laminar flame speed versus equivalence ratio: comparison between the 1-step scheme used for the simulation and the detailed scheme described by Peters [58].

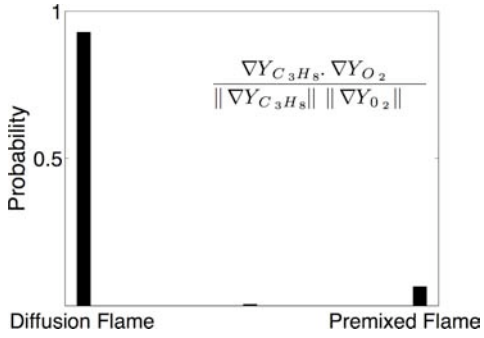


Figure 4: Regime of combustion using Takeno Index [59].

weighted residual central distribution schemes. The Taylor-Galerkin scheme, which provides third-order accuracy on hybrid meshes, is particularly adequate for low-dissipation requirements of LES applications [54]. 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 resulting time-step is of the order of $0.5\,10^{-6}\,s$. Since the ramjet flow contains a choked nozzle, the outlet flow is supersonic and no shock capturing method is needed. However particular attention is paid to the mesh refinement in this high gradient zone.

4. Flow Parameters

LES are compared to experiments performed by Ristori [29], simulating the flight conditions of a real ramjet from low to high altitudes. Inlet temperature and mass flow rate change from $520\,K$, $2.9\,kg/s$ to $750\,K$, $0.9\,kg/s$.

A range of equivalence ratio ϕ going from 0.5 to 1.0 is investigated. The present work focuses on two regimes (at $\phi = 0.5$ and 0.75) to validate the LES computations.

4.1. Operating points

The computed cases correspond to a high-altitude flight condition (Table 1). For the reacting LES, two equivalence ratios are investigated numerically: inlet air mass flow rate of $0.9\,kg/s$; inlet air temperature of $750\,K$; chamber pressure $P = 278,000\,Pa$ and equivalence ratios of $\phi = 0.5$ & $\phi = 0.75$. The associated Reynolds number based on the inlet duct height is $Re = 3.3\,10^5$.

Table 1: Test conditions simulated by LES.

Case	Type	Inlet Temperatures	Equivalence ratio
A	Cold	Air: 750 K	*NA*
B	Reacting	Air: 750 K and Fuel: 350 K	0.5
C	Reacting	Air: 750 K and Fuel: 350 K	0.75

4.2. Mesh, boundary conditions and initialization strategies

The mesh used for the numerical simulations contains 1.2 million tetrahedra (Fig. 5) with local refinement to ensure grid resolution in accordance with the requirements for true LES [6, 63].

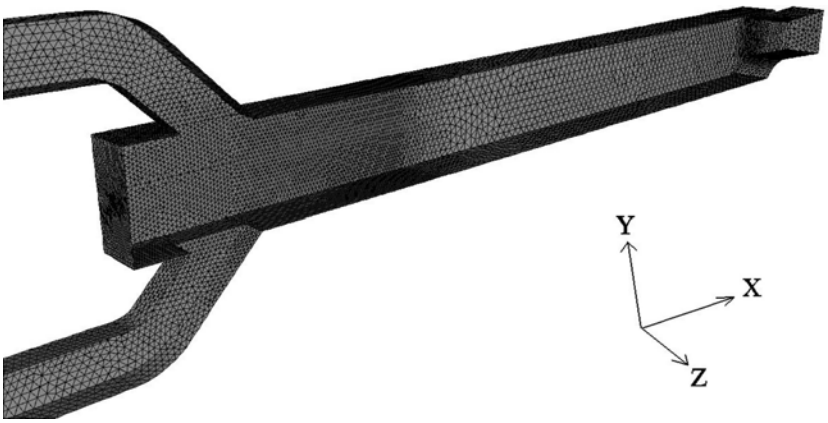


Figure 5: 3D view of the mesh.

Table 2: Set of LES boundary conditions.

Name	Boundary Type	Imposed quantities
Air Inlet	Non reflecting inlet	$\dot{Q} = 0.9\,kg/s \quad T = 750\,K$
Fuel Inlet	Non reflecting inlet	$\dot{Q} = 0.029$ or $0.0435\,kg/s$ $T = 350\,K$
Outlet	Supersonic	-
Nozzle's walls	Slip Adiabatic wall	-
Other walls	No-slip Adiabatic wall	-

For combustion instability studies, the specification of the boundary conditions is a critical issue. The nozzle walls are handled as slip walls. All other walls correspond to no-slip adiabatic surfaces and typical y^+ values for the first grid points are of the order of 50. At the inlets, the Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC) [21, 61, 64] are used to ensure a physical representation of the acoustic wave propagation. The outlet nozzle is included in the LES domain which extends 122 *mm* downstream of the choked section. This avoids all uncertainties on the acoustic behaviour of the outlet boundary which is supersonic and thus well posed mathematically and numerically. This is not the case for the air inlet boundary conditions which must be non-reflective to prevent artificial forcing of the acoustic field within the domain of computation. Table 2 summarizes the boundary conditions used for both reactive and non-reactive cases and where $\dot{Q}$ stands for the mean mass flow rate.

For the present computation, the acoustic CFL numbers are of the order of 0.7 which yields a physical time step close to 0.4 μs for the reacting cases. This small time step combined with the accuracy of the third order spatial scheme [21] ensures that acoustic/combustion coupling is correctly captured. Finally, the initialization procedure follows the one proposed in [65].

5. Results and discussion

LES is applied for the three different cases of Table 1 which includes one non-reactive and two reactive simulations at an equivalence ratio of 0.5 and 0.75 respectively. The LES results are first studied to extract flow patterns including the position of the recirculation zone created by the impinging jets and the flame location. Following this qualitative description of the numerical results, a validation of the procedure employed in LES is obtained through

direct comparisons with experimental measures. Finally, the fully unsteady set of numerical results is quantitatively investigated by use of advanced diagnostics to further the analysis of the combustor. Indeed, reacting LES predictions as illustrated below depict strongly periodic behaviors for Case C. Advanced temporal and spatial diagnostics are in this specific case applied to evidence potential mechanisms at the source of this self-sustained oscillation.

Table 3: Modal description as obtained from the Spectral Map (SM) analysis of LES, the Helmholtz Solver and the POD decomposition.

Mode	Frequency	Composition	Figures		
			SM	HS	POD
1	$400\,Hz$	$1L_x$	17 (b)	17 (a)	-
2	$3560\,Hz$	$1L_y$	18 (a)	19 (a)	21 (a)
3	$3750\,Hz$	$1L_z$	18 (b)	19 (b)	21 (b)
4	$7560\,Hz$	$1L_y, 1L_z$	18 (c)	19 (c)	21 (c)
5	$11300\,Hz$	$1L_z$	18 (d)	19 (d)	21 (d)

5.1. Flow topology

A brief description of the flow patterns revealed by LES is presented in this section for both the non-reacting and the reacting cases.

5.1.1. Cold flow

Figure 6 shows an averaged field and instantaneous snapshots obtained by LES of Case A, Table 1: the jet-on-jet interaction is first evidenced, followed by the recirculation regions, the detachment and the re-attachment points, to finish with the four corner vortices linking the head-end to the aft part of the chamber.

The jet-on-jet impingement is visualized using a $300\,m/s$ iso-surface (in black) of the axial component of the velocity vector, Fig. 6. The obtained envelope encompasses the two high-velocity streams coming from the air inlet ducts which impact each other within the chamber before reaching the two side walls of the ramjet. This iso-surface is characteristic of crushing jets coalescing into a jet sheet. In this specific case, the generated high velocity sheet impacts the vertical walls of the combustion chamber. The main recirculation zone is localised near

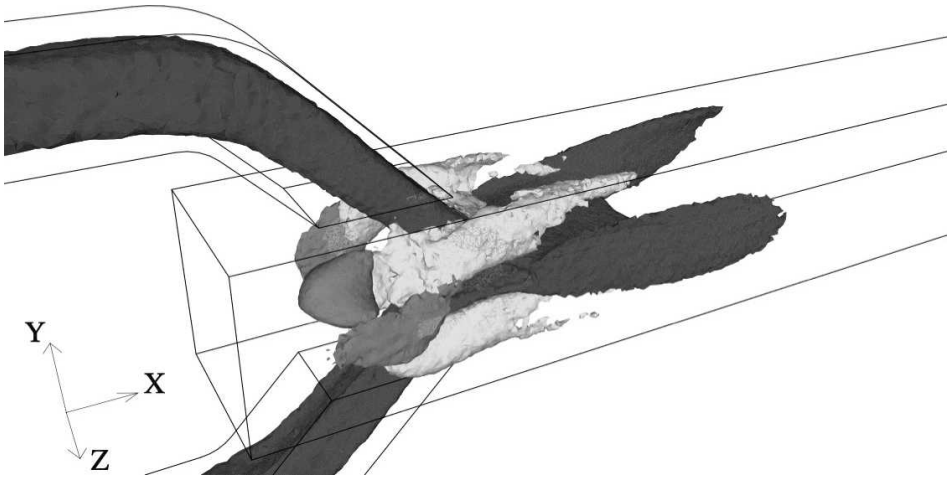


Figure 6: Visualisation of flow structures: isosurfaces of axial velocity (black, $300\,m/s$; gray, $-50\,m/s$) and isosurface of Q-criterion [66] in light gray highlighting the four corner vortices: Case A.

the head-end of the combustor and is evidenced by a low value of the velocity magnitude iso-surface (in light gray), Fig. 6. Other recirculating regions are created just downstream of the air inlets, on the top and bottom walls of the chamber. Two recirculating bubbles also appear within the two air-stream ducts. These flow patterns are strongly linked to the combustor geometry. Indeed, the duct air inlets sudden inclinations induce detachment points of the injected air flow. Behind these points, small recirculation zones diminish the effective flow passage henceforth increasing the air velocity before it enters the combustion chamber. Similarly, the sudden expansion seen by the incoming flow of air when entering the main chamber duct explains the two recirculation bubbles appearing on the top and bottom floors of the combustor. These bubbles reattach far dowstream the main duct combustor section. Finally, four corner vortices linking the head-end to the aft section of the chamber are evidenced with a Q-criterion iso-surface as proposed by Hussein [66] (in white on Fig. 6). These last structures have an important impact on the reacting flow as the injected fuel travels from the head-end towards the downstream coalesced air jet through these four corner vortices.

For this cold flow configuration, the unsteady turbulent behaviour is dominated by the oscillation of the impinging jets. This highly unsteady feature is illustrated on Fig. 7 where two snapshots are taken at instants when the coalesced jet is deviated towards the top and bottom walls of the main chamber (top and bottom sub-figures respectively). The associated flapping frequency is around $5000\,Hz$ corresponding to an average oscillating speed of the order of the jet speed ($\approx 500\,m/s$) which is nearly sonic for this flow configuration. The actual characterisation of such a phenomenon remains difficult since acoustic and aerodynamic phenomena have similar time scales. This is less critical in the reacting configuration which has a much lower Mach number ($M = 0.3$) thus allowing a clearer time scale separation between acoustic and aerodynamic.

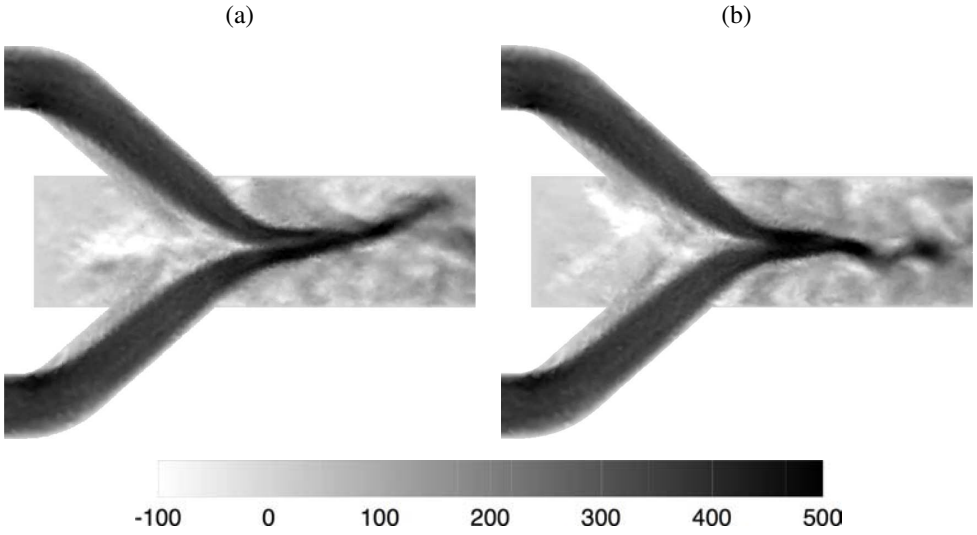


Figure 7: Instantaneous axial velocity in the $y = 0$ plane, which illustrates the flapping of the jet: Case A.

5.1.2. Reacting flow

With combustion, LES reveals a flame shape controlled by flow structures that are similar to the one observed in the non-reacting case. Figure 8 depicts an instantaneous view of the temperature field in the $y = -40$ and $z = 0\,mm$ planes for an equivalence ratio of $\phi = 0.5$ (Case B, Table 1). Figure 8 also displays iso-lines of stoichiometric mixture fraction (white line) and backflow zones (black lines). The following recirculation structures control the flame location:

- The two recirculation zones downstream of the air inlets and located near the top and bottom combustor walls, Fig. 6,
- The recirculation zone present in the head-end of the chamber, Fig. 6, concurring in a narrow needle-shaped flame in that region, Fig. 8.

Figure 8 allows the identification of the two reacting regions. The first flame front, located in the aft part of the coalesced jet is hereinafter referred to as the "chamber flame". The second flame positions itself between the incoming air jets and the recirculation zone in the head-end. Figure 9 exhibits the main path lines of air coming into the chamber. A small part of the air (in dark gray) penetrates the head-end where one of the recirculation zones is positionned (Fig. 8). Concerning the chamber flame, the stabilization is facilitated by the low speed velocity regions generated near the air intake geometry. Air feeding is shown by the light gray path lines of Fig. 9. Fuel alimentation of the chamber flame is less obvious.

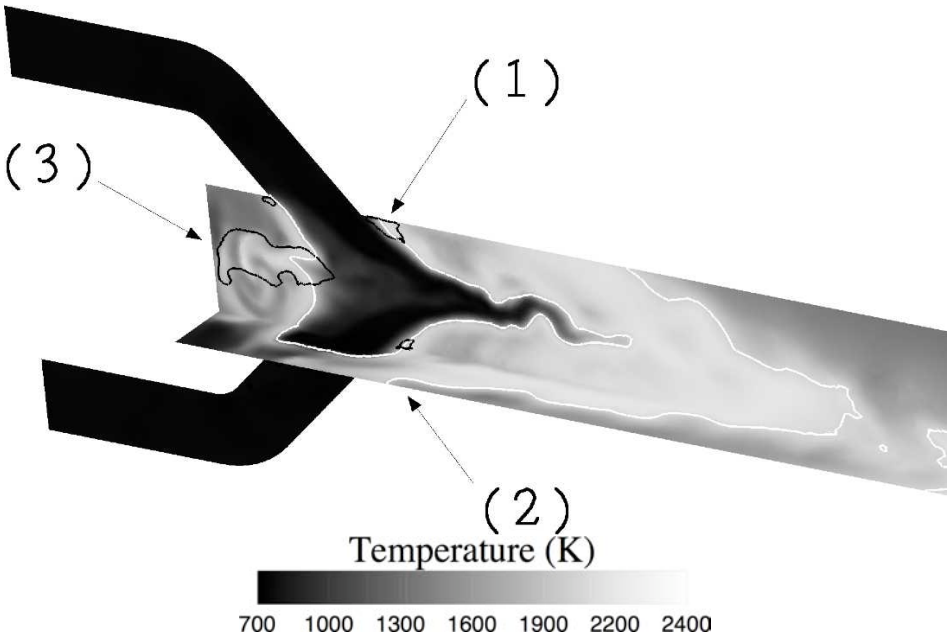


Figure 8: Instantaneous temperature field, white iso-line: stoichiometric line; black iso-line: zero axial velocity. Arrows point at the different recirculation zones which are numbered for clarity: Case B.

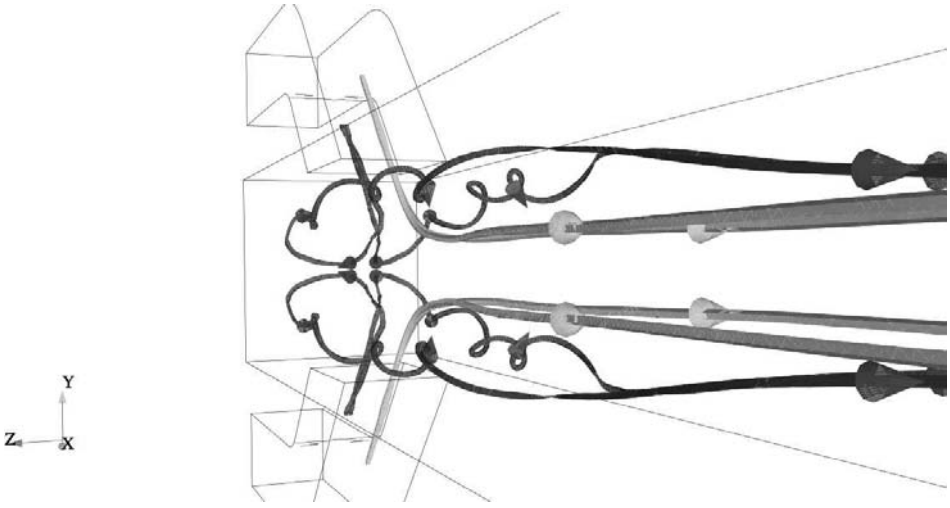


Figure 9: Particule paths followed by the fluid particles coming from the air intakes: Case B.

Figure 10 shows an iso-surface for a mean averaged fuel mass fraction at 0.15. The pattern of the elevated iso-surface evidences the path traveled by the fuel from the head-end to the chamber. Clearly fuel goes through the four angle vortices visualized on Fig. 6 leaving the rich head-end zone and feeding the combustion chamber. Note that around $x = 140\,mm$, the air intake streams push the fuel near the lateral walls reaching the main chamber by

the four chamber angles.

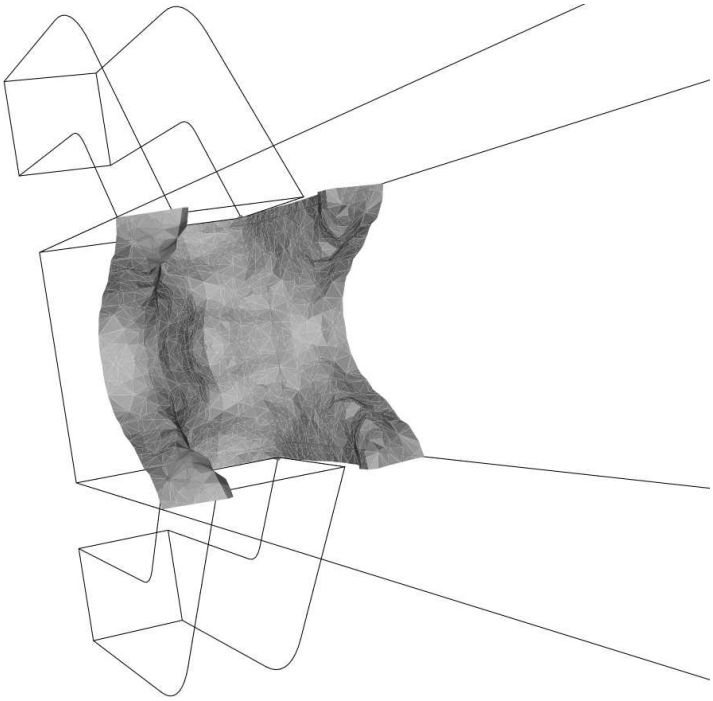


Figure 10: Iso-surface of the averaged fuel mass fraction, $Y_{C3H8} = 0.15$: Case B.

Finally, hot burned gas pockets and combustion products are convected towards the chamber exhaust. Note that temperature variations impacting the nozzle may be a source for a thermo-acoustic instability through the excitation of a longitudinal mode of the chamber [67, 68]. However, such a mechanism is not evidenced in the simulations due to a much more unstable phenomenon discussed in the following sub-section.

5.2. Validation against experiments

In this section, LES results are gauged against the experimental data of ONERA for the reacting regime of Case B (Table 1).

Velocity fields are obtained with two experimental techniques on the ONERA configuration: one based on the seeding of MgO particles and the second one based on soot measurements [22, 29, 30, 31, 32]. For assessment, one-dimensional cuts of mean axial (U) and vertical (V) velocity components are first presented at various axial distances in both vertical (y) and transversal (z) directions. Figure 11 exhibits the spatial evolutions of the mean velocity components (left and right columns corresponding respectively to vertical and transversal lines passing through the symmetry planes of the combustor). Overall LES mean velocity predictions are in good agreement with

the experimental data. LES results validate the experimental data obtained by MgO seeding technique. Potential discrepancies between LES and MgO measures remain less important than the experimental error reported by the two measuring techniques. Similar observations are reported for the fluctuating components which are known to be more difficult to predict (not reported here).

Validation of the flow predictions along the centerline of the combustor is also addressed in Fig. 12. In fact, it is important to properly reproduce the location of the head-end recirculation zone as well as the jet impingement. Indeed, these flow patterns play an important role for the flame stabilization as underlined previously. Figure 12 shows the axial and vertical mean velocity components along the $y = z = 0$ line for both experimental and numerical results. The experimental shapes are well reproduced numerically and the position of the stagnation point separating the head-end zone from the flow in the aft region of the combustor is very well predicted.

6. Advanced diagnostics for LES

Previous results prove that LES captures experimental cold and reacting flow features for the mean velocity components at various locations within the ramjet combustor. Section 5.2 henceforth validates the approach for such a complex configuration where high density variations are present. However a recognized advantage of LES is that it also offers fully unsteady description of the flow field. As illustrated in Fig. 13, where four different instantaneous pressure fields are depicted, the unsteadiness within the combustor is very noticeable.

From this qualitative representation, the oscillatory motion as described by LES is evidenced. These self-sustained strong periodic variations of the flow quantities appear naturally in the reacting cases. Preliminary studies on this same configuration [69] highlight the potential coupling between aerodynamics, combustion and acoustics. The apparition of a screech phenomenon as described by Rogers [3] is also underlined. However, advanced diagnostics are compulsory to explore such oscillations of the burner and to isolate the potential mechanisms at the origin of the self-sustained oscillation. Such a task is the aim of the present section where the $\phi = 0.75$ case (Case C) is investigated through the use of:

1 Spectral Maps (SM) of the instantaneous LES results,

2 A Helmholtz Solver (HS) providing solution to the acoustic equation,

3 A Proper Orthogonal Decomposition (POD) of the flow field as derived from LES.

A confrontation of the different results issued by the three diagnostics is proposed to classify the unsteadiness and evaluate the various modes involved in the instability of the combustor. More specifically, the HS method is

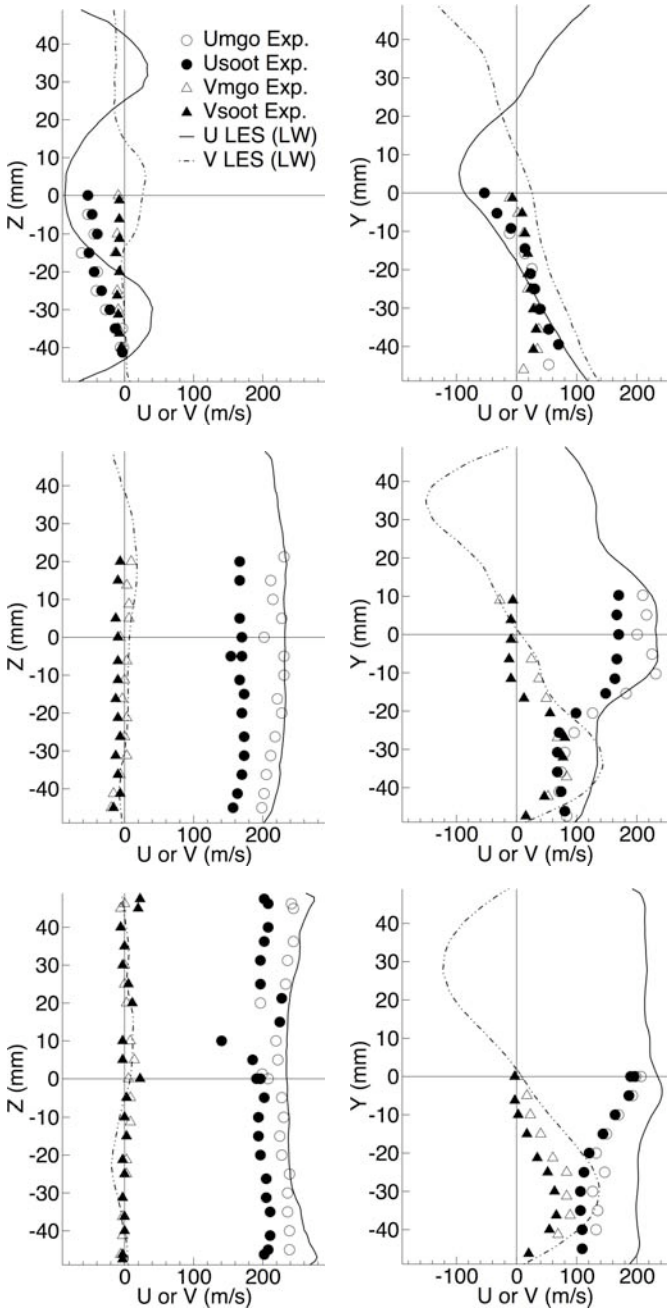


Figure 11: Comparison LES - experimental results for the mean axial (U) and transverse (V) components of the velocity vector along the z (left) and y (right) axes at different axial positions (from top to bottom: $x = 148\,mm; x = 250\,mm; x = 336\,mm$): Case B.

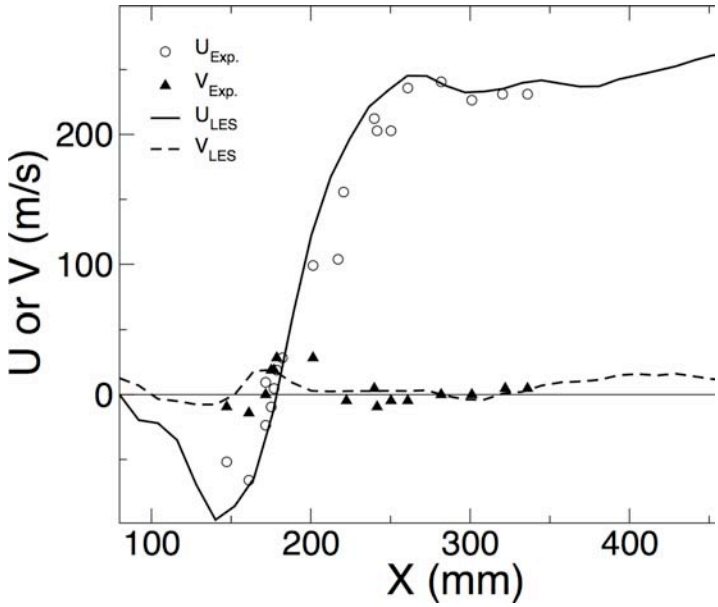


Figure 12: Comparison LES - experimental results for the mean axial component of the velocity vector along the centerline of the combustor (x-axis): Case B.

used to predict the acoustic eigenmodes of the configuration using only the average sound speed in the chamber, while the SM and POD are performed to link the different modes (acoustics and/or aerodynamics) in terms of delay and strength as present in LES. The section is decomposed in two parts. The first part briefly introduces the tools, while the second part presents and discusses the results. At the end of the discussion, one specific mode is advanced as being at the root of the oscillating regime. The selection criterion is the reconstructed Rayleigh criterion as obtained by the different modes found by the three diagnostics. Note that no experimental results are available for this oscillation mode of the burner, although strong pressure fluctuations have been reported. Potential differences between the numerical predictions and the experiments are expected and can, in part, be explained by the improper representation of the inlet conditions. Further investigations still remain necesasary to fully validate LES in that context.

6.1. Spectral analysis and maps from LES signals: SM

First, FFT analysis is applied to high-resolution temporal signals recorded at specific locations within the combustor (Fig. 14). For the four points of Fig. 14, a resolution of $14\,Hz$ is reached to ensure high quality spectra. In addition to these local spectra, Spectral Maps (SM) offer a spatial presentation of the regions where a given frequency is present inside the whole ramjet. For such maps, all the points of the computational domain are treated based on LES snapshots. The associated frequency resolution is $50\,Hz$ and is deemed sufficient for the phenomena

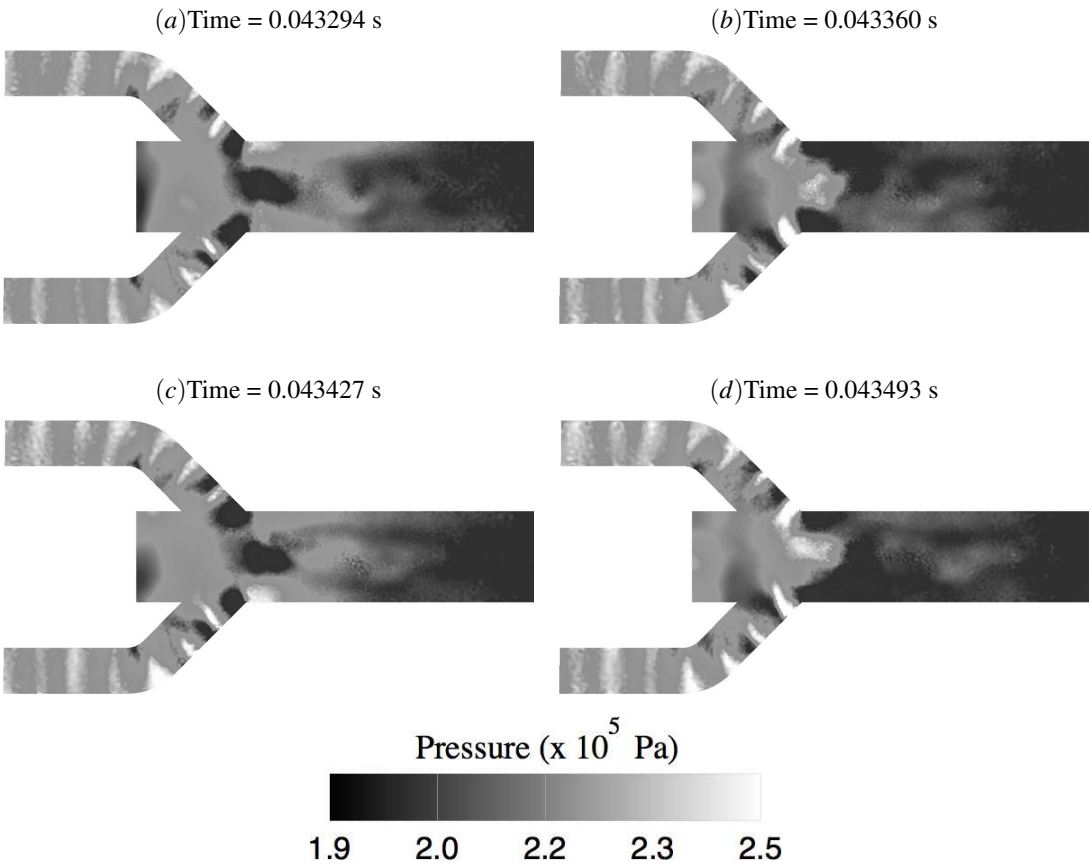


Figure 13: Instantenous pressure fields in the $y = 0$ plane as obtained by the reacting LES for an equivalence ratio of 0.5: Case B.

sought for. Both methods are applied to pressure.

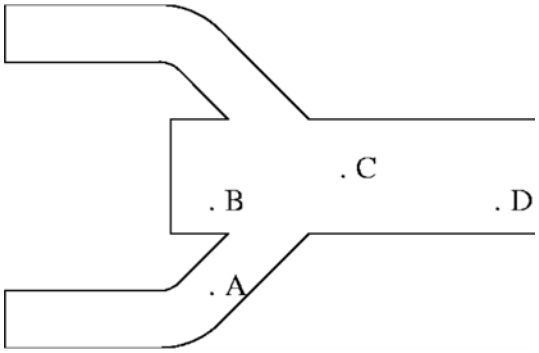


Figure 14: Probe positions in the (x,y) plane of the ramjet combustor and for which temporal recordings of pressure are obtained by LES: point A for the air inlet, point B for the head-end of the chamber, point C for the impinging zone and point D corresponding to $x = 350\,mm$.

6.2. Helmholtz analysis using LES mean flow field: HS

Second, to separate acoustic and aerodynamic modes, a Helmholtz Solver (HS) is used to identify the acoustic eigenmodes of the configuration [55]. The HS seeks solutions to Eq. (10) in the frequency domain [70]:

$$\nabla.\left(\bar{c}^2\nabla p'\right) - \omega^2 p' = 0 \tag{10}$$

where p' is the acoustic pressure perturbation, $\bar{c}$ is the local mean speed of sound obtained by averaging the LES results and ω is the pulsation ($\omega = 2\pi f$). Eq. (10) is solved for harmonic acoustic pressure fluctuations and is applicable to non-isothermal flow conditions. The approach is based on a low Mach number assumption which is reasonable over most of the combustor[1]. The nozzle has thus to be treated separately: for the Helmholtz analysis, it is replaced by its impedance (Fig. 15) corresponding to a choked nozzle [71]. At the inlet, a no reflection condition is imposed (impedance equals unity).

6.3. Proper orthogonal Decomposition of the LES results: POD

A Proper Orthogonal Decomposition (POD) analysis is applied to better understand the coupling between the different phenomena taking place inside the chamber. Initially introduced for the analysis of experimental data of turbulent incompressible flows [25, 72], POD recasts flow quantities into a series of orthogonal functions or modes obtained through the minimization of the error associated with a projection operation. This flow description

[1]The maximum Mach number in the chamber (excluding the nozzle) is $M = 0.3$ which yields maximum errors on the resonant frequencies that are of the order of $M^2 \simeq 9$ percent.

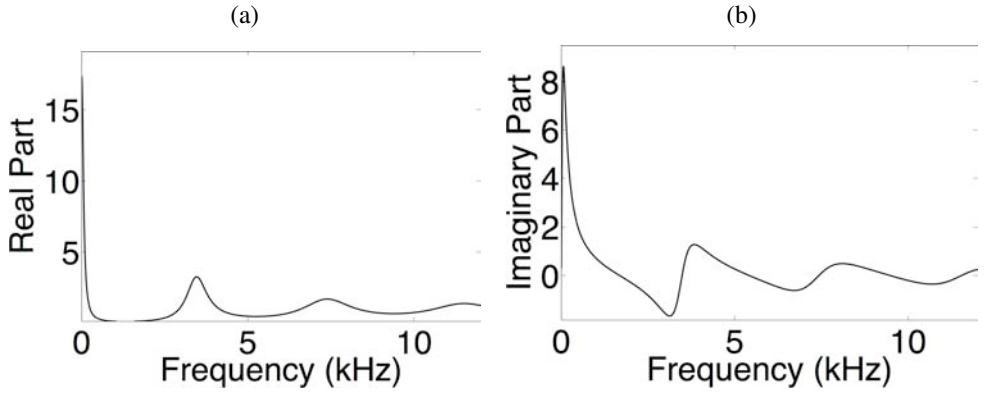


Figure 15: Equivalent impedance for the nozzle: (a) real and (b) imaginary parts.

provides an energetic distribution of structures characterized by a temporal and spatial evolution of each mode. Early demonstrations prove the approach to be very useful for advanced flow diagnostics and recent applications to oscillatory flows demonstrate the power of POD in complex geometries [26, 73]. More specifically, Huang [26] perform POD diagnostic of a gas turbine combustor to emphasize the different mechanisms taking place during combustion at two different swirl numbers. They also show that to describe acoustics, POD based on the acoustic potential energy is sufficient. In the context of data obtained by numerical simulations such as Direct Numerical Simulations (DNS) or LES, the snapshot POD approach is preferred [74, 75]. With this method, results are acquired based on a collection of observations $\mathbf{q}(\mathbf{x},t_n)$ regularly spaced in time (*i.e.*: $n = 1,\cdots,N$) and for a spatial domain noted Ω. Based on the POD description, the studied flow field quantity can be written as in Eq. (11), where $a^{(n)}(t)$ is the temporal expansion coefficient and $\Psi^{(n)}(\mathbf{x})$ is the spatial eigenvector corresponding to the nth POD mode,

$$\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{x},t) = \sum_{n=1}^{N} a^{(n)}(t)\Psi^{(n)}(\mathbf{x}). \tag{11}$$

The following integral eigenvalue equation,

$$\int_{\mathcal{T}} C(t,t')\, a^{(n)}(t')\, dt' = \lambda^{(n)}\, a^{(n)}(t), \tag{12}$$

allows the determination of the POD modes. In Eq. (12), $\mathcal{T}$ is the duration of the simulation, $C(t,t') = \langle q(\mathbf{x},t) \cdot q(\mathbf{x},t')\rangle$ is the two-time correlation function and $\lambda^{(n)}$ is the nth eigenvalue of the problem considered. For completeness and to allow the minimization process associated with the definition of the base, an inner product and a norm must be defined. In the following, the inner product denoted by $\langle\cdot\rangle$, aims at identifying the acoustic field and is based on the fluctuating pressure [26]. Hence, the L_2 norm is chosen along with,

$$\langle p' \cdot p' \rangle = \int_{\Omega} \frac{p'\,p'}{\overline{\rho}^2\overline{c}^2}\, d\mathbf{x}, \tag{13}$$

as inner product. In Eq. (13), $\overline{\rho}, \overline{c}$ are respectively the mean local temporal density and speed of sound. Note that mean energy bounds can be extracted from the eigenvalue decomposition,

$$E = \int_{\mathcal{T}} \int_{\Omega} \left(\frac{p'^2}{\bar{\rho}^2 \bar{c}^2} \right) d\mathbf{x}\, dt = \sum_n \lambda^{(n)}, \tag{14}$$

where $\lambda^{(n)}$ is the nth eigenvalue of the POD. Throughout the present paper, the POD analysis is obtained for a collection of snapshots composed of 1200 LES fields yielding a sampling frequency of $75000\,Hz$ and a total duration of $16\,ms$.

6.4. Modal descriptions of the flow fields

To begin the analysis of the unsteady motion in the ramjet, FFT's of pressure signals obtained at four locations (*A* to *D*) in the LES computational domain (Fig. 14) are displayed on Fig. 16. Five peaks are visible at $400\,Hz$, $3560\,Hz$, $3750\,Hz$, $7560\,Hz$ and $11300\,Hz$. Each frequency of Fig. 16 is not present for all four probes as positioned within the ramjet combustor. The pressure oscillations at $400\,Hz$ as well as the $3560, 3750$ and $11300\,Hz$ modes do not appear at point *C* which points to potential pressure acoustic nodes ($p' = 0$) positioned along the centerline of the main chamber. This, of course, is true only if such frequency oscillations coincide with real acoustic modes of the system, which remains to be confirmed. All other probes feel all the identified frequencies with more or less strength. The strongest signal is registered for the $7560\,Hz$ mode at probe *C* which is located in the area where the two air jets meet and near the chamber flame. At this point, the amplitude of the $7560\,Hz$ signal is almost ten times higher than all the other peaks present in the rest of the chamber. All the modes discussed below along with the list of all the figures illustrating them for each method (SM, HS and POD), are summarized in Table 3.

The low amplitude oscillation, Mode 1 of Table 3, which has a frequency of $400\,Hz$, is identified as the first longitudinal acoustic mode of the main chamber and is captured by all diagnostics. The HS analysis confirms the pure acoustic nature of that periodic oscillation, Fig. 17(a), and the SM diagnostic underlines its presence in LES, Fig. 17(b). The SM amplitude distribution agrees well with the HS results (Fig. 17(a)) which confirms the pure acoustic longitudinal nature of Mode 1. POD also evidences such an oscillation. From an energetic point of view, Mode 1 is quite weak in comparison with the other modes present in LES as demonstrated by the POD results and Fig. 16. This observation points to other frequencies as being at the root of the periodic oscillation of the ramjet combustor.

SM obtained for the remaining frequencies identified on Fig. 16 and Table 3 are presented on Fig. 18. All modes comply with the geometrical symmetry of the combustor: they are symmetrical with respect to the (x,y) plane going through the centerline of the burner and the (x,z) plane passing through this same line. The ramjet centerline is indeed a pressure node for Modes $2, 3$ and 5. This is not the case for Mode 4 which depicts very large

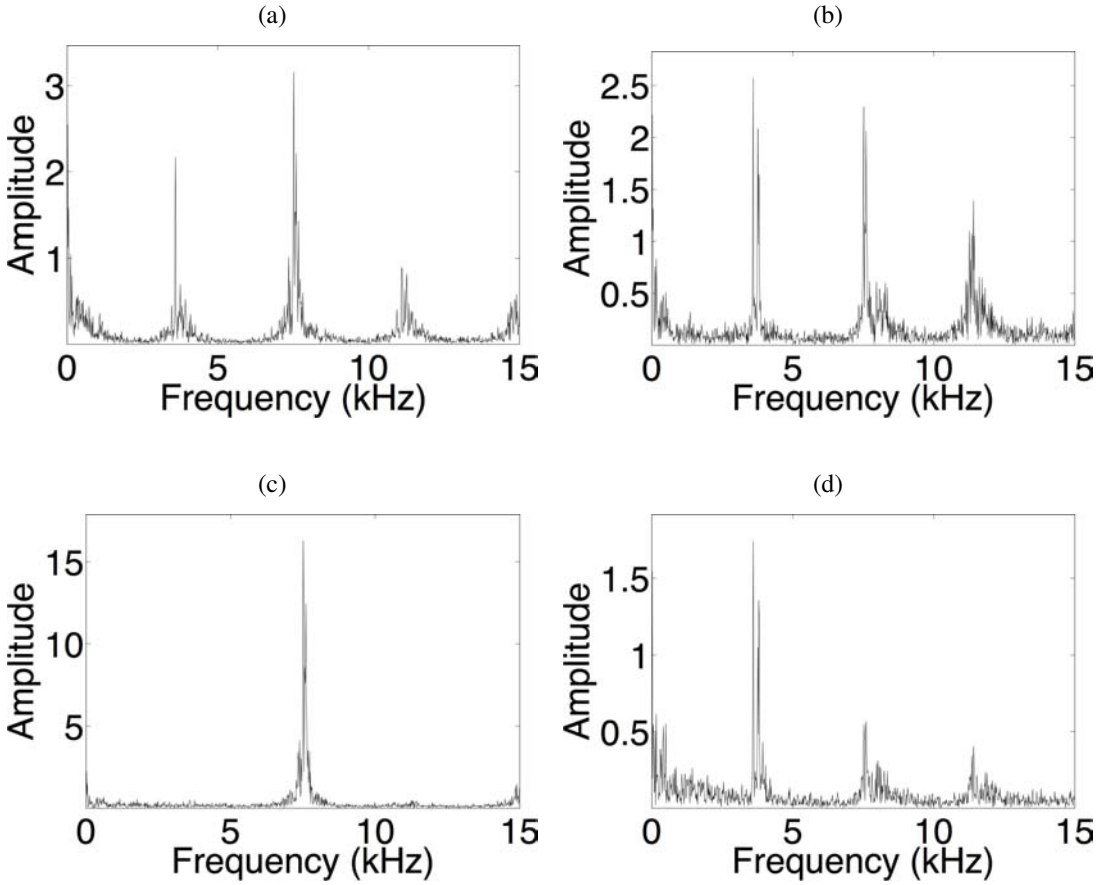


Figure 16: Amplitude of the FFT for pressure fluctuations (in kPa/Hz) as a function of frequency (in kHz) for the points A, (a); B, (b); C, (c) and D, (d) of Fig. 14.

pressure fluctuations along the centerline of combustor, in the jet impinging region, the side walls of the combustor and in the head-end. The dominant directions composing the observed modes are listed in Table 3.

The spatial structure of the modes found from the HS analysis is shown on Fig. 17(b) for Mode 1 and Fig. 19 for the other modes of Table 3. The agreement between the mode structures predicted by the Helmholtz solver (Fig. 19) and the SM analysis of the LES results (Fig. 18) demonstrates that the five modes of Table 3 are all acoustic modes which can be predicted using linearized acoustics in the Helmholtz solver. Small differences can be identified for Modes 4 and 5. The SM analysis, Fig. 18 (c) for Mode 4, depicts more activity in the aft part of the air intake (close to the main rectangular chamber) than reported by the HS results, Fig. 19 (c). Mach number variations, pure aerodynamic effects or combustion might be at the source of this discrepancy. Likewise Mode 5 illustrates slightly shifted patterns in the region of jet-on-jet interactions and combustion. General pressure amplitude distributions are nonetheless very well recovered.

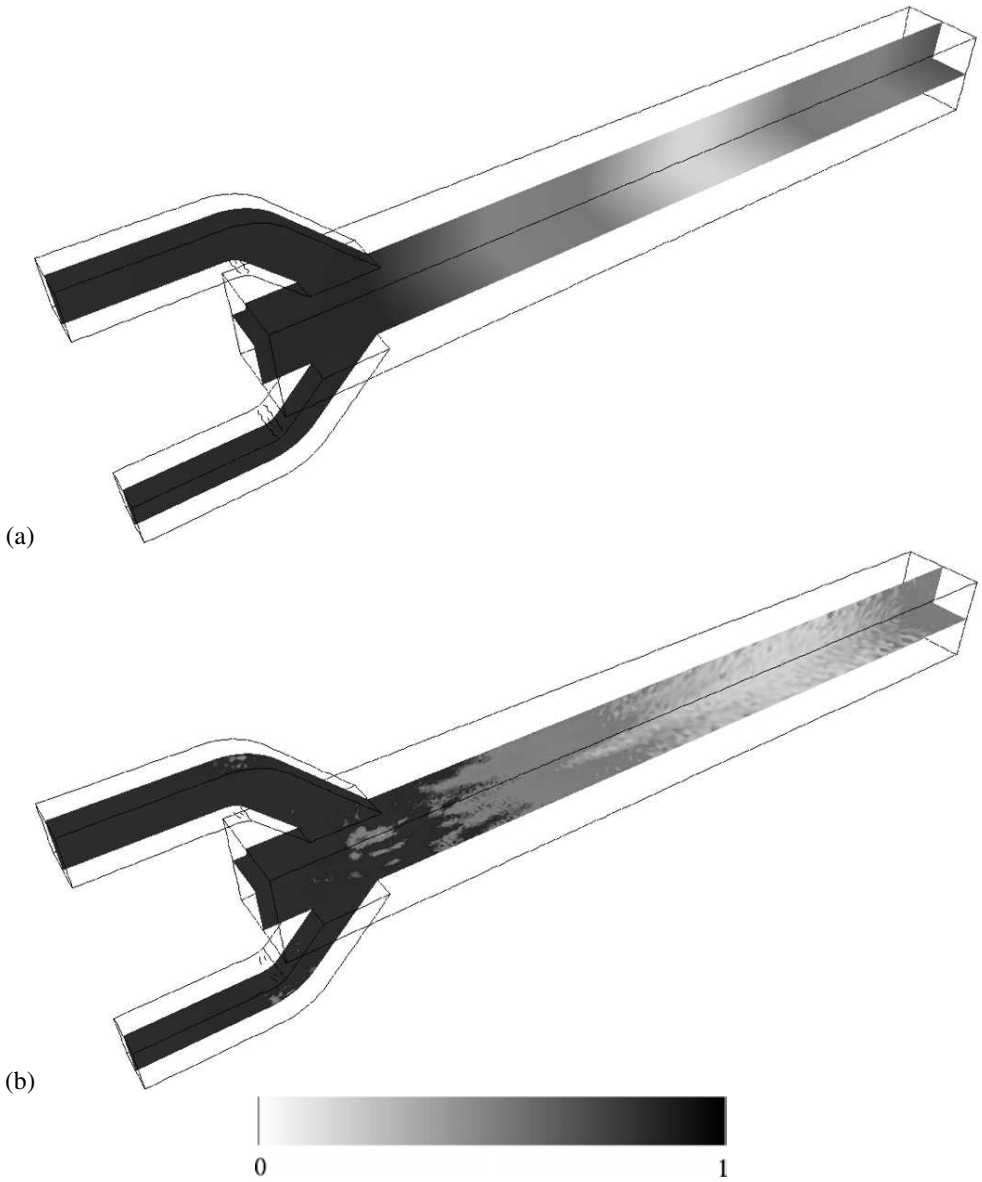


Figure 17: Mode structure at $400\,Hz$: normalized pressure fluctuations obtained from (a) HS and (b) SM analyses of LES.

POD results obtained from 1200 LES snapshots are presented in Figs. 20 and 21. The first observation is that all five modes obtained by post-processing spectral maps (SM) of LES or by performing a Helmholtz analysis of the combustion are also recovered by POD. However, based on Eq. (13), POD also provides an energetic classification of all the previously obtained frequencies. Mode 3 appears to be the strongest fluctuating structure (55 % of the total energy), followed by Mode 4 (30 %), Mode 5 and Mode 2. Note that POD yields for some of the frequencies, and for our problem, pairs of eigen-functions. Apendix A provides an explanation of this phenomenon and proves

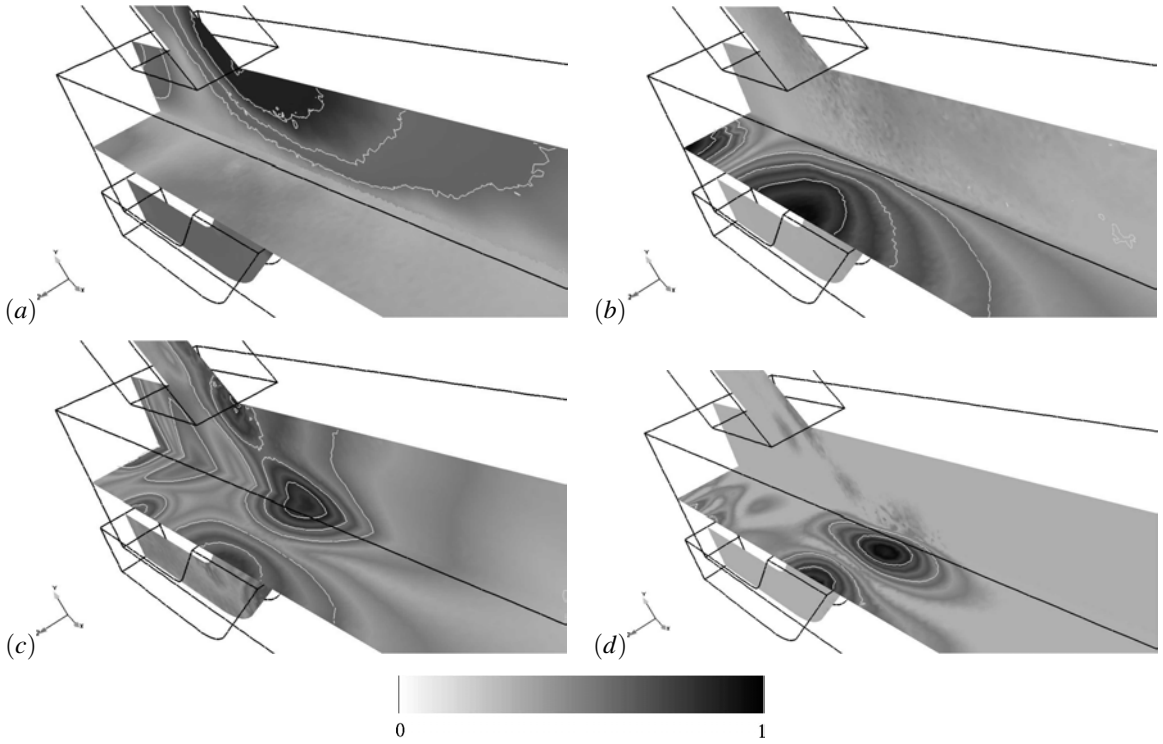


Figure 18: Normalized pressure fluctuations obtained from SM analysis of LES: (a) 3560 Hz, (b) 3750 Hz, (c) 7560 Hz and (d) 11300 Hz.

that mode pairs must be combined to provide physical modes. By doing so, the structure of the modes obtained by POD is displayed in Fig. 21 for the different frequencies listed in Table 3. Comparison of Fig. 21 with Figs. 18 and 19 confirms the coherence of all the diagnostics and the importance of acoustics in all self-excited modes. Figure 22 proves the accuracy of POD by comparing the temporal evolution of the pressure signal as obtained in the LES for point C and the eight or ten first POD structures: *i.e.* all the POD modes with the frequencies listed in Table 3. The differences observed for the signals based on eight or ten modes and the exact LES signal actually result from oscillations at 15 kHz or more and will not be taken into consideration in our discussion.

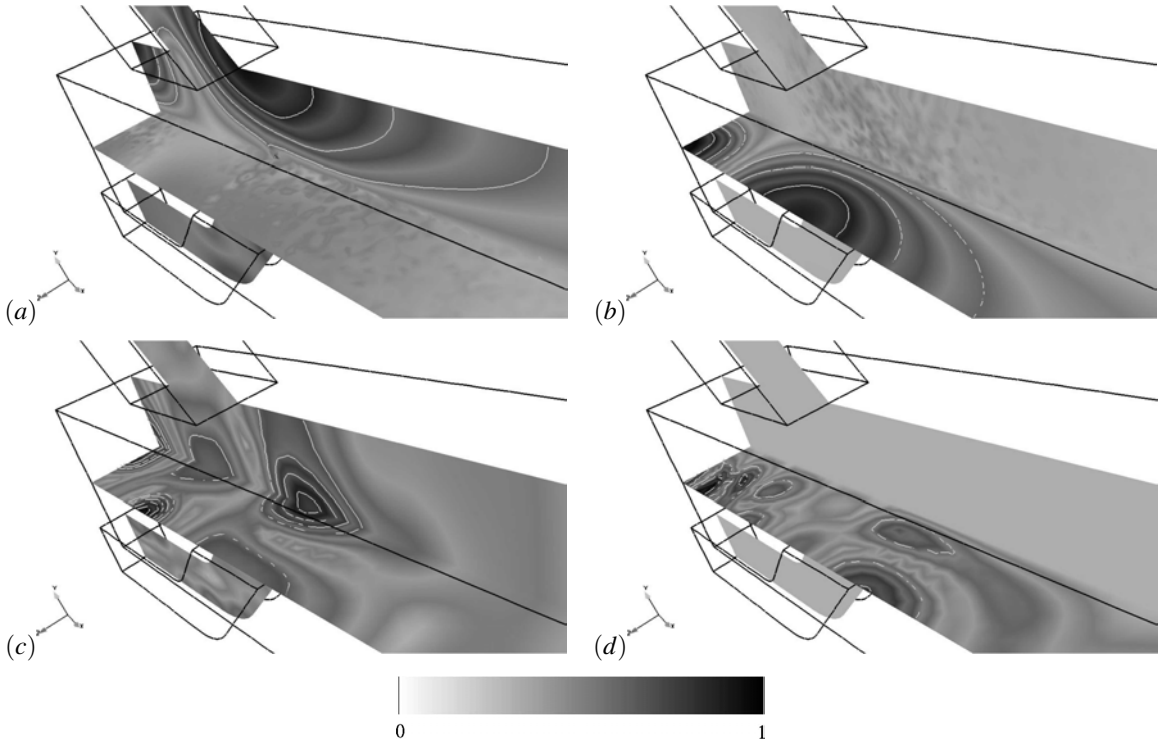


Figure 19: Normalized pressure fluctuations obtained from HS: (a) 3560 Hz, (b) 3750 Hz, (c) 7560 Hz and (d) 11300 Hz.

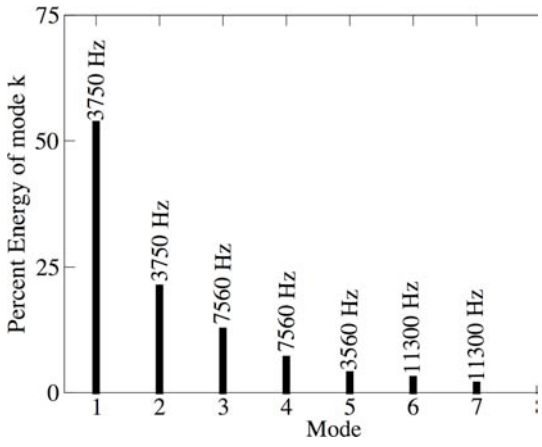


Figure 20: Energy distributions of POD modes for pressure.

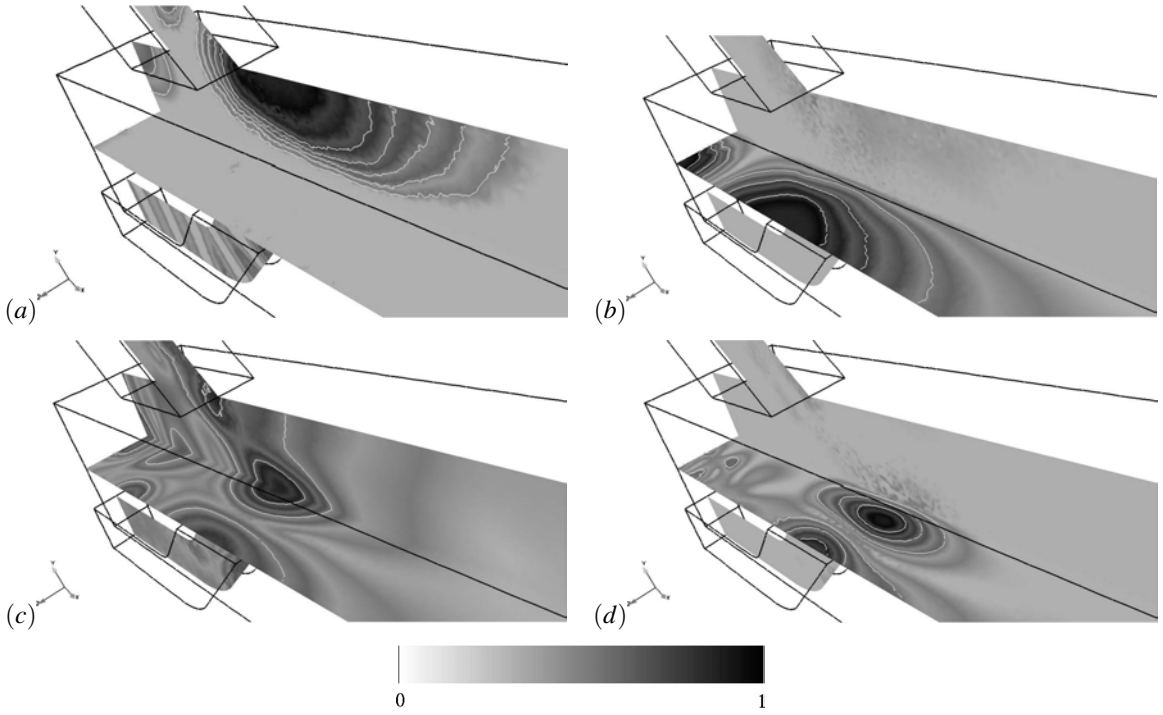


Figure 21: Normalized pressure fluctuations obtained from POD: (a) 3560 Hz, (b) 3750 Hz, (c) 7560 Hz and (d) 11300 Hz.

Note that Mode 2 arises in POD as a sole eigen-function with a 3560 Hz frequency, Fig. 21(c). The obtained shape agrees with the HS structure of Fig. 19(a) which underlines its purely acoustic nature. Mode 2 has an associated energy which is small compared to the energy contained in the other modes. Hence, based on the three diagnostics (SM, HS and POD), emphasis is brought onto the 3750 and 7560 Hz structures (Modes 3 & 4 of Table 3) which are the most energetic and potentially the source of the self-sustained oscillation in the ramjet combustor.

To analyze these two modes (3 and 4), the notion of acoustic energy production by the $p'\,q'$ correlation term is investigated. POD is thus applied to the heat release rate as issued by LES. To do so, the non-dimensionalized fluctuating pressure of Eq. (13) is replaced by the heat release rate. Figure 23 shows reconstructed flow fields obtained from POD for the 3750 Hz frequency. The view plane corresponds to the (x,z) symmetry plane of the combustor at four instants. The left column of Fig. 23 pictures the reconstructed fluctuating pressure field, while the right column shows the reconstructed fluctuating heat release rate at the same instants. Each individual snapshot from top to bottom is set to be at $0, \frac{T}{4}, \frac{T}{2}$ and $\frac{3T}{4}$ of the 3750 Hz oscillation ($T = 0.2667\,ms$).

Figure 23 reflects the combustion/acoustic coupling in the ramjet: pressure and heat release rate are in phase not only in terms of time but also of space. The oscillation alternatively induces positive/negative heat release fluctuations (around the mean) between the left and the right sides of the burner. Such events coincide exactly

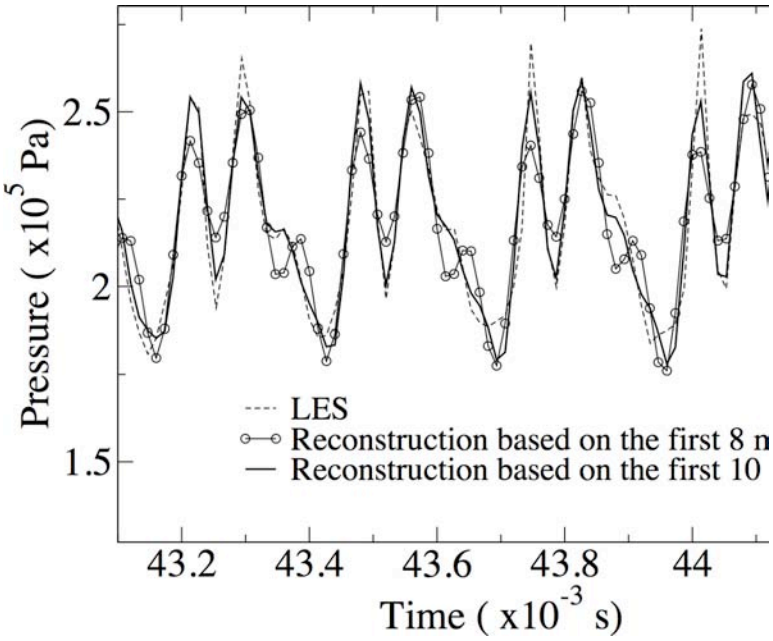


Figure 22: Temporal evolution of the pressure signal at point *C* of Fig. 14 based on LES and reconstructed POD fields using the first 8 or 10 modes.

with positive/negative fluctuations of pressure at these same locations and at the same instants. The volumetric Rayleigh criterion associated with the $3750\,Hz$ oscillation is always positive as shown by Fig. 25: *i.e.* Mode 3 is a strong driving source of the acoustic energy evolution equation. A second indication obtained from the heat release representation is the strong interaction of the flame with walls. Such interactions are known to yield strong acoustic sources [76, 77]. In the present case, a scenario for the $3750\,Hz$ mode evidenced by POD is the following: the flame flaps left and right (z direction on Fig. 23) at $3750\,Hz$, interacting with walls and feeding the first transverse acoustic mode of the combustor ($1\,L_z$).

Similar diagnostics are obtained for the $7560\,Hz$ signal (Figs. 26 & 27). Reconstructed fields of pressure and heat release rate are shown at $0, \frac{T}{4}, \frac{T}{2}$ and $\frac{3T}{4}$ for the period of interest ($T = 0.132\,ms$) and for the two symmetry planes of the burner. Location of extreme pressure and reaction rate fluctuations differ from the ones evidenced by the $3750\,Hz$ phenomena. The most important difference with Mode 3 is illustrated by Fig. 26 which pictures heat release fluctuations that oscillate in phase: *i.e.* the right and left branches of heat release are positive and negative at the same instants. Visualization of the activity in the (x,y) mid-plane of the burner indicates that the top and bottom parts of the flame also oscillate in phase. The (x,y) plane heat release fluctuations also appear to have a temporal phase-shift of π when compared to the (x,z) plane results. The temporal and spatial correlation between pressure and heat release is more difficult to assert in comparison to the $3750\,Hz$ structures. The Rayleigh criterion corresponding to the $7560\,Hz$ modes indicates a contribution to the acoustic budget equation that is roughly five

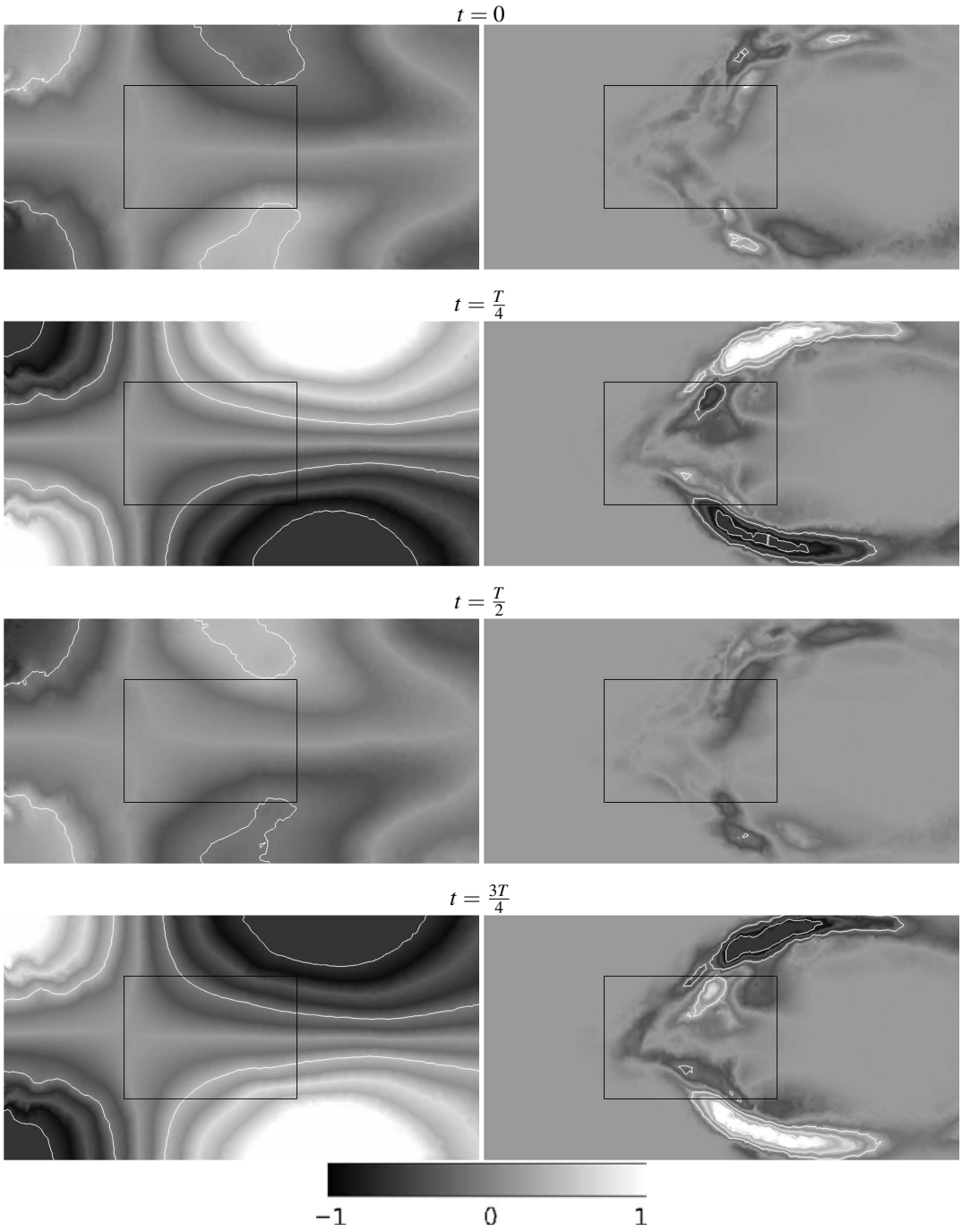


Figure 23: Temporal reconstruction of the pressure fluctuation field (left column) and fluctuating heat release field (right column) obtained by superposition of the two POD modes at $3750\,Hz$. The individual snapshots correspond to the instants $t = 0, \frac{T}{4}, \frac{T}{2}, \frac{3T}{4}$ (from top to bottom) and are given in the horizontal symmetry plane of the burner.

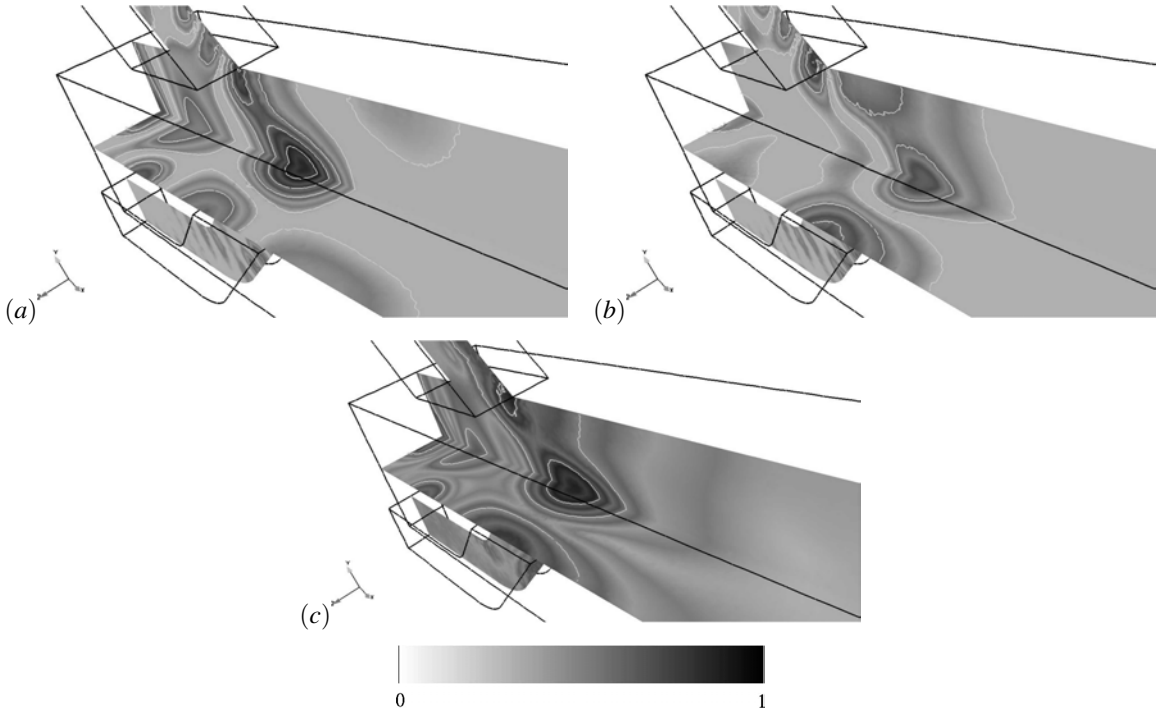


Figure 24: Amplitude fields of the normalized pressure fluctuations as issued by POD for a frequency of 7560 Hz: (a) first POD mode, (b) second POD mode and (c) their superposition.

times smaller than the one resulting from the 3750 Hz interation.

The previous analyses can be summarized as follows:

- Mode 3 is the main source of self-sustained oscillations of the combustor. Although other frequencies are present throughout the combustor, their actual impact on the acoustic energy production rate is small compared to the 3750 Hz oscillation.
- Acoustic/combustion coupling at that frequency is very strong: POD's of pressure and heat release result in strong spatial and temporal correlations of the different modes found at that frequency. This is confirmed by the reconstructed Rayleigh criterion for the 3750 Hz signal which proves to be the prime source of acoustic energy production within the combustor.
- Acoustic flux contributions are crucial in the determination of the combustor stability. In our specific case and because the air duct inlets are purely non-reflecting, the acoustic flux is a pure acoustic loss. That flux will change the energy distibution of the self-sustained oscillation which appears here with a frequency of 3750 Hz.

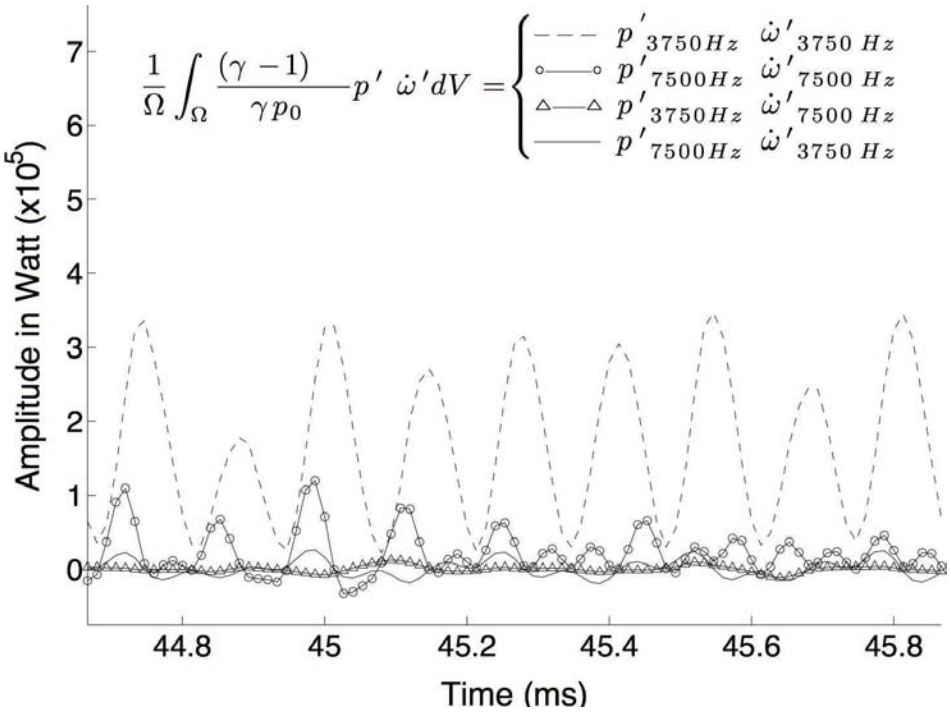


Figure 25: Temporal evolution of the volumetric Rayleigh criterion as obtained by combining the POD structures at 3750 and 7560 Hz.

7. Conclusions

Simulations of unsteady reacting flow within ramjets raise problems which make them more difficult to compute than usual configurations found in laboratory burners:

- The mean flow is very compressible (with Mach number varations ranging from 0.3 to 0.9 for the reacting case) and the influence of the choked outlet nozzle is strong.
- Acoustics and especially transverse modes have to be properly captured.

In the present study, cold Large Eddy Simulation (LES) predictions are used to highlight the various flow structures as found in the laboratory ramjet burner of ONERA burning air and propane. These LES results reveal that the flame topology is controlled by the jet-on-jet interactions, recirculation regions as well as four corner vortices linking the head-end region of the burner to the aft part of the flow field and which distribute the fuel within the combustor. A set of experiments performed on the model ramjet of ONERA is used to validate the compressible reacting LES solver. The numerical predictions are gauged against the experimental data for an equivalence ratio of 0.5. The comparison between LES and measurements is good for the mean fields of the axial and vertical velocity components. Based on that validation, the unsteady oscillatory reacting flow is investigated through the use of three

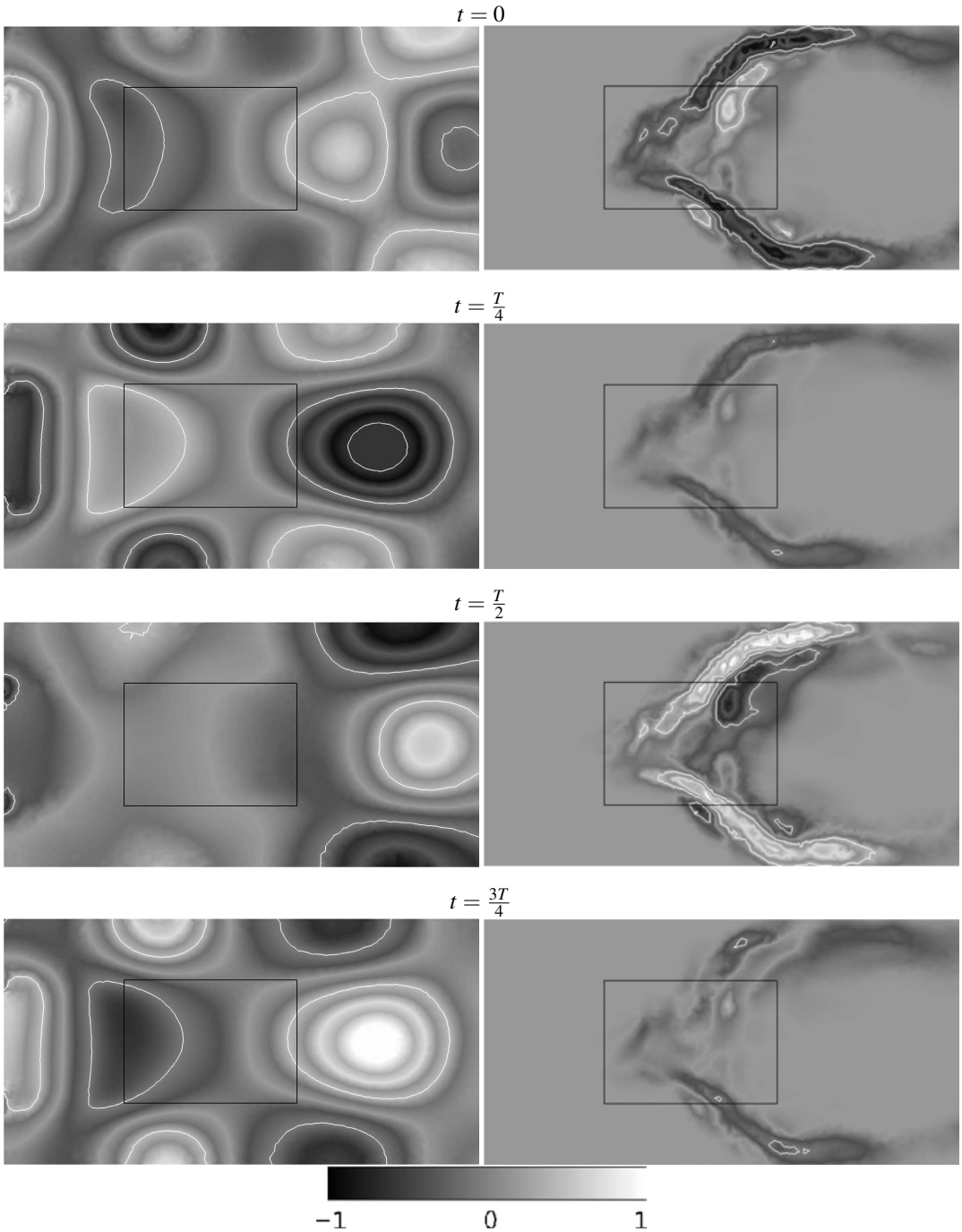


Figure 26: Temporal reconstruction of the pressure fluctuation field (left column) and fluctuating heat release field (right column) obtained by superposition of the two POD modes at $7560\,Hz$. The individual snapshots correspond to the instants $t = 0, \frac{T}{4}, \frac{T}{2}, \frac{3T}{4}$ (from top to bottom) in the period of interest and are given in the horizontal symmetry plane of the burner.

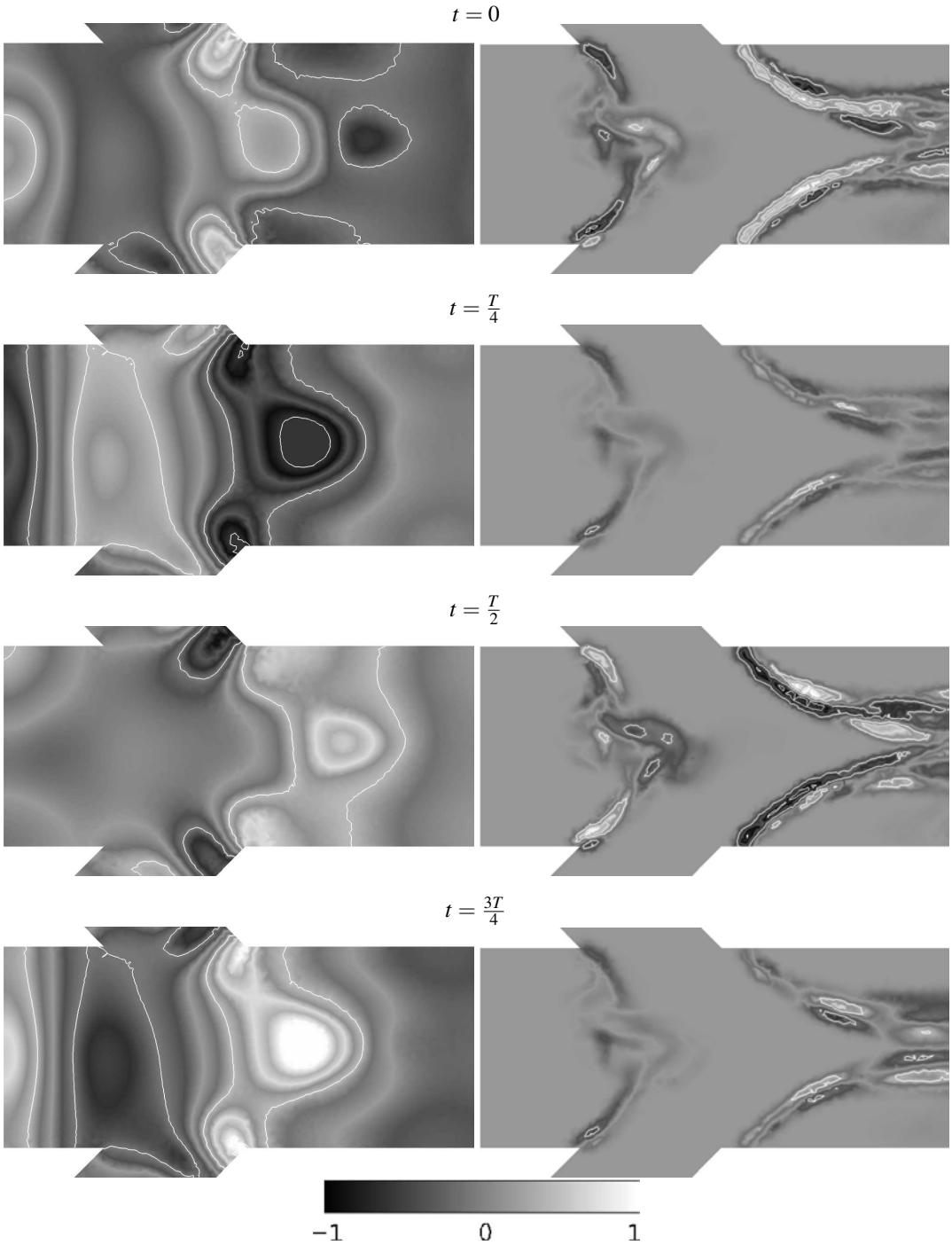


Figure 27: Temporal reconstruction of the pressure fluctuation field (left column) and fluctuating heat release field (right column) obtained by superposition of the two POD modes at $7560\,Hz$. The individual snapshots correspond to the instants $t = 0, \frac{T}{4}, \frac{T}{2}, \frac{3T}{4}$ (from top to bottom) in the period of interest and are given in the vertical symmetry plane of the burner.

advanced diagnostics: Spectral Maps (SM), Helmholtz Solver (HS) and Proper Orthogonal Decomposition (POD). These tools give consistent results and allow to identify five modes ranging from 400 to 11300 Hz appearing for the 0.75 equivalence ratio case. The spectral maps and the Helmholtz solver provide frequencies and structures of all the modes while POD allows to investigate the p' q' coupling mechanisms separately for each mode. A weak longitudinal mode at 400 Hz is identified. The other modes all involve transverse activity. The strongest one corresponds to a transverse structure of the chamber at a frequency of 3750 Hz and which results in a pure production term in the budget equation of the acoustic energy.

Acknowledgments

Numerical simulations and visualizations have been conducted on the computers of the French National Computing Center (CINES) in Montpellier.

Appendices

A. Pairs of modes in POD

An interesting outcome of the POD results for the present LES is the existence of mode pairs at a given frequency. For example, POD exhibits two modes at 7560 Hz. POD also predicts a fixed phase-shift between these two modes ($\frac{\pi}{4}$ for the 7560 Hz modes). The structures of these two modes (in terms of pressure amplitude) are given in Fig. 24 (a) and (b) along with the mode obtained by the superposition of the two modes with a phase of $\frac{\pi}{4}$. This superposed mode is almost exactly the one predicted by HS (Fig. 19(c)) or measured in SM (Fig. 18(c)). This suggests that the individual POD modes of a pair can not be used separately. They must be combined to yield a physical structure.

An additional property of these mode pairs is that they allow to recover the propagating nature of the acoustic waves in the duct inlet. Figure 28 displays reconstructed pressure fields in one of the inlets at four instants. Such information can be obtained by direct animation of the LES field but not from SM or HS.

References

[1] B. Sjoblom, IXth ISABE, pp. 273–281, 1989.

[2] J.M. Samaniego, Etude des instabilités de combustion dans les statoréacteurs, PhD thesis, EM2C, 1992.

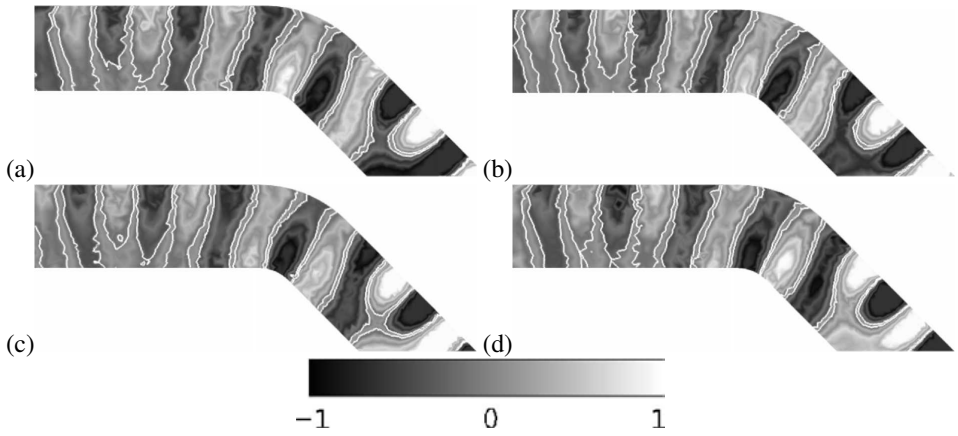


Figure 28: Reconstructed instantaneous pressure fields for the top air inlet duct ((x,z) symmetry plane) obtained with the two $7560\,Hz$ POD modes and the corresponding $\frac{\pi}{4}$ POD phase-shift: (a) at t, (b) at $t+\frac{T}{5}$, (c) at $\frac{2T}{5}$ and (d) at $\frac{3T}{5}$.

[3] D. Rogers and F. Marble, Jet Propulsion 26 (1956) 456.

[4] T. Poinsot and D. Veynante, Theoretical and numerical combustion (R.T. Edwards, 2nd edition., 2005).

[5] K. Mahesh et al., Annual Research Briefs, pp. 115–142, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002.

[6] P. Sagaut, Large Eddy Simulation for incompressible flows : An introduction, 3rd ed. ed. (Springer, 2006).

[7] S. Pope et al., Proc. of the Summer Program, pp. 283–294, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2004.

[8] K. Kailasanath et al., J. Prop. and Power 3 (1987) 525.

[9] K.C. Schadow et al., Combust. sci. and tech. 64 (1989) 167.

[10] K. Yu et al., Johns Hopkins Univ., The 23rd JANNAF Combustion Meeting, pp. 499–508, 1986.

[11] E. Dufour and X. Montazel, 34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, edited by . AIAA-1998-3769, 1988.

[12] S. Menon and E. Fernando, 28th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Paper AIAA-1990-152, Reno, 1990.

[13] K. Yu, A. Trouvé and J. Daily, J. Fluid Mech. 232 (1991) 47.

[14] N.S. Nosseir and S. Behar, AIAA J. 24 (1986) 1752.

[15] P. Cazin, AGARD/PEP Lecture Series n°136 on "Ramjet and Ramrocket Propulsion system for Missiles", 1984.

[16] C. Fureby and F. Grinstein, AIAA J. 37 (1999) 544.

[17] H. Pitsch and L. Duchamp de la Geneste, Proc. Combust. Inst. 29 (2002) 2001 2009.

[18] V. Sankaran and S. Menon, J. Turb. 3 (2002) 011.

[19] J. Janicka and A. Sadiki, Proc. Combust. Inst. 30 (2004) 537.

[20] L. Selle, F. Nicoud and T. Poinsot, AIAA J. 42 (2004) 958.

[21] V. Moureau et al., J. Comput. Phys. 202 (2005) 710.

[22] A. Ristori et al., XVIIth Symposium ISOABE - ISABE Paper-2005-1067, Munich, Germany, 2005.

[23] W. George, Symposium on Near Wall Turbulence, Dubrovnik, Yugoslavia, May 16-20 1988.

[24] P. Holmes, J. Lumley and G. Berkooz, Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry (Cambridge University Press, 1996).

[25] G. Berkooz, P. Holmes and J. Lumley, An. Rev. Fluid Mec. 25 (1993) 539.

[26] Y. Huang, S. Wang and V. Yang, AIAA J. 4 (2006) 724.

[27] C. Rowley, T. Colonius and R. Murray, Physica D 189 (2004) 115.

[28] L. Larchevêque et al., J. Fluid Mech. 516 (2004) 265.

[29] A. Ristori et al., XIVth Symposium ISOABE, Florence, Italy, 1999.

[30] C. Brossard et al., 8ème Congrès Francophone de Vélocimétrie Laser, ORSAY, France, 2002.

[31] G. Heid and A. Ristori, J. Flow Visualization and Image Processing 11 (2004) 1.

[32] G. Heid and A. Ristori, XVIIth ISABE, Munich, Allemagne, 2005.

[33] A.A. Aldama, Filtering Techniques for Turbulent Flow Simulations (New York, Springer, 1990).

[34] B. Vreman, . B.Geurts and H. Kuerten, J. Fluid Mech. 278 (1994) 351.

[35] J.H. Ferziger, AIAA J. 15 (1977) 1261.

[36] J. Smagorinsky, Mon. Weather Rev. 91 (1963) 99.

[37] S.B. Pope, Turbulent flows (Cambridge University Press, 2000).

[38] P. Chassaing, Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur, Toulouse, Polytech, 2000.

[39] F. Nicoud and J. Baggett, Annual Research Briefs, edited by C.f.T. Research, pp. 329–341, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999.

[40] P. Moin et al., Phys. Fluids A 3 (1991) 2746.

[41] G. Erlebracher, Phys. Fluids 238 (1992) 155.

[42] F. Ducros, P. Comte and M. Lesieur, J. Fluid Mech. 326 (1996) 1.

[43] P. Comte, New tools in turbulence modelling. vortices in incompressible les and non-trivial geometries, Springer-Verlag, France, 1996.

[44] D.K. Lilly, Phys. Fluids A4,3 (1992) 633.

[45] M. Germano, J. Fluid Mech. 238 (1992) 325.

[46] S. Ghosal and P. Moin, J. Comput. Phys. 118 (1995) 24 .

[47] C. Meneveau, T. Lund and W. Cabot, J. Fluid Mech. 319 (1996) 353.

[48] O. Colin and M. Rudgyard, J. Comput. Phys. 162 (2000) 338.

[49] F. Williams, Combustion theory (Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985).

[50] T. Butler and P. O'Rourke, 16th Symp. (Int.) on Combustion, pp. 1503 – 1515, The Combustion Institute, 1977.

[51] D. Angelberger et al., Summer Program, pp. 61–82, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.

[52] C. Angelberger, F. Egolfopoulos and D. Veynante, Flow Turb. and Combustion 65 (2000) 205.

[53] J.P. Légier, T. Poinsot and D. Veynante, Summer Program 2000, pp. 157–168, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000.

[54] O. Colin et al., Phys. Fluids 12 (2000) 1843.

[55] C. Martin et al., AIAA J. 44 (2006) 741.

[56] P. Schmitt et al., J. Fluid Mech. 570 (2007) 17.

[57] A. Sengissen et al., In press in Proc. Combust. Inst. 31 (2006).

[58] N. Peters and B. Rogg, Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion SystemsLecture Notes in Physics (Springer Verlag, Heidelberg, 1993).

[59] H. Yamashita, M. Shimada and T. Takeno, Proc. Combust. Inst. 26 (1996) 27 .

[60] T. Schonfeld and T. Poinsot, Annual Research Briefs, pp. 73–84, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999.

[61] L. Selle, Simulation aux grandes échelles des couplages acoustique / combustion dans les turbines à gaz, Phd thesis, INP Toulouse, 2004.

[62] Y. Sommerer et al., J. Turb. 5:1 (2004) 37.

[63] S.B. Pope, New Journal of Physics 6 (2004) 35.

[64] T. Poinsot and D. Haworth, Proc. of the Summer Program, pp. 307–324, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1992.

[65] C. Prière et al., AIAA J. 43 (2005) 1753.

[66] F. Hussain and J. Jeong, J. Fluid Mech. 285 (1995) 69.

[67] F. Marble and S. Candel, J. Sound Vib. 55 (1977) 225.

[68] T. Sattelmayer, International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exhibition, Munich, 2000, ASME paper.

[69] L. Gicquel et al., 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Paper AIAA-2006-151, RENO, USA, 2006.

[70] C. Nottin, Développement des méthodes de simulation numérique des instabilités de combustion dans les foyers prémélangés, PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2000.

[71] F. Marble and J. Broadwell, Project Squid preprint Tech. Rep. TRW-9-PU (1977).

[72] J.H. Citriniti and W. George, J. Fluid Mech. 418 (2000) 137.

[73] A. Kodal et al., Flow Turb. and Combustion 70 (2003) 21.

[74] L. Sirovich, Quarterly of Applied Mathematics 45 (1987) 561.

[75] C. Braud, Étude de la dynamique d'un écoulement à cisaillements croisés : interaction couche de mélange - sillage, PhD thesis, Université de Poitiers, 2003.

[76] D. Durox, T. Schuller and S. Candel, Proc. Comb. Inst. 29 (2002) 69.

[77] E. Fernandes and R. Leandro, Combust. Flame 146 (2006) 674.

Chapitre 11

Impact de la cinétique chimique

La partie précédente a permis de d'évaluer la possibilité du code AVBP à simuler l'écoulement réactif monophasique du statofusée de l'ONERA. En particulier, deux points sont ressortis :

- La présence de hautes fréquences a été identifiée. Celles-ci ont été reliées à des modes acoustiques transverses de la configuration et un couplage fort avec les fluctuations de dégagement de chaleur a été mis en avant. Si l'existence de ces fluctuations ne peut être confirmée par l'expérience, la convection des fluctuations de pression vers les entrées d'air pose la question de l'impédance à imposer à ces entrées. Par conséquent, l'inclusion des diffuseurs d'entrée semble essentielle afin de reproduire au mieux le bilan d'énergie acoustique dans le statofusée.
- La simulation met en avant trois zones de combustion distinctes, en particulier une située dans le dôme. Or les résultats expérimentaux sur le dégagement de radical OH moyen (qui n'étaient alors pas disponibles) ne montrent pas de combustion dans le dôme. La question de l'impact de la cinétique chimique peut alors se poser. En effet, cette zone réactive se situe dans le dôme qui est très riche en carburant et où la limite de flammabilité riche doit avoir un impact fort.

Bien que la puissance des processeurs disponibles pour la SGE ne cesse de croître, certains choix doivent toujours être faits afin d'alléger le coût de calcul pour simuler des applications réelles et toujours plus complexes. Pour les écoulements réactifs, l'utilisation de cinétiques chimiques détaillées est prohibée en raison des nombreux réactifs et réactions qui doivent être résolus et transportés : ceci nécessite un effort informatique conséquent (une équation de transport doit être résolue pour chaque espèce par exemple). Par exemple, un mécanisme de réaction typique de la combustion du propane considère plus d'une centaine de réactions et plus de soixante-dix espèces (Peters & Rogg, 1993). Qui plus est, ces mécanismes chimiques sont caractérisés par des temps caractéristiques chimiques très différents qui mènent à des systèmes très raides. Des codes robustes et précis, mais coûteux, doivent alors être utilisés.

De nouvelles méthodes sont apparues récemment pour réduire les cinétiques détaillées où les paramètres chimiques tels que les taux de réaction et/ou les fractions massiques des espèces sont projetés sur un ensemble de coordonnées, généralement une variable d'avancement et une de mélange. Maas & Pope (1992) ont proposé de dissocier les réactions chimiques d'un mécanisme complet en fonction de leur échelle de temps chimiques : c'est le principe de la méthode ILDM (*Intrinsec Low-Dimensional Manifold* en anglais). Ils font valoir que l'évolution temporelle du système chimique peut être décrite, après un moment donné, par un ensemble réduit de variables qui définit une hyper-surface attractive, appelée variété. Toutefois, si cette méthode est bien adaptée pour des zones chaudes et proche de l'équilibre,

la région de pré-chauffage souffre d'une mauvaise description en raison d'une modification des temps caractéristiques dans cette zone. Une augmentation du nombre de dimensions doit alors être utilisée et la méthode devient coûteuse. Les améliorations de la méthode ont été proposées par Gicquel *et al.* (2000) avec la méthode *Flame-Prolongation of ILDM* (FPI) et par van Oijen *et al.* (2001) avec la méthode *Flamelet-Generated Manifold* (FGM). L'idée est de prolonger la description du système chimique aux zones de basse température. De nombreuses études montrent le potentiel de ces approches (Lu *et al.*, 2004; Singer & Pope, 2004*a*; Fiorina *et al.*, 2005; Gicquel *et al.*, 2000; Domingo *et al.*, 2005; Vreman *et al.*, 2008). Toutefois, de nombreuses limitations subsistent. Les méthodes de chimie tabulée requièrent une table dont la dimension dépend de la configuration étudiée. Sa construction peut donc nécessiter de grandes quantité de mémoire et ainsi affecter la parallélisation du code, même si d'éventuelles améliorations sur ce point précis sont en cours d'étude (Ihme *et al.*, 2008; Ribert *et al.*, 2006; Veynante *et al.*, 2008). En outre, si les tables de prémélange et de diffusion sont les mêmes pour une cinétique chimique à une étape (Vreman *et al.*, 2008), des différences apparaissent lorsque l'on traite plusieurs réactions chimiques, comme l'ont noté Fiorina *et al.* (2005). Il est démontré que les tables de prémélange basées sur des flammes 1D peuvent être utilisées avec succès pour décrire les régimes prémélangés et partiellement prémélangés, mais que pour les flammes de diffusion, des erreurs sont introduites en raison du mélange dans les directions tangentielles aux flammelettes. Ainsi, les configurations où la combustion est partiellement prémélangée (comme le statoréacteur de recherche) nécessitent l'utilisation de deux tables différentes et donc d'un supplément de mémoire. Il est à noter que la sélection de la table à utiliser est réalisée grâce au calcul d'un indice de flamme (Fiorina *et al.*, 2005; Knudsen & Pitsch, 2009). Une autre façon de réduire le coût de calcul a été étudié par Singer & Pope (2004*b*) où les tables sont optimisées et étendues au cours du calcul. Il s'agit de la méthode *In-Situ Adaptive Tabulation* (ISAT). L'utilisation de réseaux neuronaux est une autre façon d'améliorer la taille des tables (Ihme *et al.*, 2008).

L'utilisation de telles tables peut également nécessiter un couplage fort avec le modèle de combustion. La combustion prémélangée peut être typiquement décrite par deux modèles :

- **Le modèle G-equation :** La famme est décrite en utilisant une hypothèse de flammelette, *i.e.*, on suppose que la zone de réaction reste laminaire. Le but est donc de localiser cette flamme. C'est le principe du modèle de G-equation (Williams, 1985; Peters, 2000) où la localisation est réalisée avec une méthode level-set par exemple.
- **Le modèle de flamme épaissie dynamique** : Celui-ci a été décrit en Sec. 4.5. Ce modèle a été construit pour les régimes prémélangés et étendu aux régimes partiellement prémélangés (Légier *et al.*, 2000). Les résultats sont relativement satisfaisant pour les premières et une attention particulière doit être portée aux secondes. Le couplage de TFLES avec la tabulation de la cinétique chimique pose quelques problèmes : il est en effet difficile d'épaissir "proprement" toutes les réactions et la conservation de la masse et de l'énergie demeure un point difficile à obtenir lorsqu'un nombre réduit d'espèces doit être transporté alors que la table est issue d'une chimie complexe.

Aujourd'hui, la plupart des SGE réactives sont donc limitées à de simples schémas chimiques (Ham *et al.*, 2003; James *et al.*, 2006; Moin & Apte, 2006; Boudier *et al.*, 2007) et l'impact de ces cinétiques simples sur la fiabilité des prévisions des SGE est encore une question ouverte.

Dans cette partie, on présente la simulation de l'écoulement monophasique correspondant au point de fonctionnement A ($\phi = 0.75$) avec les deux schémas cinétiques simplifiés à une étape avec et sans ajustement de la constante préexponentielle et ceci pour la configuration complète du statofusée. Les champs moyens sont tout d'abord comparés, en particulier les structures principales de l'écoulement.

Les profils de vitesse dans la chambre de combustion sont ensuite comparés aux résultats *PIV* tirés de l'expérience dans le plan Z=0 mm (Reichstadt *et al.*, 2007). La comparaison des résultats instantannés spatiaux et temporels permettent de mettre en avant le mauvais comportement de la simulation à l'aide du schéma sans PEA où des hautes fréquences caractéristiques de l'acoustique de la chambre sont excitées, fréquences atténuées avec la simulation avec PEA. Cette partie a fait l'objet d'un article soumis au journal Combustion&Flame.

Analysis of unsteady reacting flows and impact of chemistry description in Large Eddy Simulations of side-dump ramjet combustors

A. Roux[a,*], L.Y.M. Gicquel[a,*], S. Reichstadt[b], N. Bertier[b], G. Staffelbach[a], F. Vuillot[b], T.J. Poinsot[c]

[a] *CERFACS, 42 Av. G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France*

[b] *ONERA, BP 72, 29 avenue de la division Leclerc, 92322 Châtillon Cedex, France*

[c] *IMFT, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France*

Abstract

Among all the undesired phenomena observed in ramjet combustors, combustion instabilities are of foremost importance and predicting them using Large Eddy Simulation (LES) is an active reasearch field. While acoustics are naturally captured by compressible LES provided that the proper boundary conditions are applied, combustion/chemistry modelling remains a critical issue and its impact on numerical predictions must still be assessed for complex applications. To do so, two different ramjet LES's are compared here. The first simulation is based on a standard one-step chemistry known to overestimate the laminar flame speed in fuel rich conditions. The second simulation uses the same scheme but introduces a correction of reaction rates for rich flames to match a detailed mechanism provided by Peters [1]. Even though the two chemical schemes are very similar and very few points burn in rich regimes, distinct limit-cycles are obtained with LES depending on which scheme is used. Results obtained with the standard one-step chemistry exhibit high frequency self-sustained oscillations. Multiple flame fronts are stabilized in the vicinity of the shear layer developing at the exit of the air inlets.

*Corresponding author. Tel: +33-5-61-19-30-46; fax: +33-5-61-19-30-00.
Email addresses: lgicquel@cerfacs.fr (L.Y.M. Gicquel)

When compared to the experiment, the fitted one-step scheme yields better predictions than the standard scheme. With the fitted scheme, the flame is detached from the air inlets and stabilizes in the regions identified in the experiment [2, 3, 4, 5]. LES and experiments exhibit all main low-frequency modes including the first longitudinal acoustic mode. The high frequencies excited with the standard scheme are damped with the fitted scheme. The chemical scheme is found, for this ramjet burner, to have a strong impact on the predicted stability: approximate chemical schemes even in a limited range of equivalence ratio can lead to the occurence of non-physical combustion oscillations.

Key words: Large Eddy Simulation, Combustion, Acoustic, Ramjet, Chemical scheme

1. Introduction

Large Eddy Simulation (LES) is a very successful tool to describe turbulence and its interactions with other physical phenomena such as mixing or combustion in experimental or industrial configurations [6, 7, 8]. LES solves the filtered Navier-Stokes Equations (NSE) to describe the larger scales of turbulent flows while smaller scale effects are modelled. It has become standard to study turbulent reacting flows in modern combustion devices such as aeronautical gas turbines or rocket engines [9, 10, 11, 12, 13, 14].

Recent numerical predictions obtained by LES for turbulent reacting flows [15, 16, 17, 18] underline the power of the approach for laboratory and industry like configurations. Most recent LES's have focused on gas turbine configurations because these systems exhibit a variety of difficult problems that are well adressed through that fully unsteady approach: ignition, quenching, thermo-acoustic instabilities... Ramjets have received less attention since the pioneering work of Kailasanath [19]. Only a few studies have been devoted specifically to LES of ramjets [19, 20, 21, 22, 23]. This type of combustor exhibits significant differences compared to gas turbine flows: the velocities are much higher, combustion is not stabilized by swirl, a choked nozzle terminates the chamber. Low-frequency instabilities are also present and must be avoided to prevent extinction or even destruction of the configuration. Most importantly, chem-

istry may play a determining role due to the absence of flame holder in the combustion chamber.

Although the speed of computers continuously increases, some choices have to be made in order to spare computational cost to handle real applications and their inherent complexities. For reacting flows, using directly complex chemical schemes is prohibited because of the numerous reactions and reactants which induce large computing efforts. Moreover, these chemical schemes are often very stiff and require accurate and expensive solvers. New methodologies allow to reduce the cost of complex chemical schemes by projection onto a reduced set of coordinates, typically a progress variable and a mixture fraction, (Intrinsic Low-Dimensional Manifold -ILDM-, Flame-Prolongation of ILDM -FPI- or Flamelet-Generated Manifold -FGM- [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30], In-Situ Adaptive Tabulation -ISAT- [31]). Such tabulation methods require large amounts of memory space and this can affect parallelization of the code even if potential improvements on that specific point are currently being studied [32]. As of today, many reactive LES's are thus limited to using simple chemical schemes [9, 10, 8, 11, 12, 13, 14] and the impact of such simple schemes on the reliability of LES predictions is still an open issue. In a first attempt to address this issue, we limit our study to the context of thermo-acoustic instabilities in ramjet burners. For such a problem, only heat release rate and acoustics are believed to determine the operating limit-cycle, gas composition having a limited impact which justifies the use of simple chemical schemes.

We present here the application of LES to a side-dump ramjet for wich experimental data provided by the French Aerospace Lab. (ONERA) is available for different non-reacting and reacting conditions [2]. The device burns gaseous propane fed through the head-end by two jets (global equivalence ratio of 0.75). Contrarily to previous computations on the same burner [21, 33], the computational domain treats the entire combustion chamber: the propane injection, the choked air intakes with square cross sections and a choked nozzle prior to the exit. Note that the configuration is acoustically closed which allows to compare the different frequencies, found in the experiment and the LES, in a rigourous manner. Two single-step chemical mechanisms

will be used in the LES and the impact of these schemes on the mean and unsteady structure of the flame will be studied.

2. Experimental facility

In 1995, ONERA launched a specific program named "Research Ramjet Program" to understand the different processes appearing in such a configuration [2, 3, 4, 5, 22]. In this side-dump ramjet combustor, Particle Doppler Anemometer (PDA), Laser Doppler Velocimetry (LDV) and Particle Imagery Velocity (PIV) measurements were performed to provide mean and oscillating velocities. A first set of experiments allows to investigate the non-reacting flow and the mixing by studying the influence of equivalence ratio on fuel penetration. Reacting flow conditions are studied thanks to Particle Laser Induced Fluorescence (PLIF) based on OH or CH emissions. A high-speed camera (up to $2,000$ Hz) gives a view of the flame whereas microphones characterize oscillations whithin the configuration. Several flight conditions are evaluated: inlet temperature and mass flow rate change from 520 K, 2.9 kg/s to 750 K, 0.9 kg/s. A range of equivalence ratio ϕ from 0.35 to 1.0 has been investigated.

The burner is composed of two air inlets beginning with choked nozzles. They feed the main combustion chamber through 100x100 mm^2 rectangular ducts. Fuel, gaseous propane, is injected by eight holes at 350 K into a pre-injection chamber. This box then feeds the head-end region through two 11 mm diameter circular tubes. The combustion chamber is $1,261$ mm in length and opens onto a choked nozzle which has a throat section of 55.8x100 mm^2.

3. Numerical approach

3.1. Governing equations and LES models

LES of reacting flows involves the spatial Favre filtering operation that reduces for spatially, temporally invariant and localised filter functions [34] to:

$$\widetilde{f(\mathbf{x},t)} = \frac{1}{\overline{\rho(\mathbf{x},t)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{x}',t)\, f(\mathbf{x}',t)\, G(\mathbf{x}'-\mathbf{x})\, d\mathbf{x}', \tag{1}$$

where G denotes the filter function.

In the mathematical description of compressible turbulent flows with chemical reactions and species transport, the primary variables are the species volumic mass fractions $\rho_\alpha(\mathbf{x},t)$, the velocity vector $u_i(\mathbf{x},t)$, the total energy $e_t(\mathbf{x},t) \equiv e_s + 1/2\ u_i u_i$ and the density $\rho(\mathbf{x},t) = \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha(\mathbf{x},t)$.

The multispecies fluid follows the ideal gas law, $p = \rho\, r\, T$ and $e_s = \int_0^T C_p\, dT - p/\rho$, where e_s is the mixture sensible energy, T the temperature, C_p the fluid heat capacity at constant pressure and r is the mixture gas constant. The LES solver takes into account changes of heat capacity with temperature and composition using tabulated values of individual species heat capacities. The viscous stress tensor, the heat diffusion vector and the species molecular transport use classical gradient approaches. The fluid viscosity follows Sutherland's law, the heat diffusion coefficient follows Fourier's law, and the species diffusion coefficients are obtained using a species Schmidt number along with the Hirschfelder Curtis approximation [6] and velocity corrections for mass conservation. The application of the filtering operation to the instantaneous set of compressible Navier-Stokes transport equations with chemical reactions yields the LES transport equations [6] which contain so-called Sub-Grid Scale (SGS) quantities that need modelling [35, 36]. The unresolved SGS stress tensor $\overline{\tau_{ij}}^t$, is modelled using the Boussinesq assumption [37, 38, 39] :

$$\overline{\tau_{ij}}^t - \frac{1}{3}\,\overline{\tau_{kk}}^t\,\delta_{ij} = -2\,\overline{\rho}\,\nu_t\,\widetilde{S}_{ij}, \text{ with, } \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\,\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij}. \tag{2}$$

In Eq. (2), $\widetilde{S}_{ij}$ is the resolved strain rate tensor and ν_t is the SGS turbulent viscosity. The Wall Adapting Linear Eddy (WALE) model [40] is chosen to model the SGS viscosity:

$$\nu_t = (C_w\Delta)^2 \frac{(s^d_{ij}s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s^d_{ij}s^d_{ij})^{5/4}}, \text{ with } s^d_{ij} = \frac{1}{2}\left(\widetilde{g_{ij}}^2 + \widetilde{g_{ji}}^2\right) + \frac{1}{3}\widetilde{g_{kk}}^2\delta_{ij} \tag{3}$$

In Eq. (3), Δ denotes the filter characteristic length (approximated by the cubic-root of the cell volume), C_w is a model constant equal to 0.49 and $\widetilde{g_{ij}}$ is the resolved velocity gradient.

The SGS species flux $\overline{J_i^\alpha}^t$ and the SGS energy flux $\overline{q_i}^t$ are respectively modelled using a species SGS turbulent diffusivity $D_t^\alpha = \nu_t/Sc_t^\alpha$, where Sc_t^α is the turbulent Schmidt number ($Sc_t^\alpha = 0.7$ for all α). The heat conductivity is obtained from ν_t by $\lambda_t = \overline{\rho}\,\nu_t\,C_p/Pr_t$ where Pr_t is a constant turbulent Prandtl number:

$$\overline{J_i^\alpha}^t = -\overline{\rho}D_t^\alpha\,\frac{W_\alpha}{W}\,\frac{\partial\widetilde{X}_\alpha}{\partial x_i} + \overline{\rho}\widetilde{Y_\alpha}\,V_i^c \text{ and } \overline{q_i}^t = -\lambda_t\,\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{N}\overline{J_i^\alpha}^t\,\widetilde{h}_s^\alpha. \tag{4}$$

In Eq. (4), the mixture molecular weight W and the species molecular weight W_α can be combined with the species mass fraction to yield the expression for the molar fraction of species α: $X_\alpha = Y_\alpha W/W_\alpha$. V_i^c is the diffusion correction velocity resulting from the Hirschfelder Curtis approximation [6] and $\widetilde{T}$ is the Favre filtered temperature which satisfies the modified filtered state equation $\overline{p} = \overline{\rho}\,r\,\widetilde{T}$ [41, 42, 43, 44]. Finally, $\widetilde{h}_s^\alpha$ stands for the enthalpy of species α. Although the performances of the closures could be improved through the use of a dynamic formulation [41, 45, 46, 47, 48] they are considered sufficient to address the present flow configuration.

3.2. Combustion modelling

SGS combustion terms are modelled using the Dynamic Thickened Flame (DTF) model [49]. Following the theory of laminar premixed flames [50], the flame speed S_L^0 and the flame thickness δ_L^0 may be expressed as:

$$S_L^0 \propto \sqrt{\lambda\,A} \quad \text{and} \quad \delta_L^0 \propto \frac{\lambda}{S_L^0} = \sqrt{\frac{\lambda}{A}}, \tag{5}$$

where λ is the thermal diffusivity and A the pre-exponential constant. Increasing the thermal diffusivity by a factor F, the flame speed is kept unchanged if the pre-exponential factor is decreased by the same factor [51]. This operation leads to a flame thickness which is multiplied by F and easily resolved on a coarser mesh. Additional information needs however to be supplied so as to properly reproduce the effect of the subgrid-scale interaction between turbulence and chemistry [52, 53, 54]. This is the intent of the so-called efficiency function E [55]. When thickening is applied everywhere in the flow, the model is limited to fully premixed combustion. To compute partially premixed or non-premixed flames [6], a modified version of the Thickened Flame model (DTF) is used here [54, 56, 57].

With the DTF model, the SGS fluxes are modified to become:

$$\overline{J_i^\alpha}^t = -(1-S)\,\overline{\rho} D_t^\alpha \frac{W_\alpha}{W}\frac{\partial \widetilde{X}_\alpha}{\partial x_i} + \overline{\rho}\,\widetilde{Y_\alpha}\,V_i^c \text{ and } \overline{q_i}^t = -(1-S)\,\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{N} \overline{J_i^\alpha}^t\,\widetilde{h}_s^\alpha \qquad (6)$$

where S is a sensor detecting reaction zones. The local thickening factor depends on the local mesh size: typically thickening must ensure that enough points are present within the flame zone and the thickening factor F is given by:

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\,S \quad \text{and} \quad F_{max} = \frac{N_c}{\Delta_x}\delta_L^0, \qquad (7)$$

where N_c is the number of points used to resolve the flame front (typically $N_c = 5$ to 10).

Although this approach is still being developed and further validations are needed, its ease of implementation and it success in prior applications [56, 57, 58] assert its suitability for the problem addressed in this work. Aside from these observations, such a model retains valuable properties which make it suitable for complex applications:

- when used along with Arrhenius type chemical schemes, finite rate chemical effects are retained (ignition, extinction...),
- the balance between chemistry and diffusive effects is preserved within the limit of validity of the efficiency function,

- as such it will produce premixed, partially premixed and diffusion flames, the former still needing in-depth validation in the context of turbulent diffusion flames.

3.3. Numerical schemes

The parallel LES code [59, 60, 61] solves the full compressible Navier-Stokes equations using a cell-vertex approximation. The numerical integration uses Taylor-Galerkin weighted residual central distribution schemes. This explicit scheme, which provides third-order accuracy on hybrid meshes, is particularly adequate for low-dissipation requirements of LES applications [55].

Since the ramjet flow contains choked nozzles, specific shock capturing techniques are needed for a centered numerical LES scheme to preserve the positivity of the solution in regions where strong gradients exist. There, the methodology of Cook and Cabot [62] is used to thicken the shock front by introducing a hyperviscosity β in the viscous stress tensor $\overline{\tau_{ij}}$ equivalent to an additional pressure term,

$$\overline{\tau_{ij}}^{modified} = (\beta - \frac{2}{3}\mu)\ \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\ +\ 2\ \mu\ \widetilde{S}_{ij}, \tag{8}$$

where μ is the dynamic viscosity and $\widetilde{S}_{ij}$ is the symmetric strain rate tensor. The bulk viscosity, β, is modelled as,

$$\beta = C(\Delta x)^4 \nabla^2 \|\widetilde{S}\| \text{ and } \|\widetilde{S}\| = \left(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ji}\right)^{1/2}, \tag{9}$$

where C is fixed to 5 according to [62]. This viscosity acts on very sharp velocity gradients characterizing shocks but goes back to zero where the velocity evolves smoothly.

3.4. Chemistry model

Two simplified one-step chemical schemes are tested. They both take into account five species (C_3H_8, O_2, CO_2, H_2O and N_2) and are described by the global one-step irreversible reaction,

$$C_3H_8 + 5\,O_2 \longrightarrow 3\,CO_2 + 4\,H_2O. \tag{10}$$

The reaction rate for this reaction reads,

$$q = A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}}\right)^{0.856} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.503} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \tag{11}$$

with a pre-exponential factor $A = 3.2916 \times 10^{10}$ [cgs] and an activation energy $\mathrm{E}_a = 31.126$ cal.mol^{-1}. This first scheme will be called in the following "standard one-step scheme".

Figure 1 shows the comparison between the detailed chemistry given by Peters [1] and the standard one-step scheme for a given range of equivalence ratio. The latter over-estimates flame speeds for large values of the equivalence ratio (Fig. 1). To circumvent this well-known and improper behaviour of single-step schemes, a modified simplified scheme (named "fitted one-step scheme") is introduced.

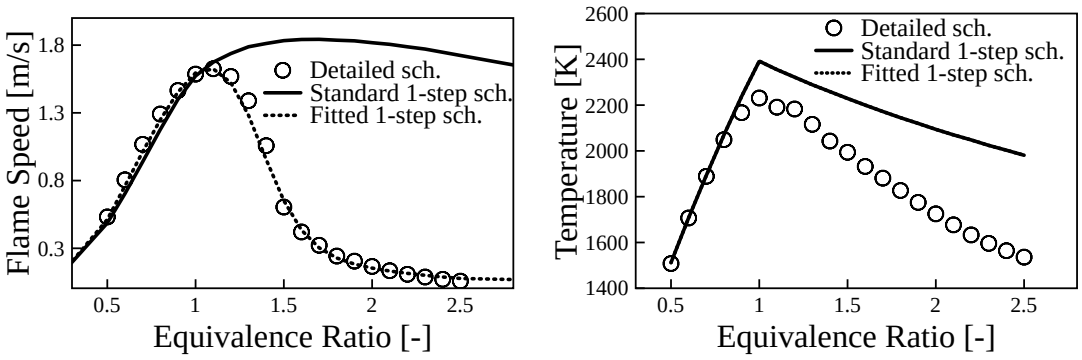


Figure 1: Laminar flame speed and adiabatic flame temperature for the one-step chemical schemes used in LES.

For this fitted one-step scheme, the pre-exponential A is adjusted to yield laminar flame speeds over an extended range of equivalence ratio ϕ so that Eq.(11) can be rewritten as,

$$q = f(\phi)\, A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}}\right)^{0.856} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.503} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \tag{12}$$

where,

$$f(\phi) \;=\; \tfrac{1}{2}\left[1+\tanh\left(\tfrac{0.8-\phi}{1.5}\right)\right] \;+\; \tfrac{2.11}{4}\left[1+\tanh\left(\tfrac{\phi-0.11}{0.2}\right)\right]\left[1+\tanh\left(\tfrac{1.355-\phi}{0.24}\right)\right]. \tag{13}$$

Note that adiabatic flame temperatures are not modified by $f(\phi)$ and are still over-estimated with an error of 7% at $\phi = 1$. Finally, for the standard one-step scheme, Schmidt numbers are constant but differ from one species to another while the fitted one-step scheme uses equal Schmidt numbers for all species to evaluate the local mixture fraction and the local equivalence ratio ϕ required in Eq.(13) [63].

4. Operating point and boundary conditions

The computed case imposes an air mass flow rate of 0.9 kg/s and a stagnation temperature of 750 K. The associated Reynolds number, based on the inlet duct conditions, is $Re = 3.3 \times 10^5$ and the global equivalence ratio ϕ=0.75.

The computational domain contains about 5×10^6 tetrahedra (around 9×10^5 nodes). The two air inlets are 1 m long with a square section of 50 mm^2 and the main chamber is 1.261 m long with a square section of 100 mm^2.

Choked nozzles and the head-end of the chamber have been locally refined to ensure good resolution of sharp gradients and flame front, in accordance with the requirements for true LES [38]. The minimum grid size is $\Delta = 1$ mm. The acoustic CFL number is 0.7 yielding a corresponding time step of about $\Delta t = 3 \times 10^{-7}$ s. As both inlets and outlet are choked (Tab. 1), all uncertainties on the acoustic behaviour of the configuration are avoided. Nozzle walls are handled as slip walls whereas adiabatic laws of the wall are applied on all other walls. Typical y^+ values for zones of interest stand between 50 and 100. Note that the adiabatic wall hypothesis can be discussed since water cooling is applied during the experiment. The maximum gas temperature is about $2,400$ K in the combustion chamber while walls are cooled with water at 300 K. Wall heat fluxes could have been imposed to mimic this phenomenon but our primary goal is here to investigate the influence of the kinetic scheme on LES predictions.

Name	Boundary Type	Imposed Quantities
Air Inlet	Non-reflecting Inlet	$\dot{Q}_{air} = 0.9\, kg.s^{-1}$, $T_i = 750\, K$
Fuel Inlet	Non-reflecting Inlet	$\dot{Q}_{C_3H_8} = 0.044\, kg.s^{-1}$, $T_i = 350\, K$
Outlet	Supersonic Inlet	-
Nozzle's walls	Slip adiabatic	-
Other walls	No-slip adiabatic	-

Table 1: Boundary Conditions as used in the LES simulations.

5. Results

LES results obtained from the simulations with the standard one-step scheme and the fitted one-step scheme are first studied to extract the main flow features (Reynolds average quantities). The mean flow predictions are then gauged against experiment by comparing mean velocity components in the median plane ($Z = 0$ mm). Subsection 5.2 presents the instantaneous flow behaviour and focuses on the combustion processes obtained with the two chemical schemes. Limit-cycles are compared based on the main oscillating modes with special attention devoted to the fact that the simulation based on the standard one-step scheme exhibits high frequencies that are damped in the fitted one-step simulation. The final section analyses the reasons leading to the differences between the two chemical schemes.

5.1. Flow topology of the mean fields

The main flow structures have been computed using ≈ 100 ms of simulation.

Figure 3 depicts the mean (temporally averaged) structures of the flow inside the combustion chamber obtained by LES for the two chemical schemes. For both cases, the impingement of the

counter-flowing jets defines two regions in the burner (Fig. 2): the "dome zone" or "head-end" of the chamber which is located in the main rectangular chamber upstream of the air feeding jets and corresponds to the location where fuel is injected and partly mixes with air; the "main zone" downstream of the air jets is the remaining part of the main chamber. The impacting jets are deflected against the lateral walls and creates strong vortical structures at each corner of the configuration. Such flow features are found in both simulations along with a strong recirculation zone inside the head-end of the chamber partly fed by the jet-on-jet interaction and emptied by the four corner vortices. Vortex-criterion [64] reveals the presence of these four corner vortices that allow convection of a mixture of propane and air downstream the configuration (Fig. 3). Such a criterion also reveals the detachment regions of the streams in the two air inlets. This phenomenon is increased in the standard one-step scheme simulation. The relative position of the high-velocity sheet issued by the two air inlet jets meeting in the main chamber differs for the two simulations: the sheet spreads sooner (in the vertical direction) with the standard one-step scheme simulation and interacts strongly with the corner vortices. In the standard one-step scheme simulation, the four corner vortices curve quickly toward the central axis of the chamber.

[H]

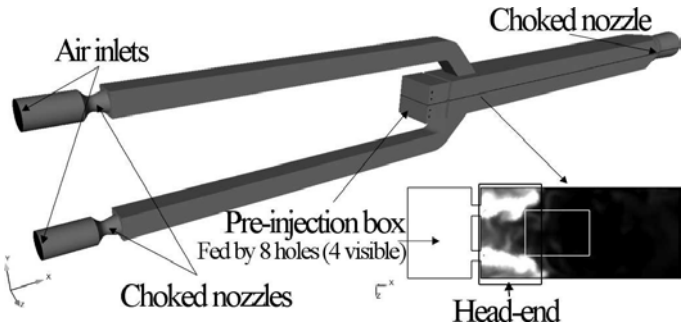
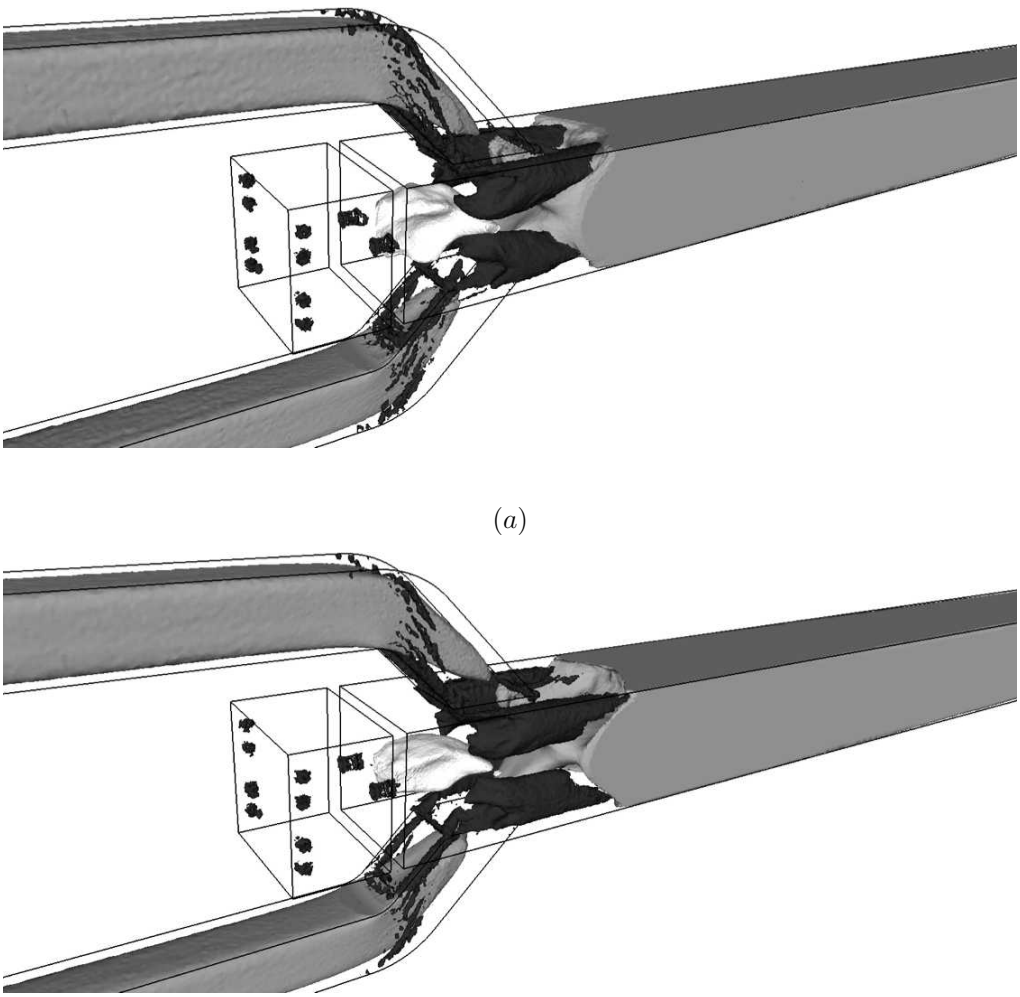


Figure 2: Sketch of the ONERA's "Research Ramjet".

Figure 4 shows the mean heat release weighted by the temperature and integrated along the orthogonal direction for the two simulations (Fig. 4(b) & (c)) to compare with experimental



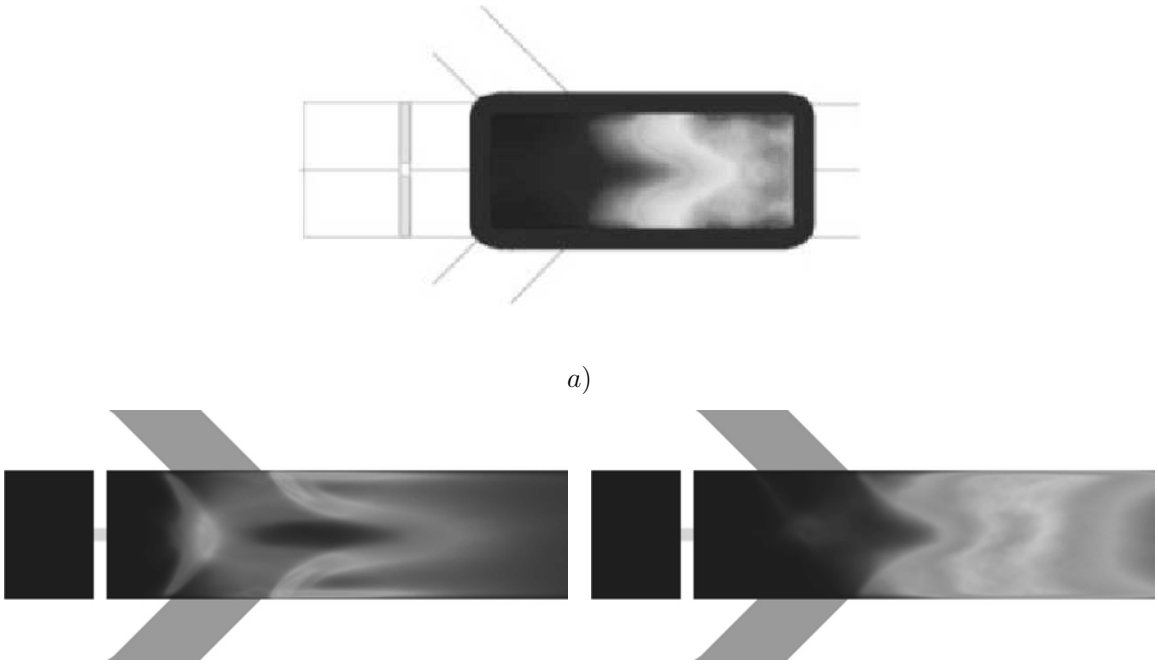
(a)

(b)

Figure 3: Visualization of the main mean flow structures: a) standard one-step scheme, b) fitted one-step scheme. The "dome" recirculation zone ($u = 0$) is shown in white. The light gray iso-surfaces correspond to the axial velocity value of $0.75\,U_{bulk}$, and the Q-criterion is shown in black ($0.9\,U_{bulk}^2/H^2$, with H the main chamber height) to highlight the four corner vortices.

PLIF data. Qualitatively, the patterns revealed from the experiment (Fig. 4 (a)) are similar to the ones coming from the fitted one-step scheme simulation. The standard one-step simulation

reproduces the patterns correctly in the downstream part of the chamber but differs in the head-end. In the experiment and contrarily to the one-step simulation, the head-end does not participate actively to combustion (or in that case only sporadically) and the flame is stabilized in the main chamber and away from the air inlets. Such an observation stresses the importance of chemistry modelling for this configuration even to predict the mean flow pattern. A primary reason stems from the high equivalence ratio found in the head-end of the chamber. For the standard one-step chemistry scheme, combustion proceeds even for high equivalence ratios. Because of the rich side corrections introduced in the fitted one-step scheme, flow speeds in the head-end zone are large enough to prevent combustion in this region, as observed experimentally.



a)

b) *c*)

Figure 4: Integration of heat release weighted by temperature along the orthogonal direction: a) experimental view, b) standard one-step scheme, c) fitted one-step scheme. Arbitrary levels (from black to white).

The impact of chemical schemes on the simulation results can also be observed on Fig. 5 which summarizes the differences between both LES predictions in the $Z = 0$ mm plane for a) the axial and b) the vertical components of the mean velocity vector non-dimensionalized by the air inlet bulk velocity, c) the mean heat release and d) temperature. The velocity field in the head-end of the chamber is similar for both simulations, the recirculation zone being mainly controlled by the detachment in the air inlet ducts. Corner vortices are highlighted by the stronger vertical velocity downstream of the air inlets. Their intensity and relative behaviour differ slightly in the two LES's. For the standard one-step LES, the corner vortices' intensity is larger than in the second LES using the fitted one-step scheme and vortices curve inward the combustion chamber (see also Fig. 3). More noticeable differences between the two predictions are observed for quantities directly linked to combustion. Heat release fields illustrate the different positions of the reacting fronts. For the standard one-step scheme (Fig. 5(c), bottom part), the first front is localized in the vicinity of the shear layer induced by the two air inlets near the top and bottom combustor walls and a second reacting front anchors to the recirculation zone in the head-end. A third and final front may be identified at the onset of the corner vortices (not visualized here). Such flames are not identified with the fitted one-step scheme. With this chemical model a unique mean reacting zone is found downstream of the air jet inlets and away from the jet shear layers (Fig. 5(c), top part).

Comparisons of LES and experimental velocity fields measured by ONERA (PIV) at different locations within the combustor and along different directions are displayed on Fig. 6. Figure 7 displays the axial evolution of the mean axial component of the velocity vector along the symmetry axis of the chamber. In the head-end of the chamber ($X < 180$ mm), the two LES's give similar results except for the minimum value of the axial velocity which is smaller for the standard one-step scheme. Note also that the extent of the recirculation zone seems less pronounced in the experiment. However low-frequency oscillations present in the chamber may affect the LES average values in this zone as discussed in the following. Discrepancies between experiment and LES appear in the downstream part of the chamber after the exit of the air inlets where the low velocity zones localized around the jet-on-jet impingement region differ.

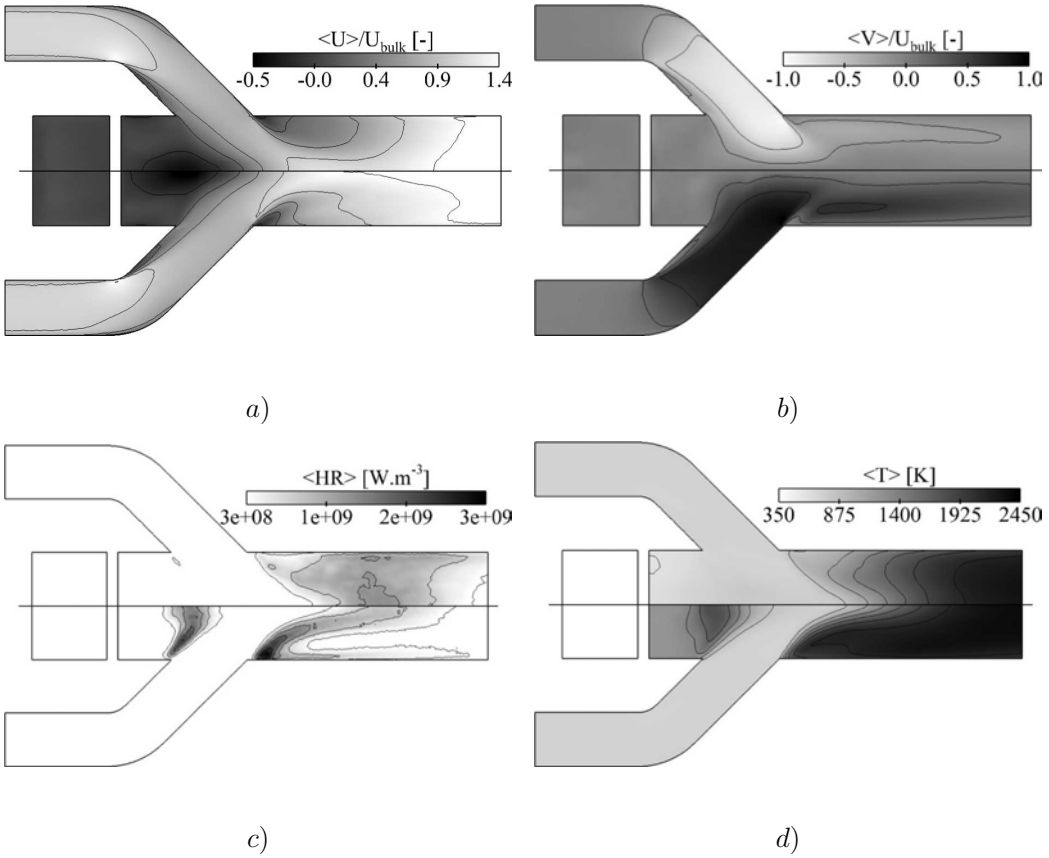


Figure 5: Mean flow quantities in the $Z = 0$ mm plane. For each sub-figure, top: fitted one-step scheme and bottom: standard one-step scheme. a) mean axial velocity, b) mean vertical velocity, c) mean rate of heat release and d) mean temperature field.

In this part of the burner the mean flow is dictated by the jet-on-jet interactions and their respective influences on the corner vortices are different in both LES henceforth impacting the mean axial velocity profile as seen on Fig. 7. Despite such downstream differences, the position of the stagnation point is well-predicted by both LES. Finally, both experimental trends and slopes downstream of the chamber ($240 < X < 370$ mm) are in good agreement with the fitted one-step scheme simulation. For the standard one-step scheme results, the axial velocity reaches its maximum at the end of the air inlet and is delayed further downstream in the fitted

one-step scheme simulation. Figures 8 and 9 compare mean experimental results at different axial positions ($X = 150$ mm, $X = 180$ mm, $X = 260$ mm, $X = 300$ mm and $X = 340$ mm) along the Z-axis: *i.e.* one cut in the head-end of the chamber, one at the beginning and at the end of the opening of the air inlets and the last two downstream of the main chamber duct. Overall, LES predictions are in good agreement with the experimental data in the head-end of the chamber. Downstream of the air inlet, LES profiles agree with measurements even if the levels of the axial velocity component with the standard one-step scheme simulation are over-estimated.

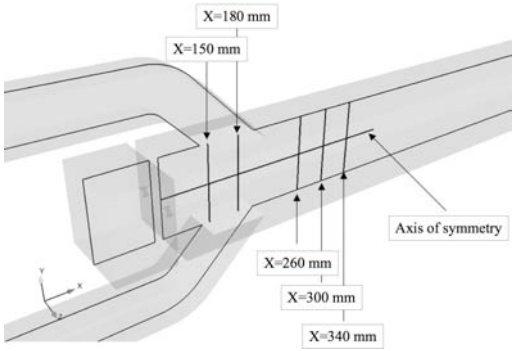


Figure 6: Position of the different profiles extracted for comparison against the experiment. The $Z = 0$ mm plane appears. The axis of symmetry is defined by $Y = Z = 0$ mm.

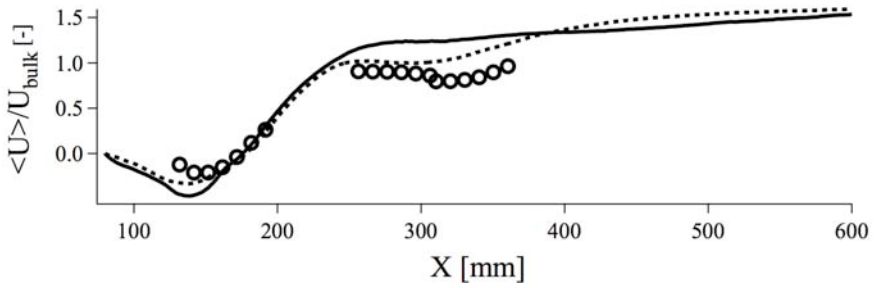


Figure 7: Mean axial component of the velocity vector non-dimensionalized by U_{bulk} along the axis of symmetry : $\circ$, experiment; $-$, standard one-step scheme and $- -$, fitted one-step scheme.

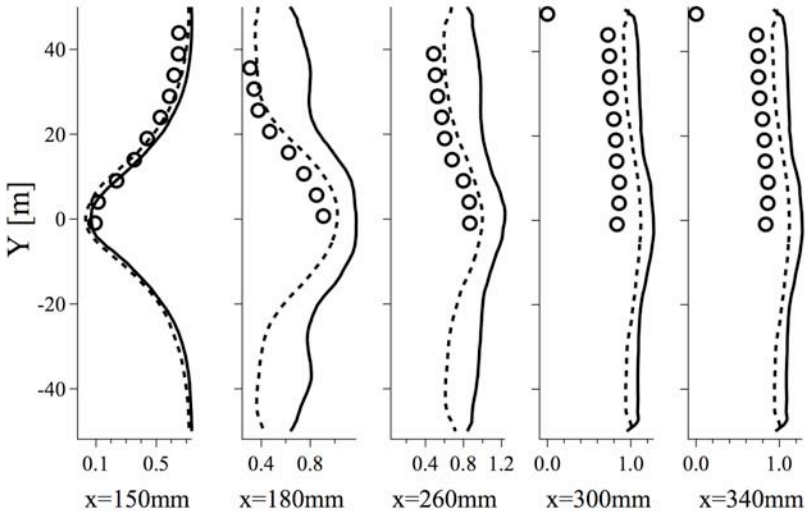


Figure 8: Mean axial component of the velocity vector along the Z-axis non-dimensionalized by U_{bulk}: $\circ$, experiment; $-$, standard one-step scheme and $- -$, fitted one-step scheme.

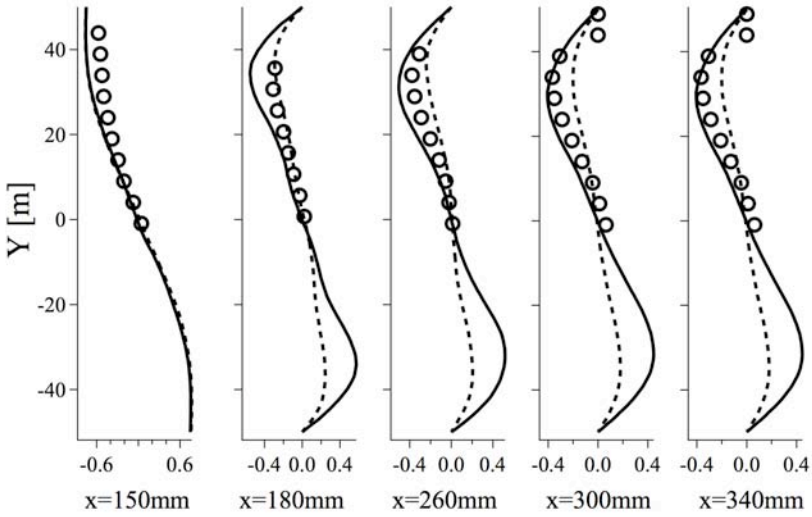


Figure 9: Mean vertical component of the velocity vector along the Z-axis non-dimensionalized by U_{bulk}: $\circ$, experiment; $-$, standard one-step scheme and $- -$, fitted one-step scheme.

Similar comparisons for fluctuating quantities are shown on Figs. 10 and 11. Trends are well captured by both simulations and good agreement is found when comparing experimental data and the standard one-step scheme. Differences with the fitted one-step scheme are observed but can be partly explained by a potential lack of convergence of these statistics inferred by a different energy content. Indeed, with this scheme the LES flame undergoes a low-frequency flapping motion with large variations in the flame position upstream and downstream of the air inlets as detailed below.

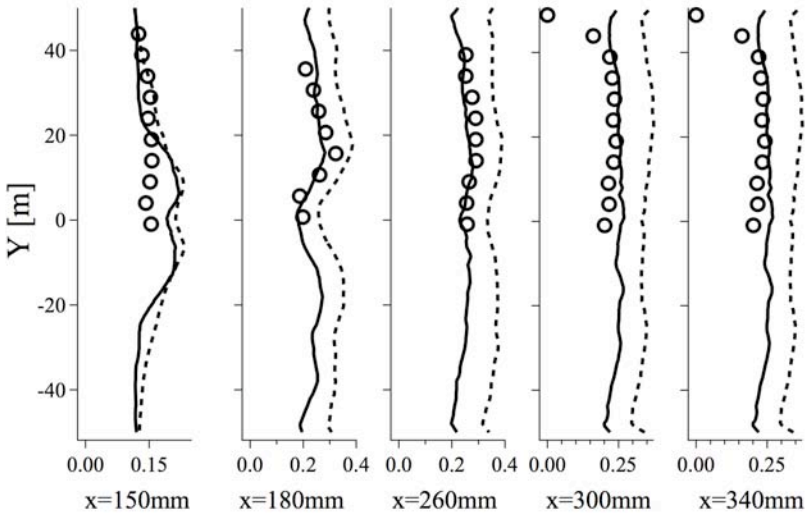


Figure 10: Standard deviation of axial component of the velocity vector along the Z-axis non-dimensionalized by U_{bulk}: $\circ$, experiment; $-$, standard one-step scheme and $- -$, fitted one-step scheme.

5.2. Unsteady activity

Since the flame positions predicted by the two LES are different, the thermo-acoustic coupling mechanisms can also differ and are investigated here. Four main frequencies (Tab. 2) are detected in the experiment (which has a resolution of $5,000$ Hz). Experimentalists have identified the nature of each mode as follows:

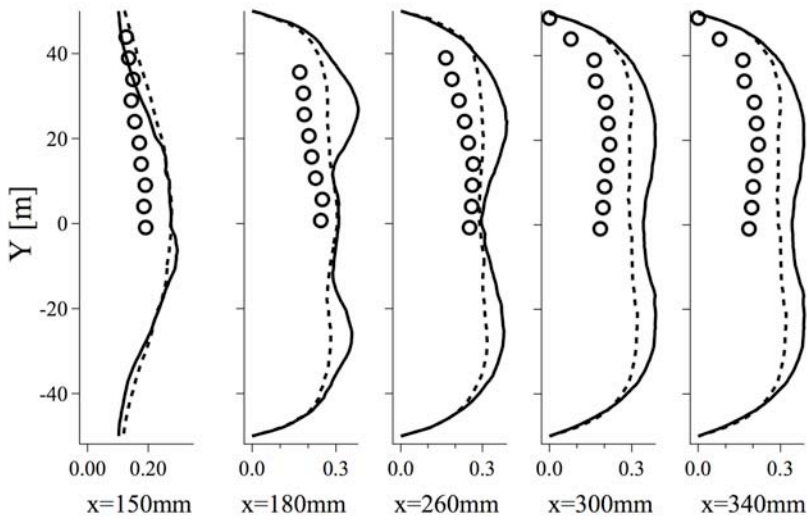


Figure 11: Standard deviation of vertical component of the velocity vector along the Z-axis non-dimensionalized by U_{bulk}: $\circ$, experiment; $-$, standard one-step scheme and $- -$, fitted one-step scheme.

- **Mode 1** ($\approx$ 105 Hz) dominates in the head-end of the chamber and is *a priori* linked with the shedding of reactive pockets from this region to the main chamber duct,
- **Mode 2** ($\approx$ 220 Hz) is indicated as a probable harmonic of the first frequency,
- **Mode 3** ($\approx 300 - 380$ Hz) corresponds to the first longitudinal acoustic mode of the configuration including both air inlets and the combustion chamber.
- **Mode 4** ($\approx$ 960 Hz) is of unknown nature.

Figure 12 displays the Fast Fourier Transforms (FFT) of LES pressure signals for a probe located in the upper part of the chamber at $(X, Y, Z) = (230, -30, 30)$ mm. The frequency resolution for the two computations is $\approx$ 16 Hz. The two simulations exhibit significant differences: the standard one-step scheme simulation is driven by high-frequency instabilities whereas the fitted one-step scheme prediction exhibits a low-frequency activity. Some of these low frequencies also appear in the standard one-step LES. The simulation with the fitted one-step scheme

Mode	Frequency	Exp.	Standard one-step scheme	Fitted one-step scheme
1	105 Hz	Yes	Yes	Yes
2	220 Hz	Yes	No	Yes
3	330 Hz	Yes	Yes	Yes
4	950 Hz	Yes	No	Yes
5	3600 Hz	Over the resolution	Yes	Damped
6	3800 Hz	Over the resolution	Yes	Damped
7	7600 Hz	Over the resolution	Yes	No

Table 2: Main frequencies detected in the LES simulations compared to the experimental recordings.

evidences peaks around 110 Hz, 230 Hz, a broad-band response around 330 Hz and a peak at 950 Hz. These peaks correspond to **Mode 1, 2, 3** and **4** respectively as identified in the experiment. The simulation with the standard one-step scheme contains peaks corresponding to **Mode 1, 2** and **3** and also higher frequencies at $3,600$ Hz, $3,800$ Hz, $7,600$ Hz and higher harmonics (**Mode 5, 6** and **7** respectively), the nature of which has already been investigated in [33]. **Mode 6** is common to both LES but is largely damped and shifted with the fitted one-step scheme where no other higher frequency activity is found.

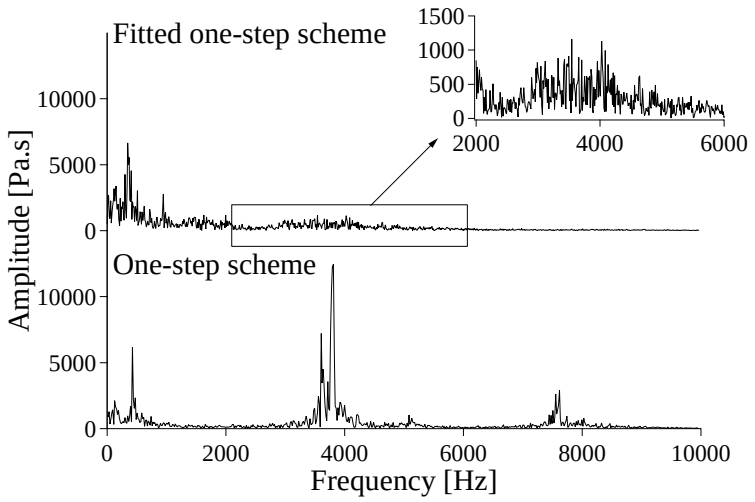


Figure 12: Spectra of the fluctuating temporal pressure evolution at the upper wall of the chamber at $(X, Y, Z) = (230, -30, 30)$ mm^3 and obtained by LES. The frequency resolution is 16 Hz

In the following, the unsteady flow motions and combustion processes are described for each simulation for the dominant frequency found in each simulation: **Mode 6** for the standard one-step LES and **Mode 3** for the fitted one-step LES. The analysis is first given for the one-step simulation followed by the fitted one-step scheme results.

One-step scheme

The unsteady behaviour of the standard one-step scheme LES differs strongly from the fitted one-step scheme simulation. These differences are large enough to impact the average field predictions (Fig. 4). Although low-frequency oscillations are evidenced in the standard one-step LES, these are not significant and flow motions are controlled by high frequencies, especially **Modes 6** & **7** as described below.

Figure 13 shows instantaneous pressure fields in the $Y = 0$ m and $Z = 0$ m planes for the four phases of a period of **Mode 6** and emphasizes the self-sustained periodic variations of the flow quantities. In both planes, transverse activity is identified: fuel is injected at places where pressure oscillations are strong leading to additional flapping. At the impingement point of the two air inlet jets, strong pressure oscillations also arise. Finally, pressure waves are convected upstream throughout the air inlet and toward the shocked nozzles underlying their importance in the overall acoustic behaviour of the system. Figure 14 shows the spectral maps of pressure for **Modes 3** and **6** and isolates regions where a given mode is intense. **Mode 6** as produced by the standard one-step chemistry LES is controlled by transverse acoustic activity with pressure anti-nodes located in the mid-vertical plane and along the vertical walls of the burner. Vertical activity is weak for **Mode 6** and mostly coincides with **Mode 5** as identified in a previous work [33]. This work also stressed the acoustic nature of the high-frequency peaks by comparing spectral maps with the results issued from an acoustic solver and from Proper Orthogonal Decomposition (POD). **Mode 3** appears to be linked with longitudinal acoustic activity (Fig. 14 top).

Figure 15 allows the identification of three different reacting zones which will be subject to **Mode 6** flow modulations. The first flame front (marked (1) on Fig. 15) locates in the aft part of the coalesced jet and anchors at the air inlets. It is very stable and associated with non-premixed combustion as denoted by the value of the Takeno index [65] along the front. The second flame (marked (2) on Fig. 15) is stabilized in the head-end of the chamber between the air inlet jets and the main central recirculation zone. It burns in a premixed regime but diffusion flames are also present mainly at the rear of the air inlets near the top and bottom walls

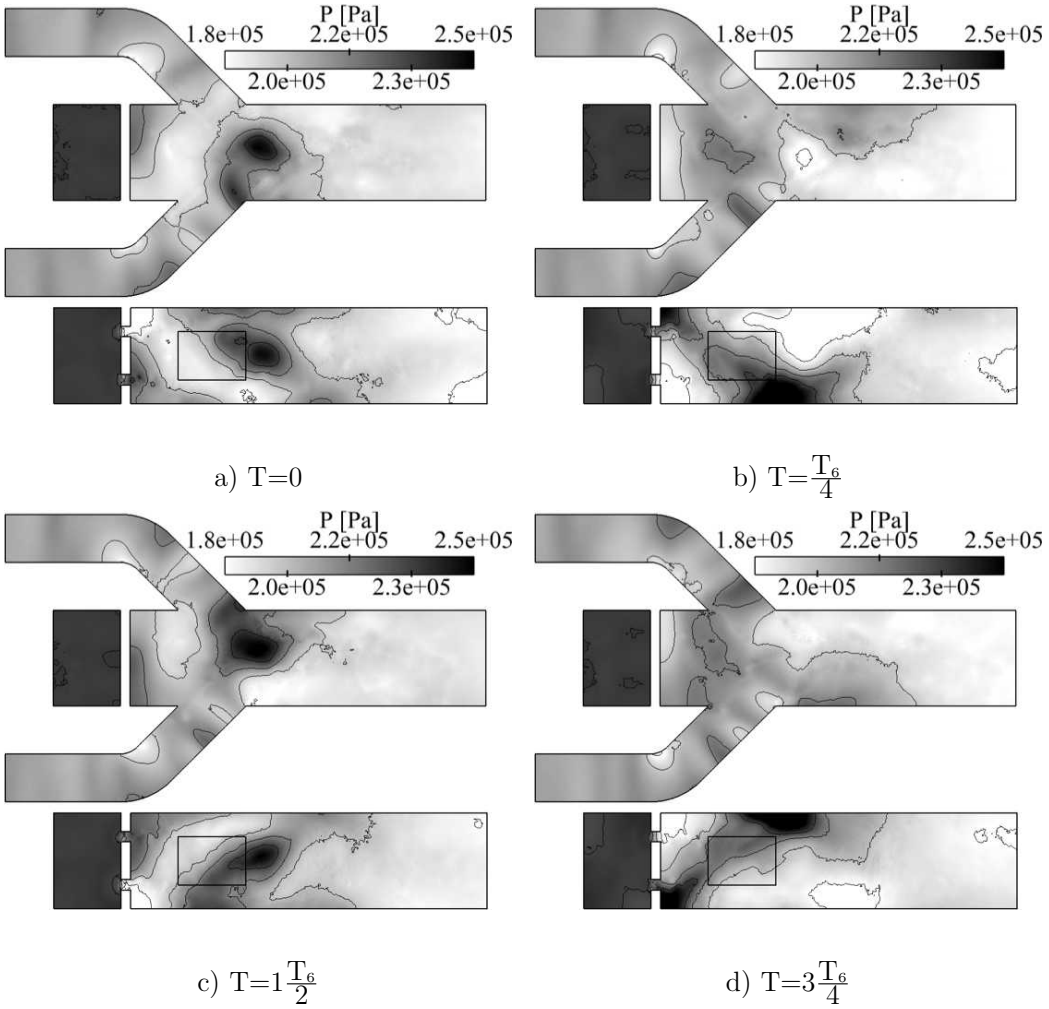


Figure 13: Instantaneous pressure fields in the Y=0 m and Z=0 m planes. T_6 stands for **Mode 6**. Standard one-step scheme.

of the burner. These stable diffusion fronts produce hot burnt gases feeding the recirculation zone allowing the stabilization of the stable front (2). The last flame (marked (3) on Fig. 15) burns along the external rim of the four corner vortices, on the lateral wall chamber sides. This diffusion front consumes propane that is convected downstream of the main chamber pipe through the four corner vortices and which is not fully burnt by the rich premixed front (2).

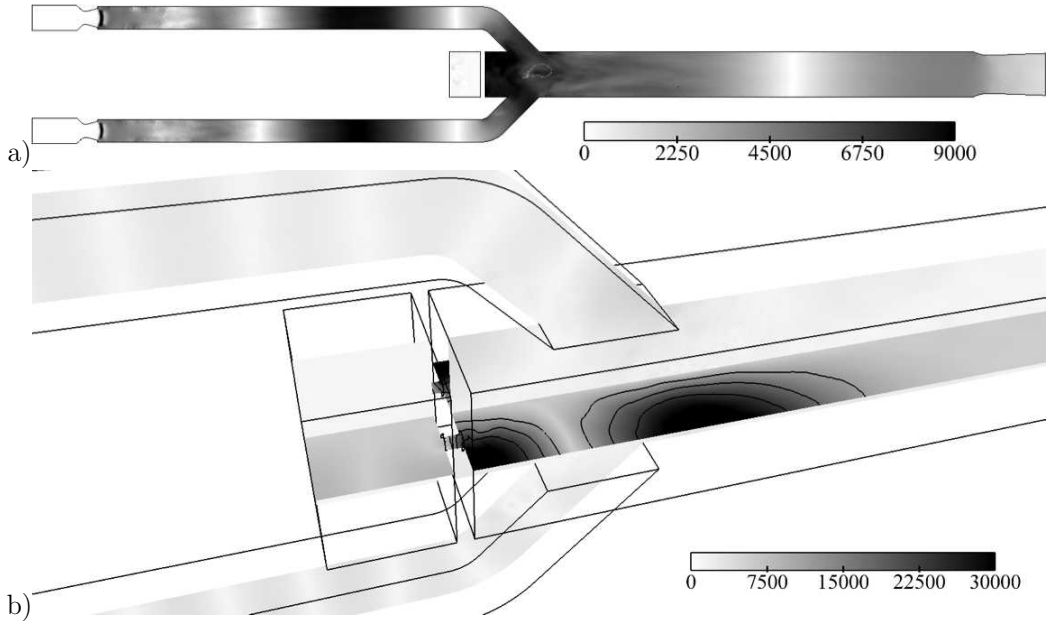


Figure 14: Spectral Maps (A_{FFT} in Pa.s) obtained from the simulation with the standard one-step scheme for a) **Mode 3** and b) **Mode 6** frequencies. Standard one-step scheme.

Note that the heat released by this last front is lower than the one produced by the diffusion flames of front (1) that anchor in the aft part of the air inlet openings. Fronts (2) and (3) play a key role in the expression of **Mode 6** since they release heat where the acoustics is most active at that frequency.

Fitted one-step scheme

For the fitted one-step scheme, the major low frequency instability, *i.e.* **Mode 3**, is controlled by a longitudinal mode within the two air inlets and the main combustion chamber.

Figure 16 depicts two instantaneous axial component of the velocity vector snapshots at two instants out-of-phase in the period of **Mode 3**: *i.e.* $T = T_3$ and $T_3 + \frac{3T_3}{2}$ respectively. The longitudinal aerodynamic activity leads to large fluctuations of the net bulk velocity in the air inlet streams which can double in time within **Mode 3**. These air stream variations are in

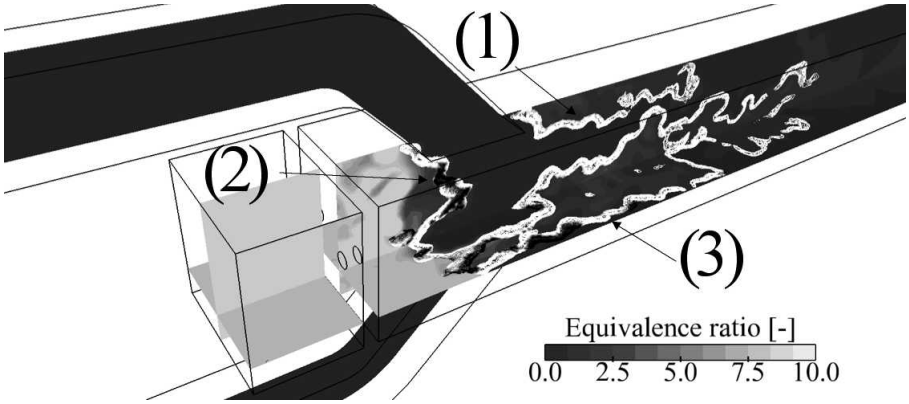
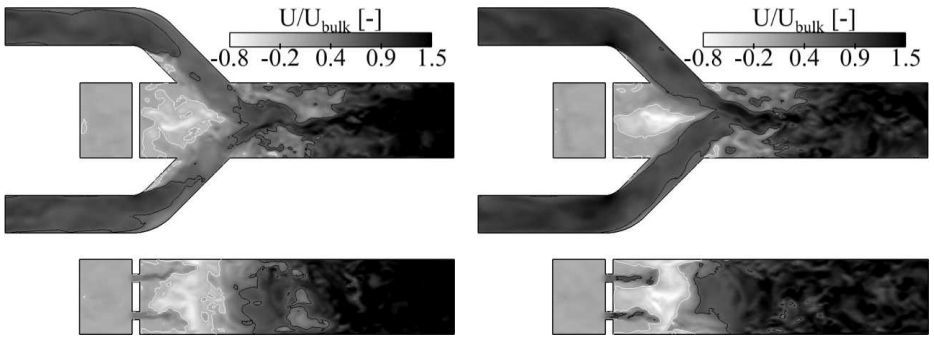


Figure 15: Instantaneous field of equivalence ratio and iso-levels of rate of heat release between 10^8 and 10^{10} W.m^{-3} colored by flame index $\frac{\nabla Y_{C_3H_8}.\nabla Y_{O_2}}{|\nabla Y_{C_3H_8}.\nabla Y_{O_2}|}$ (premixed flames in black and non-premixed in white lines). Standard one-step scheme.

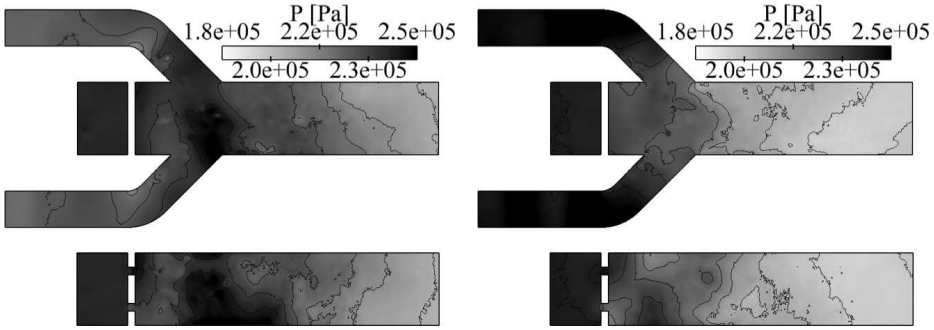
phase in both feeding pipes and result in large variations of the jet impingement region and a time dependent blockage of the head-end. Indeed, depending on the instant within **Mode 3**, the jet-on-jet region isolates the dome of the burner from the main pipe chamber. The dynamics in the dome is thus strongly impacted by **Mode 3**: propane mixing and injection is favoured or stopped depending on the blockage status. The primary indicator is here the propane feeding jet speeds that have strongly varying magnitudes (in phase with each other and in phase with the air feeding pipe oscillations), Fig. 16(b).

A second indicator of the violent **Mode 3** dynamics is depicted by Fig. 17 which shows instantaneous pressure fields at the same instants of Fig. 16. When the flow blockage is maximum (Figs. 16 & 17 (a)), the pressure difference between the pre-injection box and the head-end leads to an intensified fuel supply and an accumulation of propane in the head-end zone. When the flow blockage is minimum (Figs. 16 & 17 (b)), the head-end fuel rich mixture is released in the aft part of the main combustion chamber. At the end of this process, the head-end fills with air again thanks to enhanced detachment zones in the air inlets.



a) T=0 b) T=$\frac{T_3}{2}$

Figure 16: Instantaneous fields of non-dimensionalized axial component of the velocity vector in the Y=0 m and Z=0 m planes and iso-levels at U/U$_{bulk}$=-0.05 in white and U/U$_{bulk}$=1 in dark. T$_3$ stands for **Mode 3**: a) maximum and b) minimum of the flow blockage. Fitted one-step scheme.



a) T=0 b) T= + $\frac{T_3}{2}$

Figure 17: Instantaneous fields of pressure in the Y=0 m and Z=0 m planes. T$_3$ stands for **Mode 3**: a) maximum and b) minimum of the flow blockage. Fitted one-step scheme.

Figure 18 shows the spectral maps of pressure of **Modes 3** and **6** as predicted by the fitted scheme LES. The structures of **Mode 3** and **6** obtained with both simulations (Fig. 14 and 18) are similar but the level of **Mode 6** is smaller with the fitted one-step scheme. The need to include inlet and outlet nozzles in the computations is confirmed here: at the three ends of

the combustor, simple relations such as zero pressure or velocity fluctuations are not sufficient to ensure the exact evolution or selection of that acoustic mode. The importance of **Mode 3** and its impact on the dynamics described previously partly rely on the presence of a pressure anti-node standing within the head-end and the end of the air inlets. This leads to variations of the mass flow rate at the end of the air inlets and at the beginning of the main combustion chamber as shown by Fig. 20. It shows the mass flux variations across planes in the air and fuel feeding veins as well as in the main chamber pipe. Mean pressure signals recorded in these same planes and as a function of time are also provided. Strong evolutions of both mass flow rate and pressure (180° out of phase with one another) are evidenced with up to respectively 40% and 15% variations respectively. The maximum of the flow blocage of the previous figures corresponds to time t_a and the minimum to time t_b.

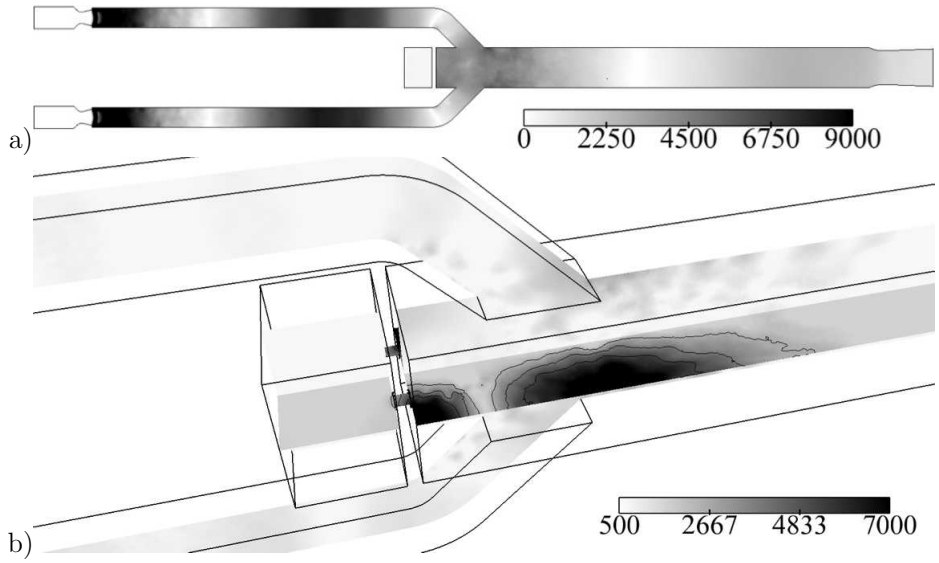


Figure 18: Spectral Maps (A_{FFT} in Pa.s) obtained from the simulation with the fitted one-step scheme for a) **Mode 3** and b) **Mode 6** frequencies.

Figure 19 displays two instantaneous isovolumes of vertical velocity (all points where the vertical component of the velocity vector is more than $0.75 \times U_{bulk}$ or less than $-0.75 \times U_{bulk}$) and of rate of heat release separated by half a period of **Mode 3** from LES (left column) and

two snapshots obtained experimentally (right column). Periodically, zones of strong vertical velocity are released from the two air inlets and meet at the point of impingement of the two jets, Fig. 19(a). The high-velocity sheet coming from the impingement of the air inlet jets makes the four corner vortices circulation more intense and ensures the convection of the fuel out of the head-end. During this half period, the recirculation zone in the head-end of the combustor gets stronger. The flame can not propagate but is pushed toward the outlet of the burner (Figs. 19 (a) in LES & (b) in the experiment). When the flow blockage is minimum, *i.e.* when the air mass flow rate is minimum, the strong negative axial velocities found both in the head-end of the chamber and on the top and bottom sides of the impinging jets are released. The mean flow velocity in the chamber strongly decreases and the flame travels upstream against the main flow as evidenced in the experiment on Fig. 19 (d) and LES on Fig. 19 (c). The corner vortices are almost absent during this second phase, Fig. 19 (c). Note that when the flow blockage reaches its minimum, the flame can eventually propagate all the way to the central recirculation zone inside the head-end. This last phenomenon is linked to **Mode 1**.

These aerodynamic phenomena strongly influence the flame stabilization within a cycle of **Mode 3**. Figure 21 shows that the flames stabilize downstream of the air inlet but that their position varies with time and with the flow blockage. The variation of pressure induced by **Mode 1** and **Mode 3** can be such that the flame can reach the central recirculation zone located in the head-end, Fig. 21 (b). Combustion regimes are also affected and vary in time.

Figure 22 presents probability density functions of heat release rates versus mixture fraction as constructed by ensemble averaging LES snapshots at the instants of Fig. 21. Three peaks are clearly identified: lean, rich and stoichiometric. When the maximum blockage occurs, stabilization of the combustion process is due to the propagation of the flames along the end of the corner vortices and the lean and rich peaks of Fig. 22 (a) correspond to the fuel-lean and rich branches of the flames as seen on Fig. 21 (upper picture). When the flow blockage decreases, fuel-rich pockets appear downstream of the chamber because of the increased strength of the corner vortices. These pockets are first consumed by the rich-premixed branches of the former

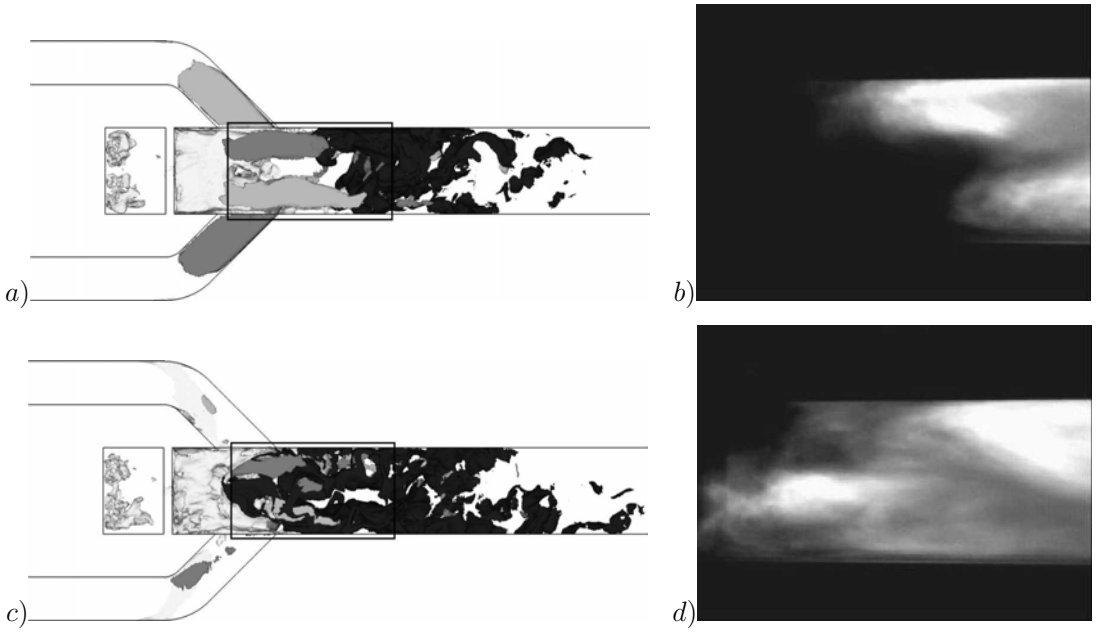


Figure 19: Instantaneous fields using the fitted one-step scheme LES (left column) and seen in the experiment (left column). In LES, the iso-volumes correspond to: the vertical component of velocity ($0.75\,U_{bulk}$ in white and $-0.75\,U_{bulk}$ in light gray) and the zero axial component of velocity in dark gray. The black iso-volume coincides with the rate of heat release (a hundredth of the maximum value) and shows where combustion takes place. These views are taken whithin half a period apart in **Mode 3**. Experimental views are direct images through a window starting 400 mm downstream of the air inlets sections of the main chamber.

downstream propagating flames. The trailing diffusion flame is then convected along the flow with the pocket of propane and toward the end of the chamber.

5.3. Impact of chemistry description on thermo-acoustic stability criteria

A common tool used to assess thermo-acoustic stability of burners is the Rayleigh criterion [66] which states that thermo-acoustic coupling occurs if pressure and heat release fluctuations are in phase. Figure 23 provides the spatial distribution of heat release fluctuations in the $Y = 0$ plane. Compared with spectral maps of pressure shown on Figs. 14 and 18, only the simulation with the standard one-step scheme allows such a coupling to appear at the

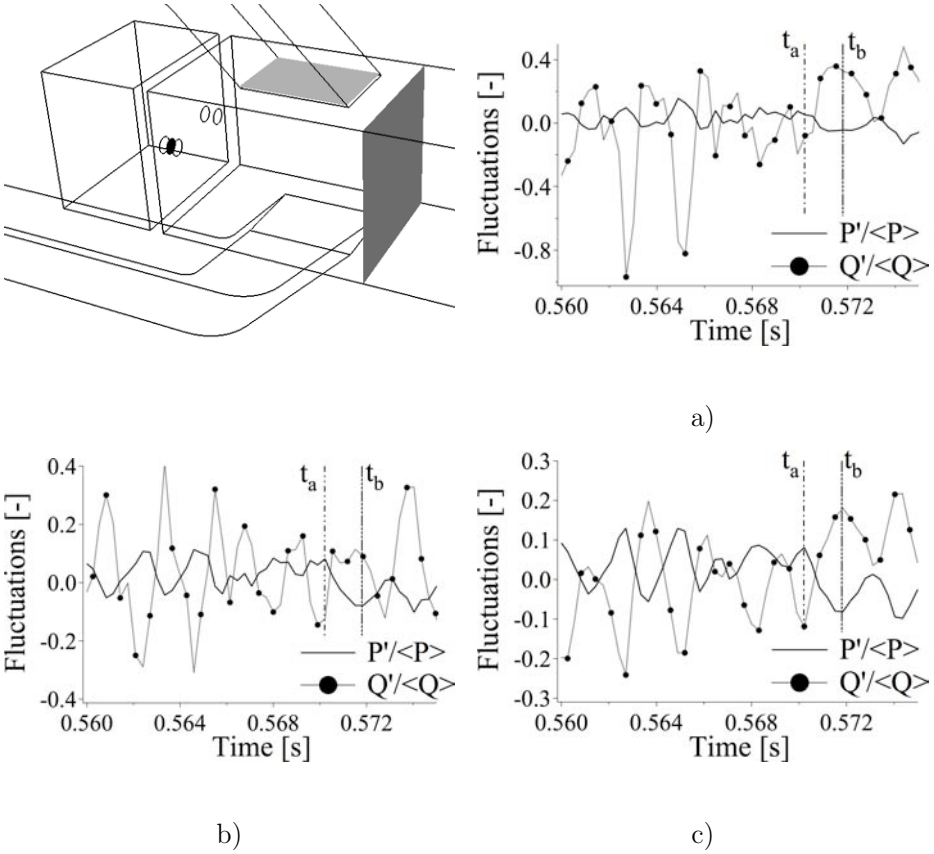


Figure 20: Fluctuations of surface-averaged flow rate and pressure in three planes. Flow rates and pressures are normalized by their respective mean values. The planes are : a) dark plane at the exit of the pre-injection box, b) light gray plane at the exit of the upper air inlet and c) dark gray plane upstream. Fitted one-step scheme.

frequency of **Mode 6**: heat release fluctuations obtained with this LES are maximum at point (1) while they are weaker for the fitted one-step scheme where the maximum of fluctuations is found downstream, at point (2). These last figures show why **Mode 6** is not selected in the fitted one-step scheme LES.

From the previous analyses and flow visualizations of the standard one-step scheme predictions, Fig. 15, only front (3) can be responsible of such a constructive activity and is due to the wrong behaviour of the chemical scheme at high equivalence ratios.

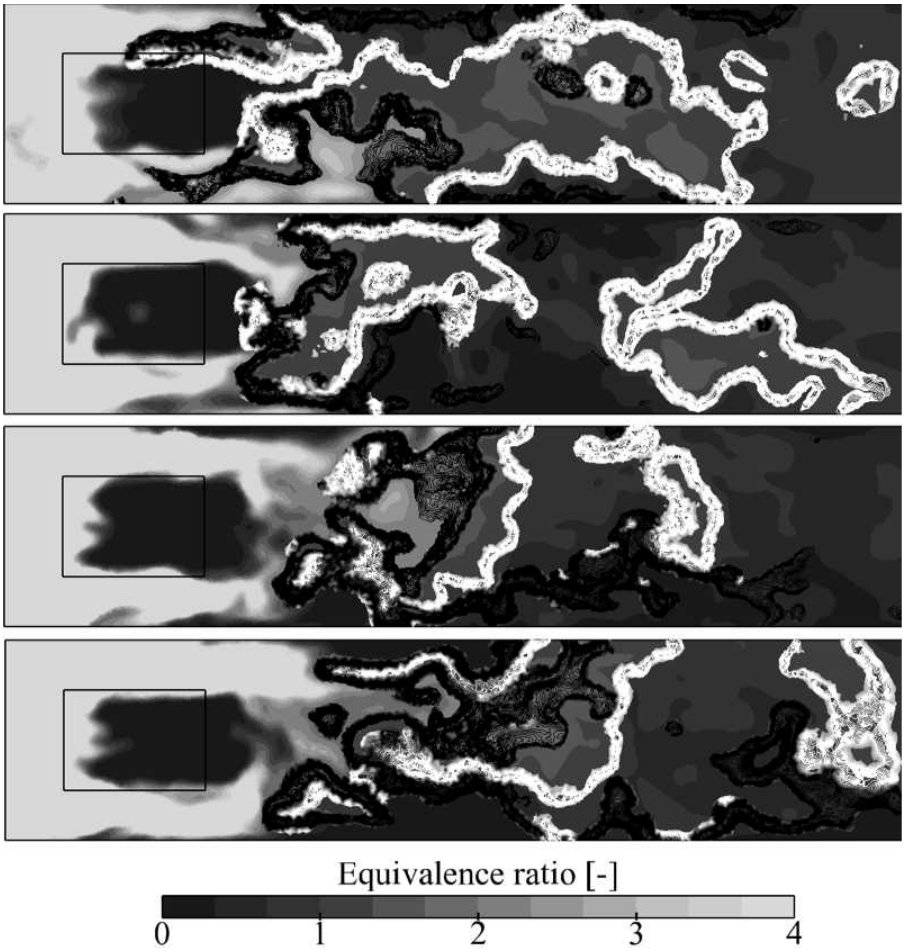


Figure 21: Instantaneous fields of equivalence ratio in the $Y = 10^{-2}$ m and iso-levels of rate of heat release (from 10^8 to 10^{10} W.m^{-3}) colored by the flame index $\frac{\nabla Y_{C_3H_8}.\nabla Y_{O_2}}{|\nabla Y_{C_3H_8}.\nabla Y_{O_2}|}$ (premixed flames in black and non-premixed in white). Half a period of **Mode 3**, from the maximum (upper picture): T=0 to the minimum (lower picture): T=$\frac{T_3}{2}$ of the flow blockage. Fitted one-step scheme.

To conclude, the correction of the rich-side laminar flame speed introduced in the fitted one-step scheme turns out to be necessary to properly reproduce the thermo-acoustic behaviour of the experimental stato-reactor as reported by ONERA.

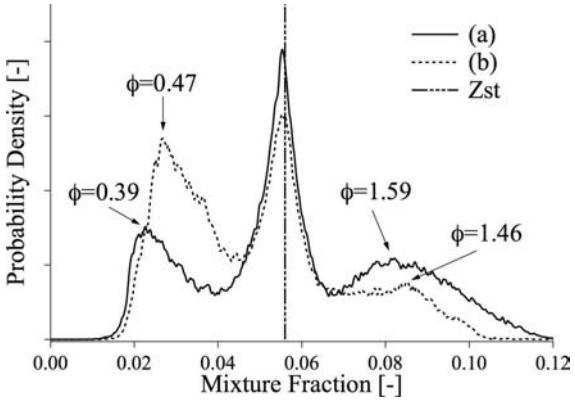


Figure 22: Probability density function of local mixture fraction in reacting zones detected as zones where the local rate of heat release is higher than a hundredth of the peak value: a) maximum and b) minimum flow blockage. Fitted one-step scheme.

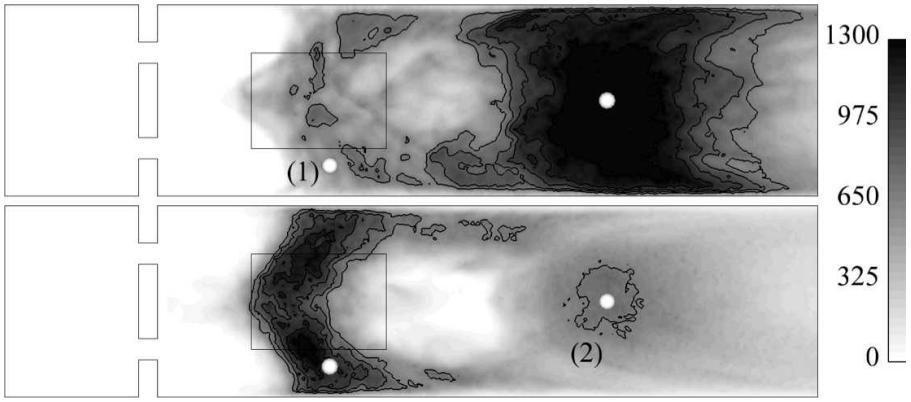


Figure 23: Standard deviation of reaction rate ($\mathrm{W.mol^{-1}.m^{-3}}$) in the Y = 0 m plane and iso-levels between 500 and $1,300$ $\mathrm{W.mol^{-1}.m^{-3}}$: top, fitted one-step scheme and bottom, standard one-step scheme.

6. Conclusions

LES's of the unsteady reacting flow in a side-dump combustor are produced with two different chemical schemes: a classical one-step scheme and a similar scheme with a laminar flame speed that is fitted to provide the proper behaviour at rich equivalence ratio values. For both

cases, comparisons against measurements show very good agreement for mean velocity profiles. However the unsteady activity in the burner is correctly reproduced only in the second LES.

LES shows that combustion arises at places where the pressure node of a longitudinal acoustic mode acts for the fitted one-step LES while they occur at pressure nodes of a transverse acoustic mode in the one-step LES. The simulation with the standard one-step scheme shows high frequency oscillations (linked to the transverse acoustic activity) but low frequency oscillations are observed with the fitted one-step scheme. Strong coupling between heat release and pressure fluctuations is evidenced at these locations which underlines thermo-acoustics as the driving mechanism in both cases. In this study, the excitation of the acoustic modes is eased by the chemical schemes that allow or prevent combustion of mixture at equivalence ratio above the rich flamability limit. In the first LES, rich premixed combustion can occur at the beginning of the corner vortices (in the head-end). More generally, this study suggests that chemical schemes affect mean flow fields obtained by LES (something which is well-known) but also the instabilities. It does not say, however, how precise the chemical scheme must be to capture these instabilities in general. For the present case, results show that fitting chemistry on the rich side was sufficient for the ONERA ramjet but this may not be a general result.

Acknowledgments

This research used resources of the Argonne Leadership Computing Facility at Argonne National Laboratory, which is supported by the Office of Science of the U.S. Department of Energy under contract DE-02-06CH11357 and access to the Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur (CINES) in Montpellier, France, under the project FAC2554. A. Roux is supported financially by the French Délégation Général pour l'Armement (DGA).

References

[1] N. Peters and B. Rogg, Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion SystemsLecture Notes in Physics (Springer Verlag, Heidelberg, 1993).

[2] A. Ristori et al., XVIIth Symposium ISABE, Munich, Germany, 2005.

[3] G. Heid and A. Ristori, PSFVIP 4, CHAMONIX, France, 2003.

[4] G. Heid and A. Ristori, ISABE, Munich, Allemagne, 2005.

[5] A. Ristori et al., XIVth Symposium ISABE, Florence, Italy, 1999.

[6] T. Poinsot and D. Veynante, Theoretical and numerical combustion (R.T. Edwards, 2nd edition., 2005).

[7] H. Pitsch, Ann. Rev. Fluid Mech. 38 (2006) 453.

[8] P. Moin and S.V. Apte, Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J. 44 (2006) 698.

[9] F. Ham et al., Annual Research Briefs , pp. 139–160, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2003.

[10] S. James, J. Zhu and M. Anand, Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J. 44 (2006) 674.

[11] G. Boudier et al., Proc. Combust. Inst. 31 (2007) 3075.

[12] M. Boileau et al., Combustion and Flame 154 (2008) 2.

[13] G. Boudier et al., Int. J. Aeroacoustics 8 (2009) 69.

[14] G. Staffelbach et al., Proc. Combust. Inst. 32 (2009).

[15] L. Selle et al., Combust. Flame 137 (2004) 489.

[16] H. Pitsch and L.D. de la Geneste, Proc. Combust. Inst. 29 (2002) 2001.

[17] N. Patel and S. Menon, Combust. Flame 153 (2008) 228.

[18] S. Roux et al., Combust. Flame 141 (2005) 40.

[19] K. Kailasanath et al., 22nd JANNAF Combustion Meeting, 1985.

[20] S. Menon and W. Jou, Combust. Sci. Tech. 75 (1991) 53.

[21] L.Y.M. Gicquel et al., ASME 2006, edited by . AIAA Vol. Paper AIAA-2006-151, RENO, USA, 2006.

[22] S. Reichstadt et al., ISABE, p. 1188, 2007.

[23] A. Roux et al., Combust. Flame 152 (2008) 154.

[24] S.B. Pope, Combust. Theory and Modelling 1 (1997) 41.

[25] L. Lu et al., Proc. of the Summer Program , pp. 283–294, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2004.

[26] M.A. Singer and S.B. Pope, Combust. Theory and Modelling 8 (2004) 361 .

[27] B. Fiorina et al., Combust. Flame 140 (2005) 147.

[28] O. Gicquel, N. Darabiha and D. Thevenin, Proc. Combust. Inst. 28 (2009) 1901.

[29] P. Domingo et al., Combust. Flame 143 (2005) 566.

[30] A. Vreman et al., Combust. Flame 153 (2008) 394.

[31] M.A. Singer and S.B. Pope, Combust. Theory Modelling 8 (2004) 361.

[32] G. Ribert et al., Combust. Flame 146 (2006) 649.

[33] S. Roux, M. Cazalens and T. Poinsot, J. Prop. Power 24 (2008) 541.

[34] B. Vreman, B. Geurts and H. H. Kuerten, Phys. Fluids 6 (1994) 4057.

[35] P. Sagaut, Large Eddy Simulation for incompressible flowsScientific computation series (Springer-Verlag, 2000).

[36] J.H. Ferziger, AIAA Journal 15 (1977) 1261.

[37] J. Smagorinsky, Mon. Weather Rev. 91 (1963) 99.

[38] S.B. Pope, Turbulent flows (Cambridge University Press, 2000).

[39] P. Chassaing, Turbulence en mécanique des fluides, *analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur* (Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000).

[40] F. Nicoud and T. Poinsot, Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena., Santa Barbara, Sept 12-15., 1999.

[41] P. Moin et al., Phys. Fluids A 3 (1991) 2746.

[42] G. Erlebacher et al., J. Fluid Mech. 238 (1992) 155.

[43] F. Ducros, P. Comte and M. Lesieur, J. Fluid Mech. 326 (1996) 1.

[44] P. Comte, New tools in turbulence modelling. vortices in incompressible les and non-trivial geometries, Springer-Verlag, France, 1996.

[45] D.K. Lilly, Phys. Fluids 4 (1992) 633.

[46] M. Germano, J. Fluid Mech. 238 (1992) 325.

[47] S. Ghosal and P. Moin, J. Comput. Phys. 118 (1995) 24 .

[48] C. Meneveau, T. Lund and W. Cabot, J. Fluid Mech. 319 (1996) 353.

[49] O. Colin and M. Rudgyard, J. Comput. Phys. 162 (2000) 338.

[50] F.A. Williams, Combustion theory (Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985).

[51] T.D. Butler and P.J. O'Rourke, 16th Symp. (Int.) on Combustion, pp. 1503 – 1515, The Combustion Institute, 1977.

[52] C. Angelberger et al., Proc. of the Summer Program , pp. 61–82, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.

[53] C. Angelberger, F. Egolfopoulos and D. Veynante, Flow, Turb. and Combustion 65 (2000) 205.

[54] J.P. Légier, T. Poinsot and D. Veynante, Proc. of the Summer Program , pp. 157–168, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000.

[55] O. Colin et al., Phys. Fluids 12 (2000) 1843.

[56] C. Martin et al., AIAA Journal 44 (2006) 741.

[57] P. Schmitt et al., J. Fluid Mech. 570 (2007) 17.

[58] A. Sengissen et al., Combust. Flame 150 (2007) 40.

[59] V. Moureau et al., J. Comput. Phys. 202 (2005) 710.

[60] T. Schönfeld and T. Poinsot, Annual Research Briefs , pp. 73–84, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999.

[61] S. Mendez and F. Nicoud, J. Fluid Mech. 598 (2008) 27.

[62] A.W. Cook and W.H. Cabot, J. Comput. Phys. 203 (2005) 379.

[63] J.P. Légier, Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques, Phd thesis, INP Toulouse, 2001.

[64] F. Hussain and J. Jeong, J. Fluid Mech. 285 (1995) 69.

[65] P. Domingo, L. Vervisch and J. Réveillon, Combust. Flame 140 (2005) 172.

[66] A.A. Putnam, Combustion driven oscillations in industry, Fuel and energy science series, j.m. beer ed. (American Elsevier, 1971).

Chapitre 12

Phénoménologie de la combustion au sein du “Statoréacteur de Recherche”

Le chapitre précédent a permis de valider les différents paramètres numériques utilisés pour la simulation aux grandes échelles du “statoréacteur de recherche”, pour un régime de haute altitude et à une richesse de 0.75. En particulier, il a été montré que la simulation présente de nombreux régimes de combustion, de la amme de diffusion au régime prémélangé riche ou pauvre. Avec l'approche PEA, deux modes principaux ont été identifiés à basse fréquence : 140 Hz et 350 Hz, en accord avec l'expérience. Dans la section suivante, le régime de vol à haute altitude va être exploré en faisant varier la richesse globale de 0.35 à 0.75. Les trois cas étudiés sont résumés en Tab. 12.1.

	Cas A	Cas B	Cas C
	0.35	0.50	0.75
m_{air}	0.90 kg.s^{-1}	0.90 kg.s^{-1}	0.90 kg.s^{-1}
$m_{C_3H_8}$	0.02 kg.s^{-1}	0.03 kg.s^{-1}	0.044 kg.s^{-1}

TAB. 12.1 - *Principales caractéristiques des trois cas étudiés.*

Dans cet exercice particulièrement difficile de prédictivité de l'outil SGE, on s'intéressera tout d'abord à retrouver qualitativement les résultats moyens obtenus par les expérimentateurs de l'ONERA en particulier en terme de zone réactive moyenne, ceci sans qu'aucune modification ne soit apportée au code. Ces derniers ont en effet montré que le dôme présentait une combustion plus ou moins intense en fonction de la richesse injectée (Reichstadt *et al.*, 2007). Ce phénomène s'explique par le fait que le dôme constitue un réservoir de carburant pour entretenir la combustion plus en aval. De ce fait, plus la richesse globale va être élevée et plus le dôme va être rempli de propane, limitant directement la combustion dans cette zone. Il sera également montré que les modes acoustiques régissant l'écoulement doivent être parfaitement capturés afin de représenter l'écoulement réactif dans le statofusée . Ce dernier point nécessite entre autres l'inclusion de la totalité des manches à air ainsi que la tuyère en sortie dans le modèle CFD.

12.1 Topologie de l écoulement moyen

Comportement moyen dans la chambre principale

Les Figs. 12.1 et 12.2 présentent l'évolution des composantes axiale et verticale de la vitesse moyenne et uctuante dans le plan médian (x,y). Celle-ci est adimensionnée pour chaque cas par la vitesse débitante U_{bulk} dans un plan situé dans les manches 50 mm en aval des coudes et pour chaque cas de vol (celle-ci varie de ≈8% entre les deux cas extrêmes). Les champs de vitesse axiale moyenne montrent globalement un comportement similaire, en particulier dans le dôme. Le décollement dans les manches est proche pour les trois cas. Celui-ci pilotant l'écoulement dans l'amont du fût, il n'est ainsi pas étonnant que la distribution de vitesse soit si proche. Au droit des manches à air, la vitesse de l'écoulement est plus importante pour la richesse globale de 0.75. En effet, la température adiabatique de fin de combustion est supérieure pour ce cas et afin de conserver le débit massique, l'écoulement ne peut que voir sa vitesse augmentée. La principale différence est visible dans le latéral au droit des manches à air où l'ouverture des jets est plus ou moins repoussée vers l'aval de l'écoulement. Les différences majeures proviennent des champs de déviation standard de la composante axiale de la vitesse, en particulier au niveau du battement de la nappe de vitesse. Le calcul à =0.75 se révèle le plus oscillant avec une zone de uctuation de vitesse axiale en aval des manches à air qui occupe quasiment toute la hauteur de la manche. Le constat inverse est établi pour les champs de vitesse verticale où un battement de plus en plus intense est observé au fur et à mesure que la richesse globale diminue. Directement en aval des manches à air, les iso-contours de vitesse verticale restent similaires pour les trois cas mais leur intensité varie : ceci est en particulier lié à une interaction entre les tourbillons de coins qui appara^t être plus sensible au niveau de l'axe médian à la richesse =0.35 que pour =0.75 ce qui note le rapprochement de ces derniers vers le plan de symétrie du statoréacteur. Globalement, les quatre tourbillons hélico¨daux ont une longueur comparable mais au fur et à mesure que la richesse diminue, ceux-ci se rapprochent en aval du plan médian (x,y). Dans des conditions proches de l'extinction pauvre, la simulation à $= 0.35$ révèle la présence de phénomènes instationnaires beaucoup plus intenses que les deux autres régimes au niveau de la vitesse verticale.

La comparaison des profils de vitesse le long de l'axe de symmétrie du statofusée à Y=Z=0 m et pour différentes abscisses dans le plan médian (x,z) confirment les précédentes observations. En particulier, l'accélération plus forte dans le cas de la simulation à =0.75 est visible en Fig. 12.3 tandis que la zone de recirculation conserve sa position ainsi que son intensité moyenne. Il est intéressant de mettre ce constat en parallèle avec la Fig. 12.4 qui montre l'évolution de la température moyenne le long du même axe. L'augmentation de la température en aval y est soulignée tandis que dans le dôme, une température de plus en plus importante au fur et à mesure que la richesse diminue est observée, signe de la présence d'un processus de combustion plus constant dans le dôme.

Les Figs. 12.5 et 12.6 montrent l'évolution de la température dans le plan médian Z=0 m à cinq abscisses différentes. La combustion dans le dôme est encore visible à X=150 mm même si les écarts de température s'amenuisent, du fait du rapprochement des deux jets provenant des manches à air. Des écarts sensibles de vitesse sont visibles dans le latéral au droit des manches à air. L'in uence plus nette des tourbillons de coins a été précédemment soulignée et ceux-ci sont plus chauds à faible richesse. Au contraire, les uctuations de température sont plus intenses à forte richesse comme le montre la Fig. 12.6.

Ces derniers résultats sont corroborés par la position des zones réactives moyennes. Comme il l'a été dit auparavant, la quantité de propane injectée dans le dôme en fonction du régime de vol mène à des

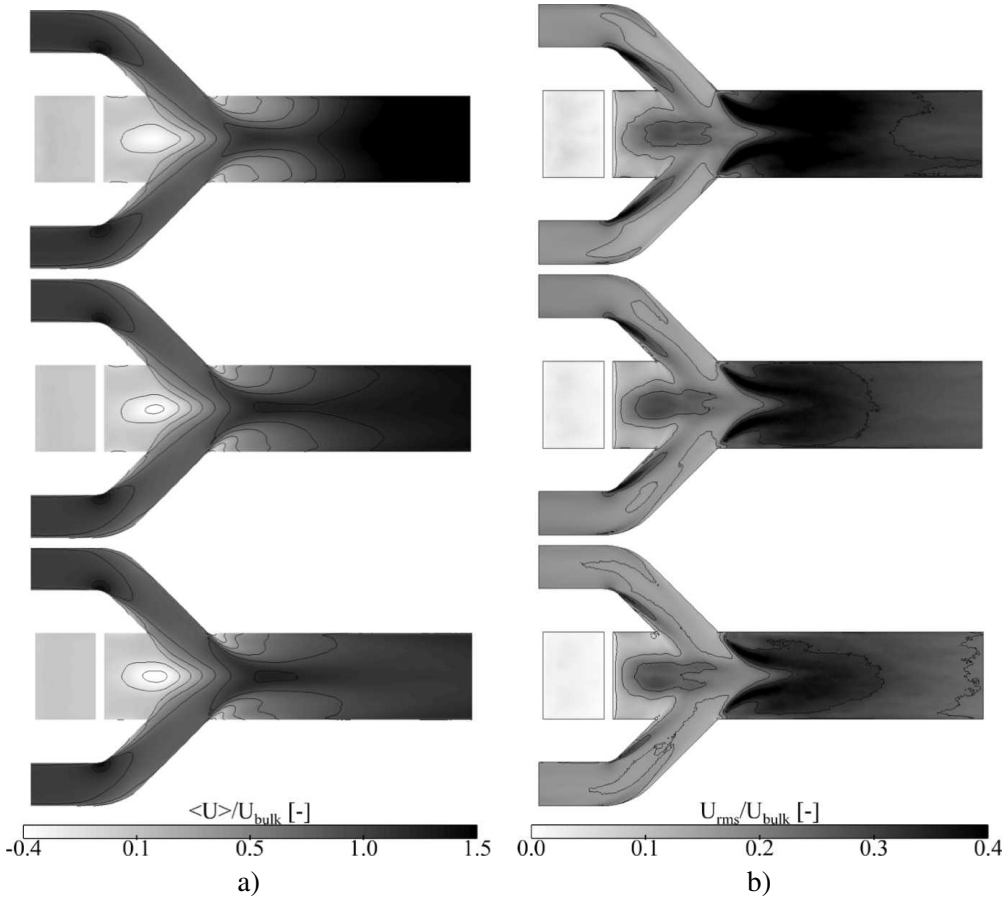


FIG. 12.1 - *Champs de vitesse axiale adimensionnalisée par la vitesse débitante dans les manches à air dans le plan médian (x,y). a) moyenne et b) déviation standart. De haut en bas, =0.35, 0.5 et 0.75.*

richesses locales de plus en plus importante. La réaction dans cette zone est ainsi limitée par cet excès de carburant qui n'est pas contrebalancée par l'apport d'air frais issu des entrées d'air. La Fig. 12.7 montre les champs expérimentaux d'émission de radical OH* (à gauche) intégrée dans la profondeur. Cette espèce n'étant pas transportée dans les simulations aux grandes échelles, on choisit de comparer ces résultats aux champs de température et de dégagement de chaleur également intégrés dans la profondeur. En premier lieu, l'accord entre les simulations et l'expérience est très bon : au fur et à mesure que la richesse augmente, la combustion dans le dôme est de plus en plus limitée au profit de celle en aval des entrées d'air qui devient de plus en plus intense. Il faut toutefois noter que les niveaux relevés dans l'expérience sont arbitraires au contraire des simulations SGE où la même échelle a été conservée. Ainsi, la combustion dans le latéral au droit des manches à air apparaît plus nettement, signe d'une combustion intense au près des tourbillons de coin. De plus, la zone de réaction au droit des manches à air est de plus en plus décalée vers l'aval. Tandis que pour une richesse proche de l'extinction, la réaction en aval est séparée en deux zones distinctes de part et d'autre de la nappe créée par la coalescence des deux jets, cette distinction diminue jusqu'à disparaître pour la richesse =0.75. La vitesse débitante U_{bulk} est plus importante à faible richesse. L'impact des jets d'air et leur coalescence en une nappe de vitesse est ainsi plus intense ce qui organise l'écoulement, en particulier les tourbillons de coins.

L'accord entre les simulations numériques et l'expérience est très bon et valide en particulier l'ap-

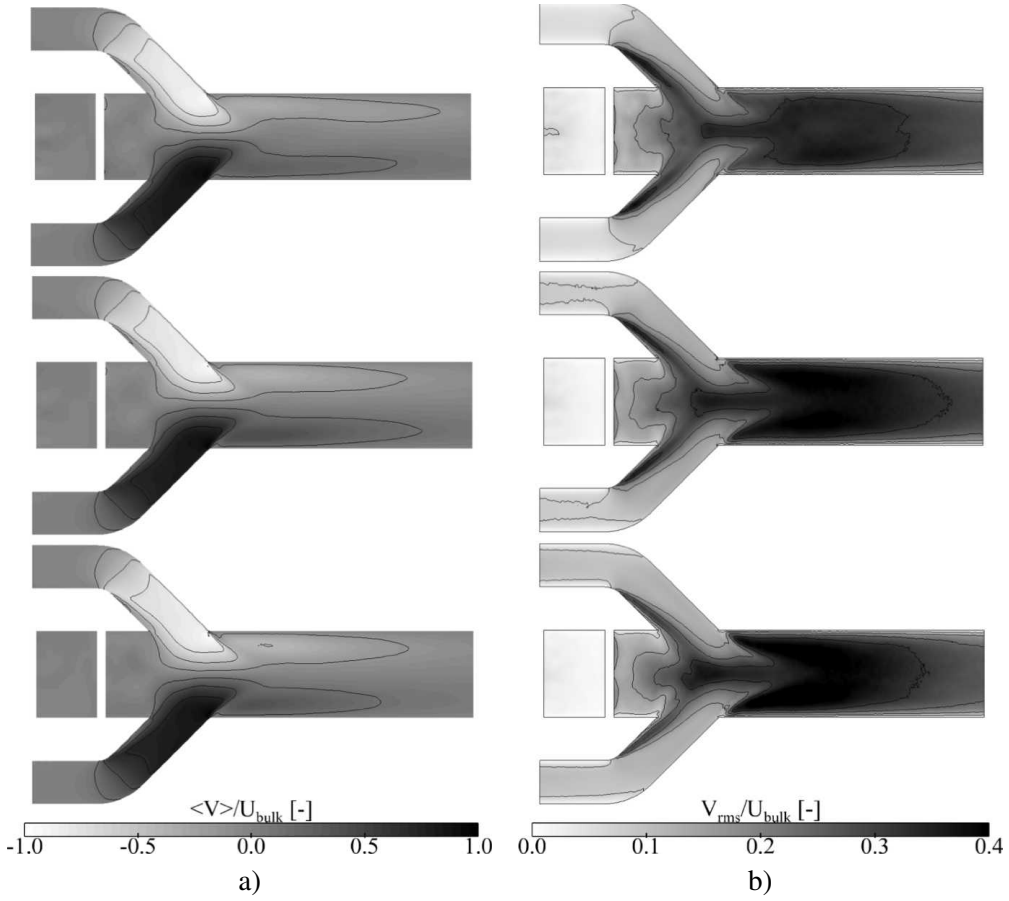


FIG. 12.2 - *Champs de vitesse verticale adimensionnalisée par la vitesse débitante dans les manches à air dans le plan médian (x,y). a) moyenne et b) déviation standart. De haut en bas, =0.35, 0.5 et 0.75.*

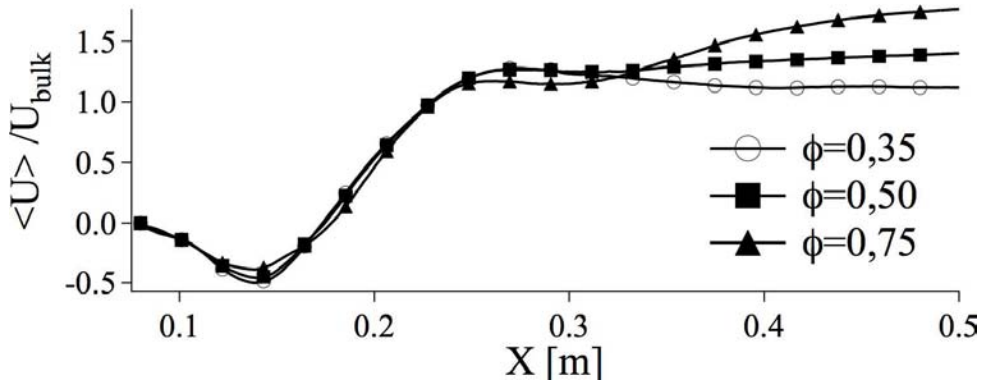


FIG. 12.3 - *Pro ls de vitesse axiale moyenne adimensionnalisée par la vitesse débitante dans les manches à air le long de l'axe Y = Z = 0 m.*

parition de modes acoustiques dans la chambre. Effectivement, ceux-ci dépendent en grande partie de la distribution de vitesse du son dans la chambre et donc de la température. On notera de plus que

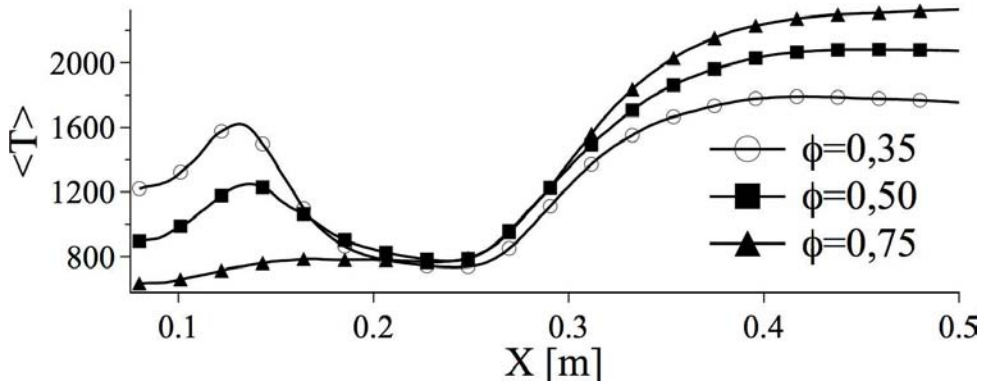


FIG. 12.4 - *Pro ls de température le long de l'axe Y = Z = 0 m.*

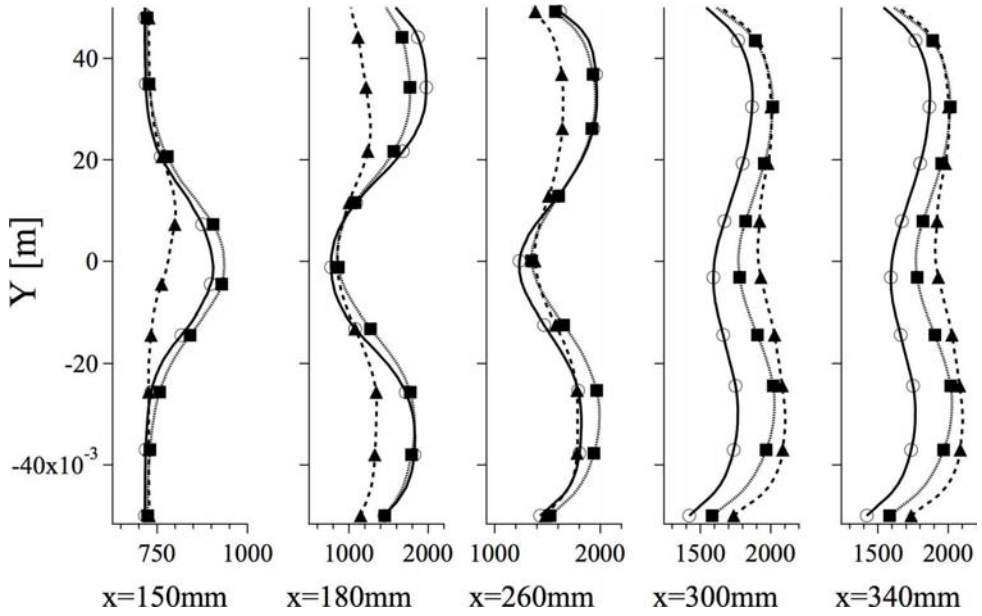


FIG. 12.5 - *Pro ls de température moyenne dans le plan médian (x,z).*

même si celle-ci est surestimée par le schéma cinétique, il est en premier lieu important de capter les hétérogénéités de température avant leur niveau (Sensiau, 2008), la vitesse du son dépendant de la racine carré de la température.

La Figure 12.8 montre l'évolution de la pression adimensionnalisée par la pression moyenne dans le plan ayant servi à la définition de U_{bulk}. La distribution spatiale est similaire mis à part au droit des manches à air où l'augmentation de pression apparaˆt de plus en plus tôt avec la richesse. Il est intéressant de noter que la pression dans la boˆte d'injection est similaire pour les trois cas de richesse, les différences visibles ici provenant de la variation de P_{bulk}.

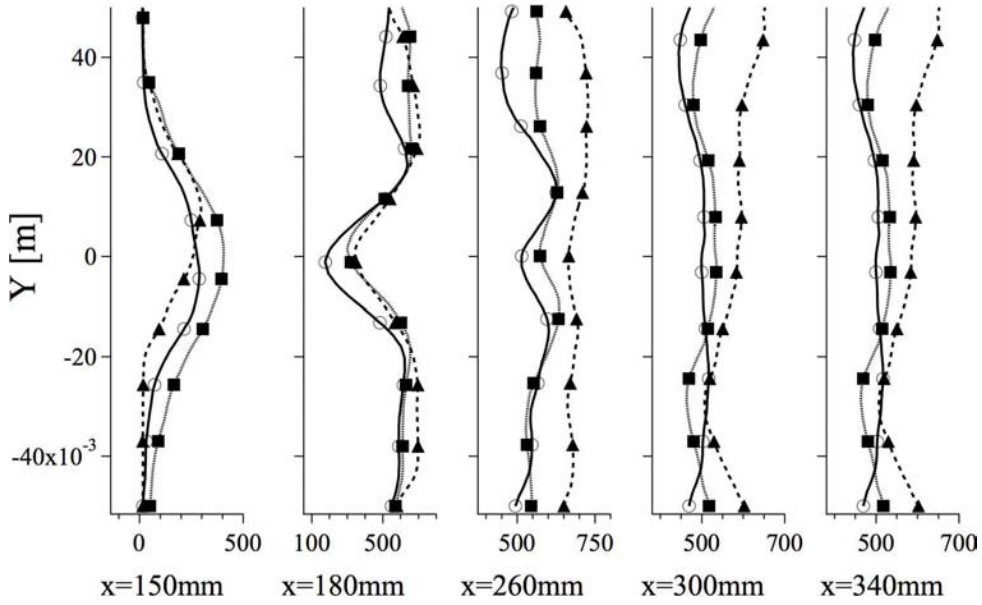


FIG. 12.6 - *Pro ls de température uctuante dans le plan médian (x,z).*

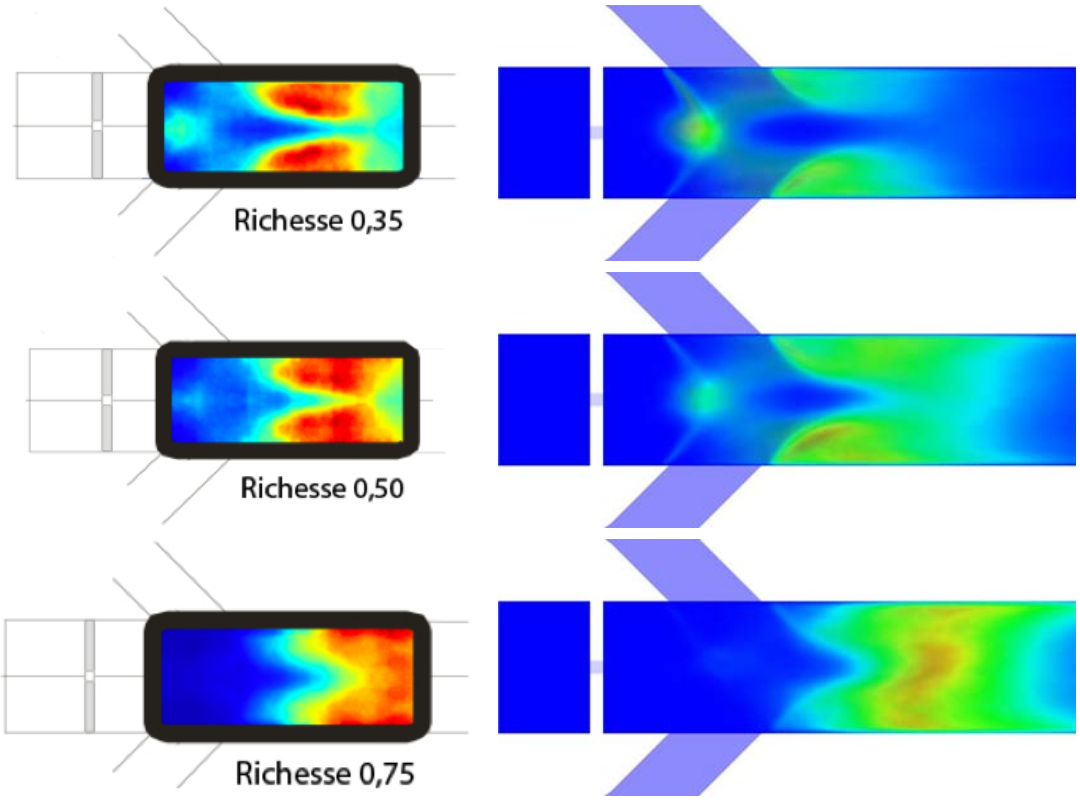


FIG. 12.7 - *Température pondérée par le dégagement de chaleur dans le plan médian à droite comparée à l'émission de radical OH expérimental (intégré dans la profondeur) à gauche. De haut en bas, =0.35, 0.5 et 0.75.*

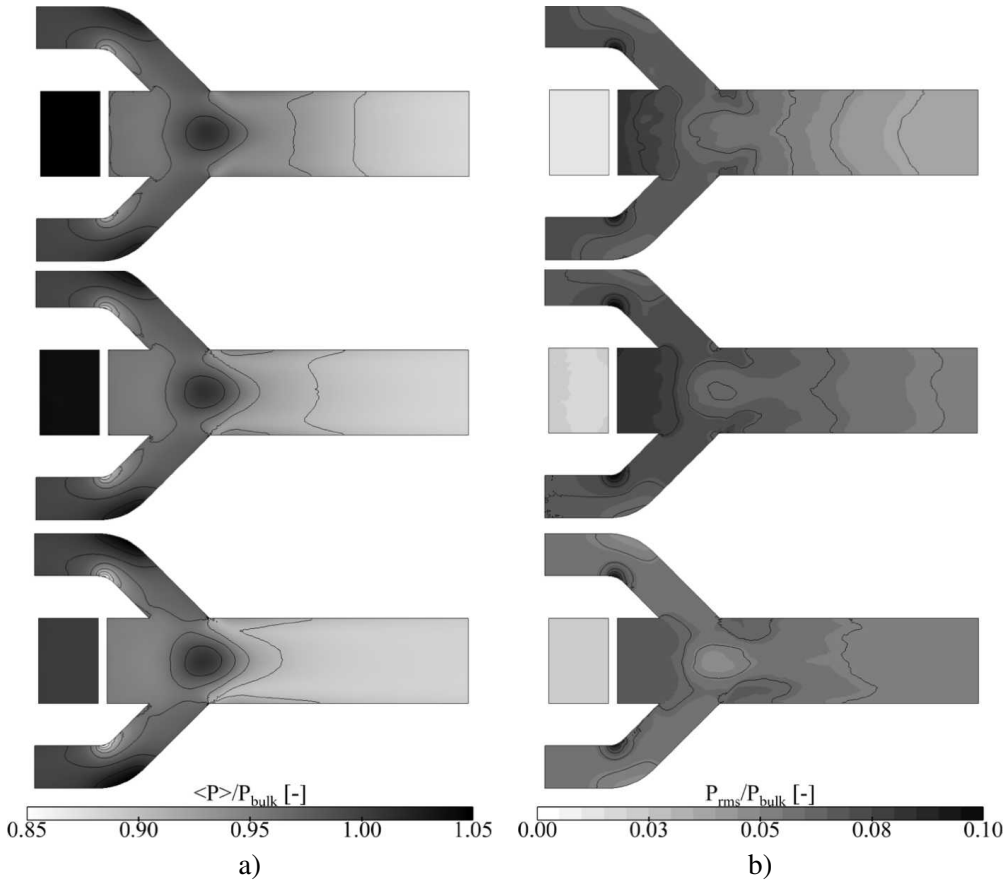


FIG. 12.8 - *Champs de pression dans le plan médian (x,y) adimensionnalisée par la pression moyenne dans les manches à air. a) moyenne et b) déviation standard. De haut en bas, =0.35, 0.5 et 0.75.*

Comportement de l écoulement dans les tuyères amonts

L'adaptation des tuyères amonts dépend en particulier de la pression inifinie avale[1], celle-ci étant de plus en plus élevée que la richesse augmente. Les jets issus de ces tuyères sont ainsi plus ou moins sous-détendu et leur zone d'in uence s'étend plus ou moins dans les manches à air. Les Figs. 12.9 et 12.10 décrivent l'évolution spatiale de la pression moyenne et uctuante dans la manche supérieure le long de l'axe de symmétrie. L'expansion du jet dans la manche est nettement visible. Si pour une richesse de =0.75, le choc normal se positionne à la fin du divergent de la tuyère (en X=-780 mm), un choc détaché apparaît pour les deux autres cas A et B avec également des chocs faibles qui sont ré échis sur les lignes de glissement issues des lèvres de la tuyère. Ceux-ci font ainsi plus de bruit à faible richesse. Cette modification de l'écoulement en fonction de la richesse va en particulier modifier l'impédance acoustique des tuyères.

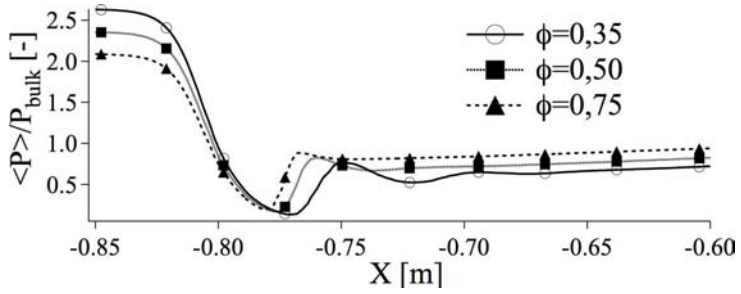


FIG. 12.9 - *Evolution de la pression le long de l'axe de symmétrie du col amont haut. Celle-ci est adimensionalisée par la pression moyenne dans le plan de référence pour le calcul de la vitesse débitante.*

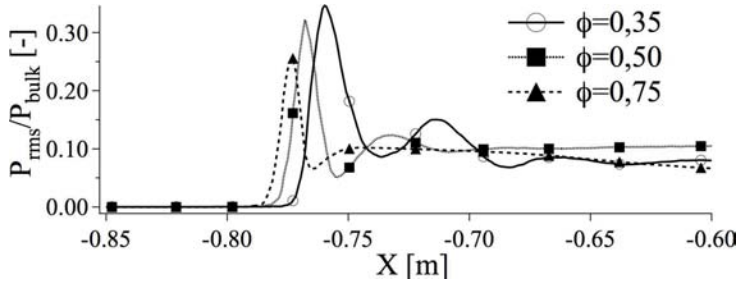


FIG. 12.10 - *Evolution de déviation standard du signal de pression le long de l'axe de symmétrie du col amont haut. Celle-ci est adimensionalisée par la pression moyenne dans le plan de référence pour le calcul de la vitesse débitante.*

Rendement de la chambre

Le Tab.12.2 résume les différents rendements de pression en fonction de la richesse globale afin de déterminer si les calculs SGE sont à même de rendre compte des performances globales de la chambre. Le rendement est calculé en faisant le rapport des pressions totales en deux points de la chambre, un premier situé dans les manches à air avant les coudes ($X = 0.033$ m) et un second avant la tuyère de sortie

[1] "infinie avale" par rapport à la tuyère et non la chambre

(X=1.106 m). L'accord est globalement très bon avec des rendements proches des valeurs expérimentales (erreur inférieure à 3%). Les pertes de charge sont ainsi de l'ordre de 15% quelque soit le régime.

Richesse globale	0.35	0.50	0.75
$_p$ Exp.	0.83	0.84	0.85
$_p$ AVBP	0.84	0.86	0.86

TAB. 12.2 - *Rendement de combustion $_p$ des trois cas simulés comparés à l'expérience Reichstadt* et al. *(2007).*

Le calcul du rendement de combustion n'est pas donné ici car il fait appel à une méthode itérative (AGA, 1994) inaccessible.

12.2 Résultats instationnaires

12.2.1 Principaux modes excités dans le statofusée

La section précédente a mis en avant des variations nettes de la distribution spatiale de température qui peut venir impacter l'excitation acoustique de la chambre. Dans la section suivante, on s'attache à décrire les différents modes excités dans chaque simulation, tant sur le point fréquentiel que sur leur distribution spatiale.

La Fig. 12.11 montre l'évolution spatiale du spectre des uctuations de pression réalisée en plaçant une série de 94 sondes le long d'un axe allant du col amont au col aval. La direction longitudinale est ici privilégiée. En effet, on ne s'intéresse pas dans cette partie aux hautes fréquences, celles-ci étant amorties dans les simulations avec ajustement de la préexponentielle. La localisation des manches à air se situe dans la branche [-800 ;200] mm et la chambre principale dans la branche [200 ;1300] mm. Globalement, on note une présence plus forte des hautes fréquences à richesse élevée. Deux bandes de fréquences se détachent : un premier mode à 110 Hz, très important dans le cas à $= 0.35$ et un second mode à 350 Hz-400 Hz, très important dans le cas à $= 0.75$. La simulation à richesse 0.5 semble être un cas intermédiaire. Elle exhibe en effet ces deux modes mais pour des amplitudes inférieures. Il est également intéressant de noter que les noeuds de uctuations de pression sont situés sensiblement aux même endroits et leur position évolue de la même manière en fonction de la fréquence. L'impact de la combustion est en particulier marqué en début du fût où on note des uctuations de pression importantes. Ce comportement spectral en fonction de la richesse globale est en très bon accord avec l'expérience. En effet, dans cette dernière, un pic à 108 Hz apparaˆt très nettement ainsi qu'un deuxième dans la gamme de fréquence 350-400 Hz pour le cas C et il en est de même pour le cas A, où la seconde bande de fréquence apparaˆt bien moins marquée tandis que le mode aux alentours de 100 Hz devient proéminant.

Le Tab. 12.3 récapitule les principaux modes excités dans chaque simulation et répertorie leur fréquence ainsi que le nombre de Helmholtz correspondant défini par $He = \frac{L f}{\bar{c}}$ où L est une longueur caractéristique de la géométrie, ici la distance entre les cols soniques amont et aval et $\bar{c}$ la vitesse moyenne du son dans la configuration. Les variations de ce nombre caractéristique mettent en avant le fait que les oscillations ne sont pas purement acoustiques. On note la présence de très basses fréquences (de l'ordre de la dizaine de Hertz) en amont des tuyères d'entrée où des variations de l'ordre de 2‰ sont notées. Bien que cette amplitude soit très faible, une question subsiste quant à l'impédance du réseau de choc des tuyères en amont et de son effet sur la transmission de ces basses fréquences vers l'aval de l'écoulement. Le temps de simulation n'étant pas assez long pour quantifier cette oscillation, on ne s'attachera par la suite qu'à décrire les modes pouvant être décrit par au moins deux périodes pleines (*i.e.* une fréquence de 30 Hz minimum).

Cinq modes sont communs aux trois simulations avec toutefois des amplitudes différentes. Ceux-ci ne sont pas tous décrits en raison de la richesse du spectre de chaque simulation. Afin de déterminer les modes principaux agissant au sein de la configuration, une décomposition en modes propres est appliquée sur chaque simulation où un temps physique de 100 ms a été simulé et discrétisé par 321 clichés. La norme utilisée repose sur l'énergie acoustique. Finalement, on décrit l'ensemble des modes qui permettent de rendre compte de 80% de l'énergie uctuante définie par cette norme, les premiers étant décrits en Fig. 12.12.

Il est intéressant de noter que les **Modes 1** et **3** issus de l'analyse POD impliquent la superposition

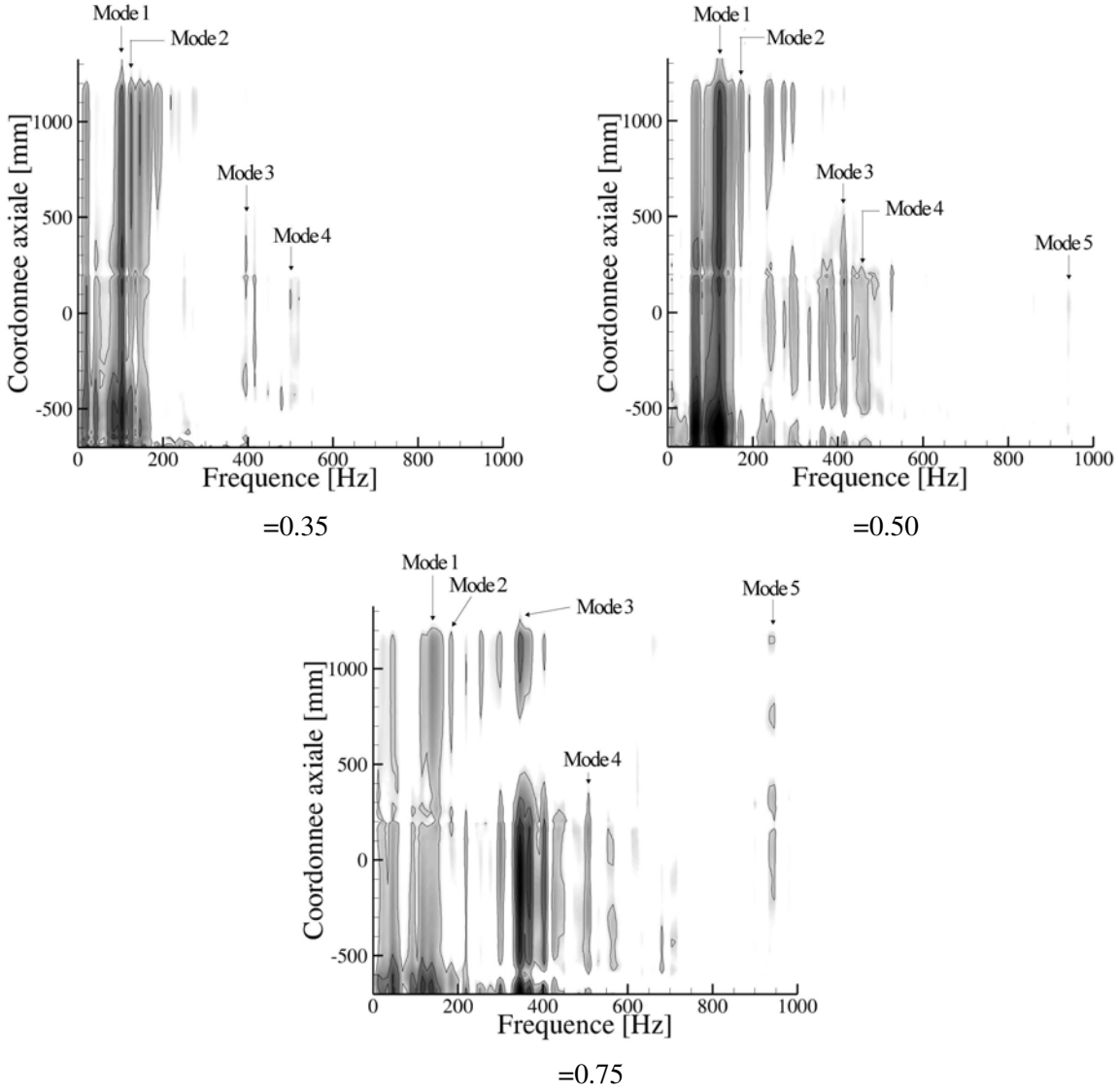


FIG. 12.11 - *Evolution spatiale du spectre des uctuations de pression le long d'un axe partant 0,1 m en aval des cols amonts (X = -700 mm) à la tuyère de sortie (X = 1300 mm) : du noir pour les fortes amplitudes au blanc pour les faibles.*

de deux modes mettant en avant le caractère propagatif des ondes associées à ces modes et non pas uniquement stationnaire tels qu'ils pourraient l'être s'ils étaient uniquement liés à un mode acoustique naturel de la chambre (Fig. 12.11).

La présence de plusieurs modes à basse fréquence dans le statofusée a été identifiée. Afin d'étudier leur impact sur la topologie de l'écoulement, on choisit de se focaliser sur les deux modes principaux excités dans la configuration : le **Mode 1** et le **Mode 3**.

On s'intéresse désormais à décrire la structure de ces deux modes identifiés comme moteur. Pour cela, deux cartes spectrales sont construites aux fréquences de ces modes pour chaque richesse. Les coefficients de Fourier sont par la suite moyennés dans les directions transverses Y et Z (en raison de

Mode	= 0.35 $\overline{c}$ = 656 m.s^{-1}		= 0.50 $\overline{c}$ = 685 m.s^{-1}		= 0.75 $\overline{c}$ = 713 m.s^{-1}	
	Freq.	He.	Freq.	He.	Freq.	He.
1	110 Hz	0.38	121 Hz	0.36	110 Hz	0.31
2	150 Hz	0.73	190 Hz	0.65	222 Hz	0.71
3	394 Hz	1.21	384 Hz	1.13	393 Hz	1.11
4	510 Hz	1.56	500 Hz	1.47	510 Hz	1.44
5	-	-	940 Hz	2.76	960 Hz	2.71

TAB. 12.3 - *Résumé des principaux modes excités dans les trois simulations et nombre de Helmholtz associé (basé sur la distance entre les isosurface de Mach sonique des cols amonts et avals, L=2,01 m et la vitesse du son moyenne pour chaque simulation). On notera que pour les modes 1 et 3, un pic à large bande apparaˆt et qu'ainsi la représentativité des fréquences présentées n'est pas exacte.*

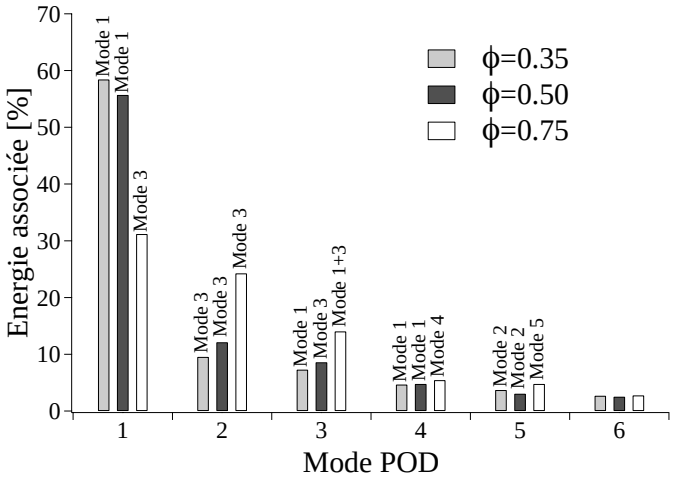


FIG. 12.12 - *Energie uctuante de chaque composante issue de la décomposition en mode propre de 321 clichés.*

l'activité purement longitudinale des modes) afin de décrire de manière mono-dimensionnelle ces modes. Toutefois, la boˆte de pré-injection et le bout du dôme ne sont pas pris en compte. La Fig. 12.13 permet de relier la coordonnée axiale à la position réelle dans le statofusée et les zones grisées montrent les positions qui n'ont pas été prises en compte.

La Fig. 12.14 représente l'évolution spatiale et temporelle de cette transformée de Fourier moyennée des uctuations de pression modulée par le temps à la pulsation des **Mode 1** et **Mode 3**, soit :

$$\mathscr{A}(\mathbf{x},t) = A_{FT}^{\text{mode 1/3}}(\mathbf{x}).cos\left(\ {}^{\text{mode 1/3}}_{FT}(\mathbf{x}) + \ {}^{\text{mode 1/3}}t\right) \tag{12.1}$$

L'importance de ces modes diffère selon le cas calculé. En effet, à la richesse =0.35, le **Mode 1** prédomine comme l'a montré la Fig. 12.11. Dans le fût, l'activité de ce mode semble être constante en fonction du temps tandis qu'il existe une modulation spatiale dans les manches à air avec un maximum

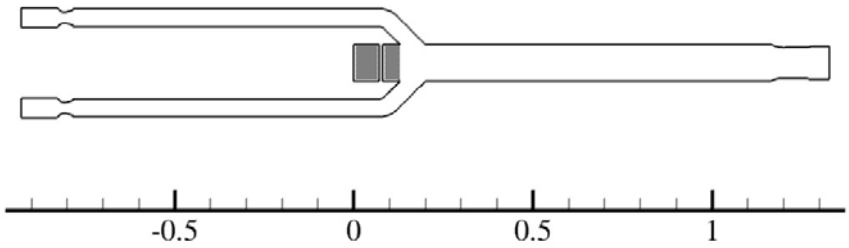


FIG. 12.13 - *Géométrie du statoréacteur et coordonnée axiale correspondante. La partie grisée correspond aux points qui ne sont pas pris en compte pour le tracé de la Fig. 12.14. La coordonnée spatiale est en m.*

d'amplitude relevé au niveau des jets issus des tuyères amonts [2]. Le **Mode 3** est caractérisé par la présence de plusieurs noeuds de pression. Un premier est visible dans la chambre de combustion, celui-ci se décalant vers l'amont avec la richesse. Dans les manches à air, on retrouve un noeud à la fin de la zone d'action des jets issus des tuyères. Ce dernier est plus ou moins bien défini. En effet, à des richesses inférieures à 0.50, ce noeud correspond à des uctuations de pression nulles tandis que pour le dernier cas à =0.75, des oscillations de pression comparables à celles dominant la chambre sont relevées. Le cas à =0.50 est un cas intermédiaire où les deux modes coexistent.

On notera que le recours à un solveur de Helmholtz comme AVSP n'est pas ici possible à cause de l'hypothèse de Mach nul et de la présence des diffuseurs d'entrée et du réseau de choc en aval de ces derniers.

Fréquences caractéristiques liées aux zones réactives

Les différents modes présents modulent la combustion dans la chambre principale. Dans l'expérience, une caméra haute résolution intensifiée a permis de capter les différents battement de la amme dans un hublot couvrant la sortie et l'aval des manches à air (Ristori *et al.*, 1999). Une analyse spectrale a donc été réalisée sur la température issue des simulations SGE en trois zones d'intérêt définies par la Fig. 12.15. Chaque signal a été intégré dans la profondeur. Celui-ci étant bruité par de basses fréquences, en particulier pour le cas C (phénomène retrouvé dans l'expérience (Reichstadt *et al.*, 2007)), on ne s'intéresse ici qu'aux fréquences représentées par au moins trois périodes de temps de simulation afin de concentrer l'étude sur l'impact des deux modes prépondérants dans le statofusée. La Fig. 12.16 donne les différents résultats obtenus pour les trois richesses et trois positions de capteur : un placé juste en aval de l'impact des jets, proche du point de stagnation de la chambre, un second dans le latéral haut au droit des manches à air et enfin, un dernier sur le plan de symétrie de la chambre (x,y) en aval des entrées d'air. A la richesse de 0.35, seul le **Mode 1** est visible et celui-ci est dominant dans le dôme pour les trois simulations même s'il est fortement atténué pour le cas C. Dans le latéral et à la sortie, les deux modes 1 et 3 modulent la combustion.

[2] constat également visible sur le **Mode 3**

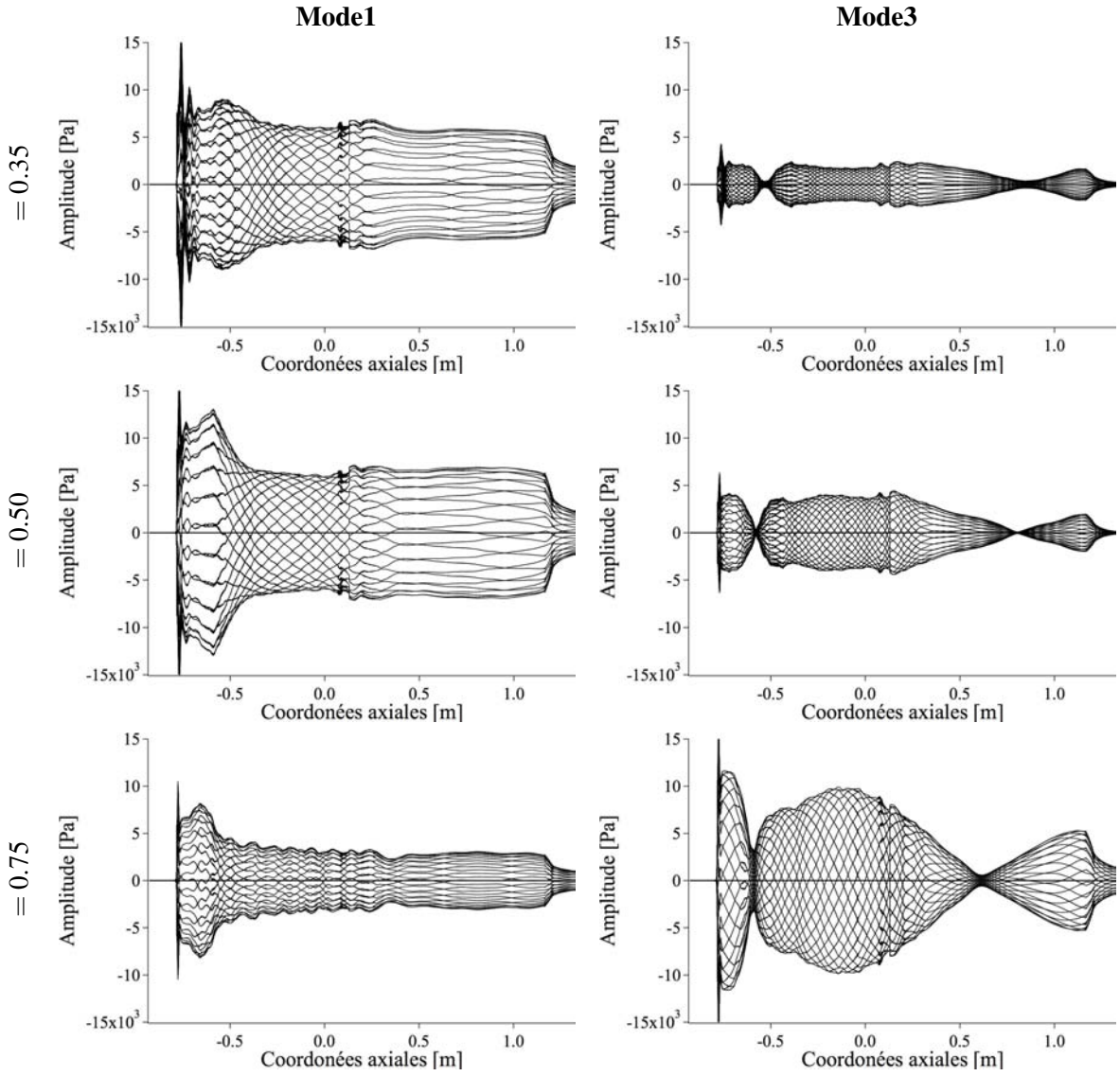


FIG. 12.14 - *Evolution temporelle de la structure spatiale des uctuations de pression à la fréquence du* **Mode 1** *et du* **Mode 3** *telle que décrite par l'Eq. 12.1.*

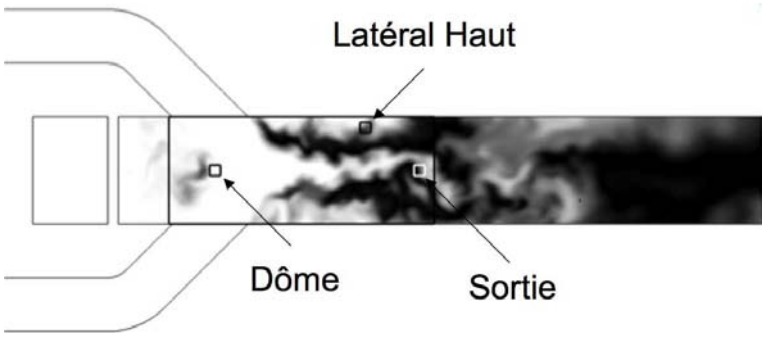


FIG. 12.15 - *Positionnement des différentes sondes au niveau desquelles l'analyse spectrale de la température est appliquée (cette dernière étant intégrée dans la profondeur)*

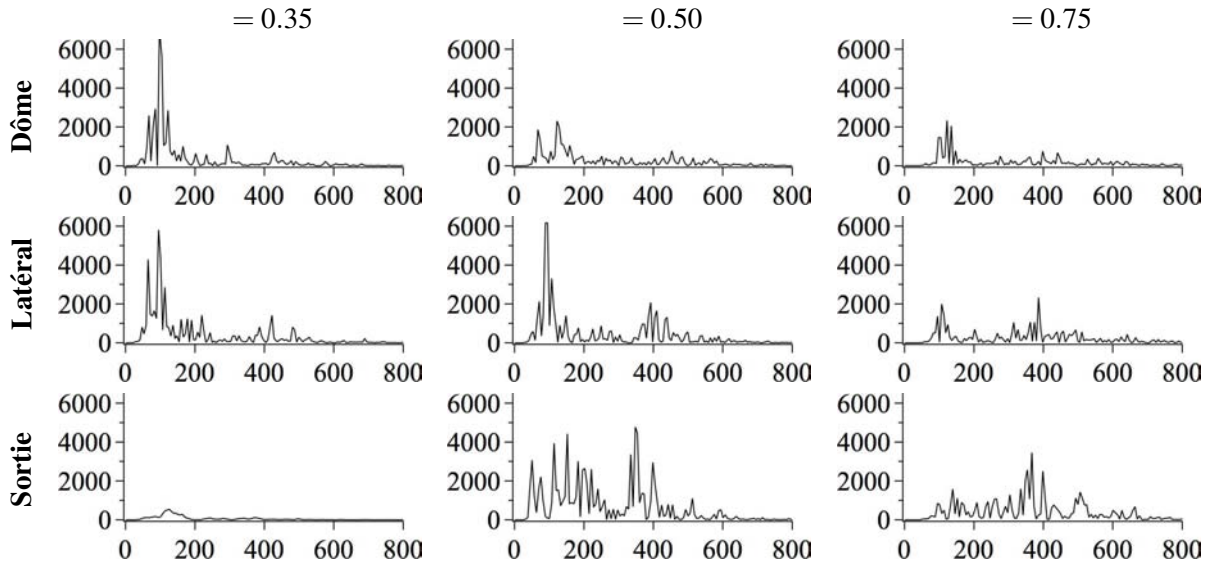


FIG. 12.16 - *Analyse spectrale de la température intégrée dans la profondeur (selon Z) aux trois positions indiquées par la Fig. 12.15 : Amplitude des uctuations de température [K.Pa] en fonction de la fréquence [Hz]*

12.3 Processus de combustion dans le statofusée

La section précédente a permis de mettre en évidence deux modes acoustiques qui venait impacter la combustion, le **Mode 1** et le **Mode 3**. Dans cette partie, on s'intéresse maintenant à décrire en détail les mécanismes de combustion présents dans la chambre en fonction de ces deux modes. La première sous-partie s'attache à présenter la combustion pour le régime de plus haute richesse (=0.75) pour lequel le **Mode 3** apparaˆt comme dominant et la partie suivante au régime proche de l'extinction pauvre, la simulation à richesse 0.35 où le **Mode 1** est le plus intense.

12.3.1 Etude détaillée du Mode 3, cas C (=0.75)

Le **Mode 3** est représenté par une gamme de fréquence assez large ($\approx$ 100 Hz). L'intervalle de temps représente ici 10 périodes du **Mode 3** pour la simulation à =0.75.

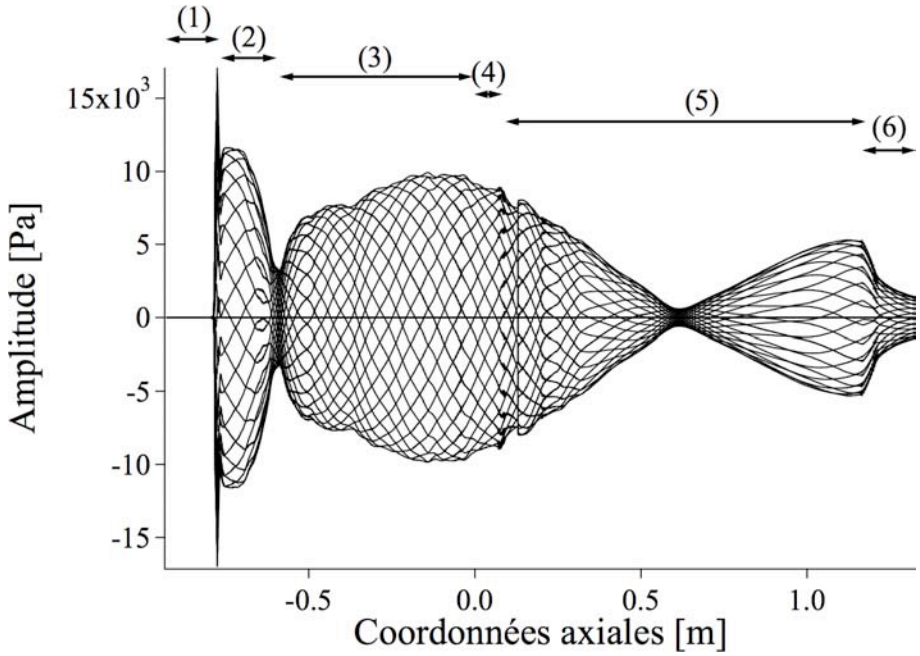


FIG. 12.17 - *Evolution temporelle de la structure spatiale des uctuations de pression à la fréquence du* **Mode 3** *et décrite par l'Eq. 12.1.*

Différentes parties sont identifiables et numérotées de (1) à (6) :

- La zone (1) délimite la zone en amont du col sonique des tuyères d'entrée où aucune uctuation n'est visible, l'écoulement étant supersonique après le col. Il en va de même pour la zone (6) où les uctuations de pression sont évacuées de la configuration. On note en particulier pour cette dernière zone l'in uence du col amorcé : une relation telle que $u = 0$ ou $p = 0$ n'est pas suffisante pour représenter l'impédance de la tuyère et justifie l'incorporation de cette dernière ainsi que des deux tuyères amonts.
- La zone (2) représente les uctuations dues à la présence des jets en sortie de tuyères, en particulier les réseaux de chocs ainsi que la ligne de glissement comme identifiés par la Fig. 12.10.

– La zone (4) étant un artefact dû au postraitement des données (hypothèse d'évolution quasi-1D de la géométrie en défaut), un saut artificiel est détecté. Les zones (3) et (5) ne forment qu'une seule et même zone avec en particulier un ventre de pression situé à la fin des manches à air.

On note en particulier la présence d'un noeud de pression dans la chambre principale à l'abscisse $X = 0,6$ m et une seconde zone peut également être identifiée dans les manches à air à l'abscisse $X = -0.59$ m où les uctuations de pression sont faibles mais présentes. Afin de mieux comprendre l'évolution spatiale des ondes dans le statofusée, la Fig. 12.18 ne représente que neuf de ces courbes pour un intervalle de temps correspondant au quart d'une période du **Mode 3**. Dans la chambre principale, celles-ci évoluent en phase avec un noeud identifié à l'abscisse X≈0.6 m. Au contraire, dans les manches, une propagation des ondes de pression est observée ainsi qu'une interaction forte avec la tuyère amont.

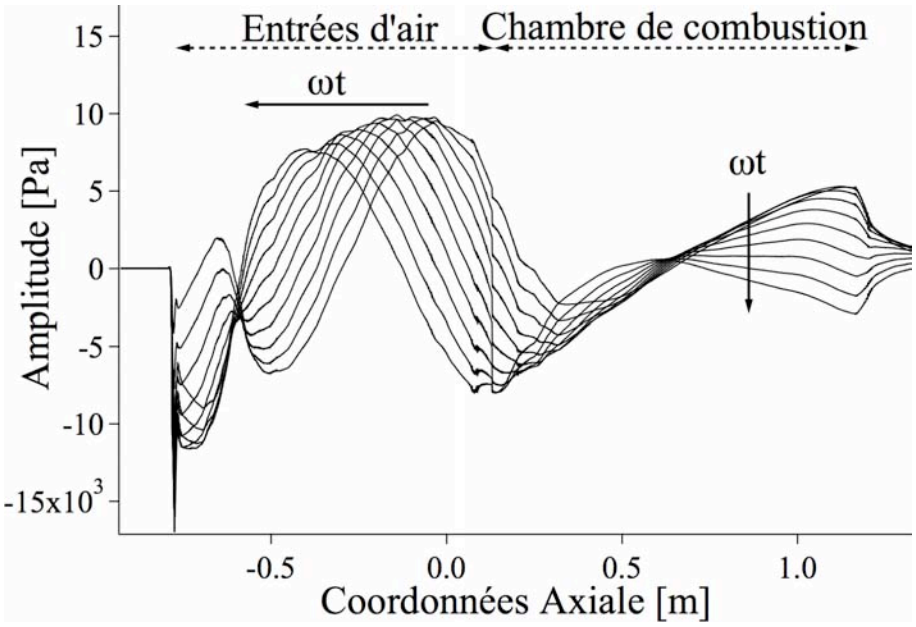


FIG. 12.18 - *Enveloppe des uctuations de pression à la fréquence du* **Mode 3** *pour le cas C.*

Ainsi, il semble exister une réponse acoustique naturelle de la chambre principale à la fréquence du **Mode 3** tandis que les manches à air subissent en réalité un forçage acoustique à cette fréquence. Afin de mieux qualifier ce forçage, on étudie par la suite la propagation des ondes acoustiques L^1 et L^5 dans le statofusée. Celles-ci sont définies de manière linéarisée par les relations suivantes :

$$\underline{\text{Ondes acoustiques :}} \quad L^1 = \left(\frac{p_1}{p_{0\ 0}} - \frac{u_1}{c_0}\right)$$
$$L^5 = \left(\frac{p_1}{p_{0\ 0}} + \frac{u_1}{c_0}\right)$$

La Figure 12.19 représente l'évolution de ces deux ondes pour une période du **Mode 3**. Deux phénomènes sont identifiés : le premier concerne l'évolution en opposition de phase des ondes L^1 et L^5 dans la chambre principale mettant en avant la présence d'un mode acoustique identifié comme mode demi-onde du fût. On note toutefois que l'impédance de la tuyère avale ne se simplifie pas à une condition classique du type u'=0 ou p'=0 ce qui modifie légèrement la forme du mode. La deuxième

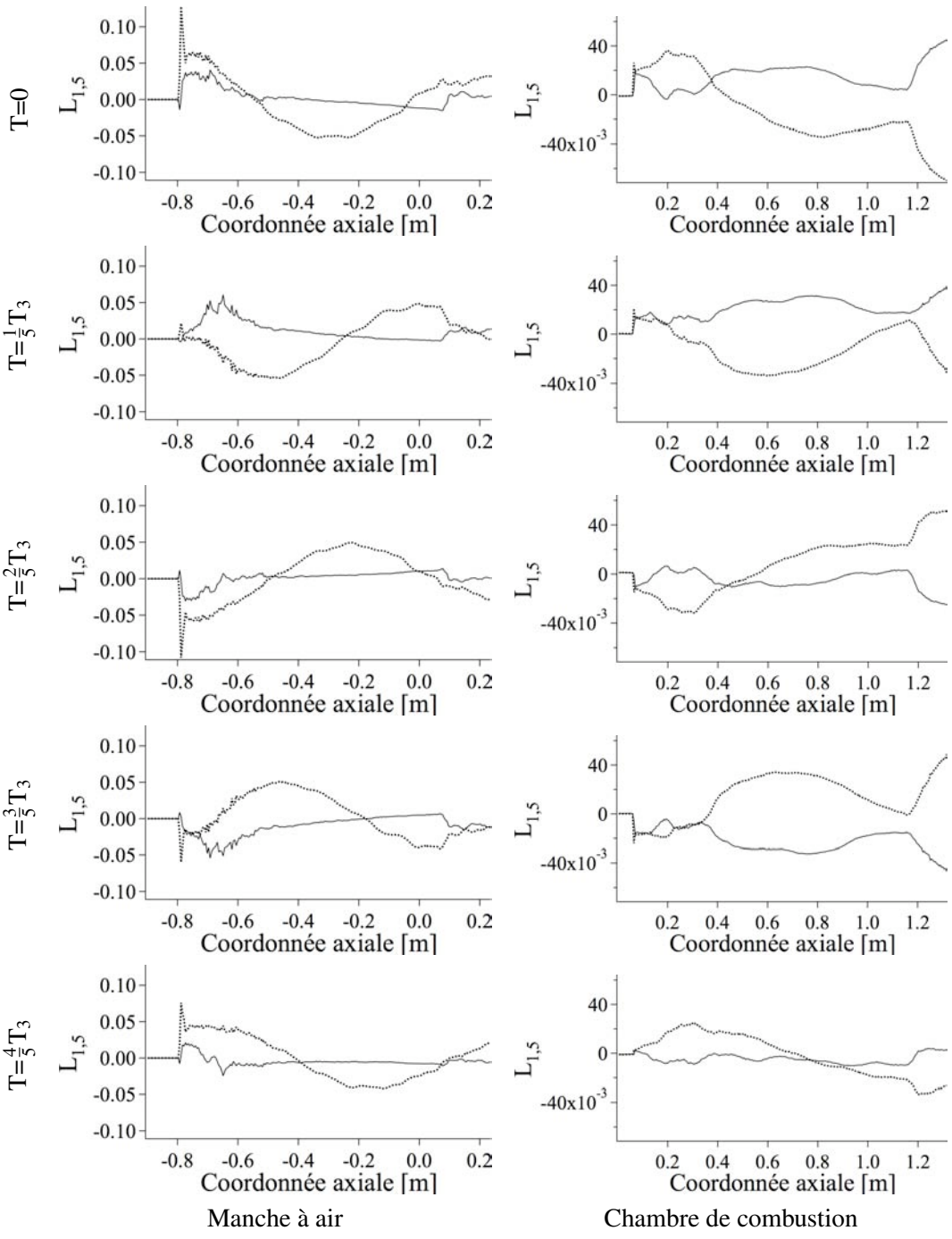


FIG. 12.19 - *Evolution temporelle des ondes L^1 et L^5 en fonction de la position axiale dans le statofusée et pour une période T_3 du* **Mode 3**. *... : L_1, − : L_5*

remarque concerne la propagation des ondes L^1 vers l'amont du statofusée, l'entrée des manches à air co¨ncidant avec un ventre de pression du mode précédemment identifié. Cet envoi d'onde n'est pas sans conséquence. Effectivement, celles-ci vont venir se ré échir sur les chocs en aval des tuyères amont et créer des ondes L^5 qui vont venir interagir avec le fût. Ce point peut en particulier expliquer la largeur

du **Mode 3** tel qu'il l'a été observé Fig. 12.11.

Le **Mode 3** est donc lié à une activité acoustique longitudinale. En particulier, la présence d'un fort ventre de pression dans la fin des manches à air et dans le dôme vient modifier l'écoulement comme le montre la Fig. 12.20. Les larges oscillations de pression (de l'ordre de 10% de la pression moyenne) mènent à des variations de débit (de l'ordre de 20% du débit moyen) en opposition de phase.

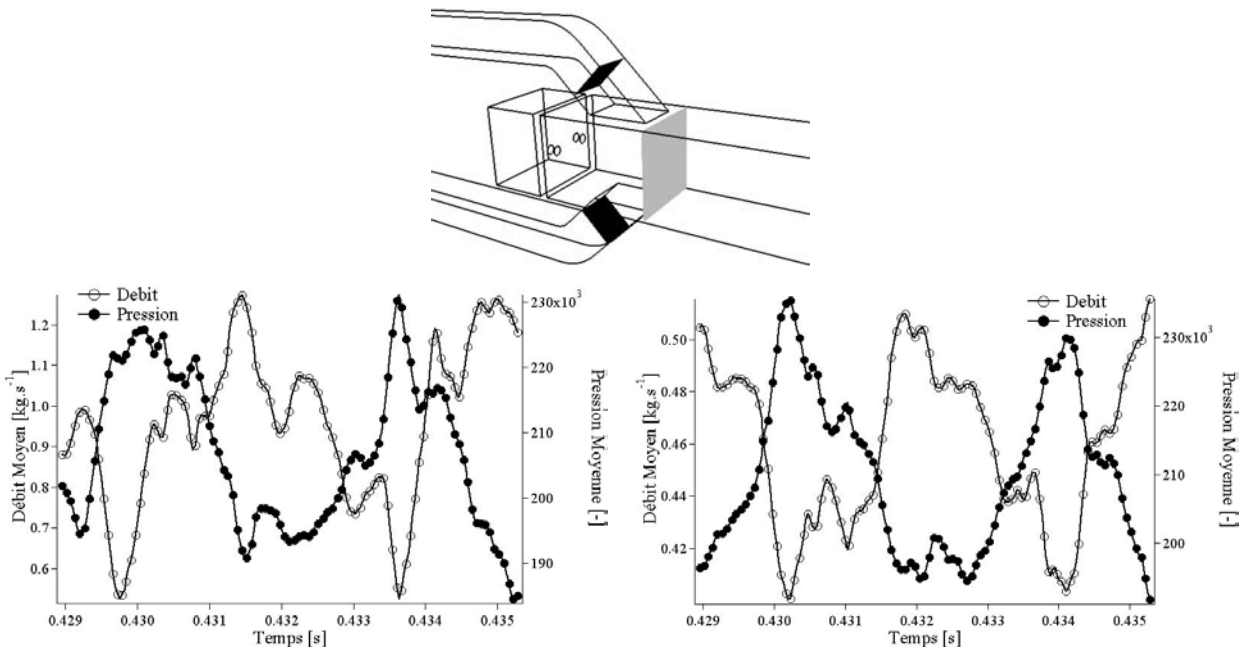
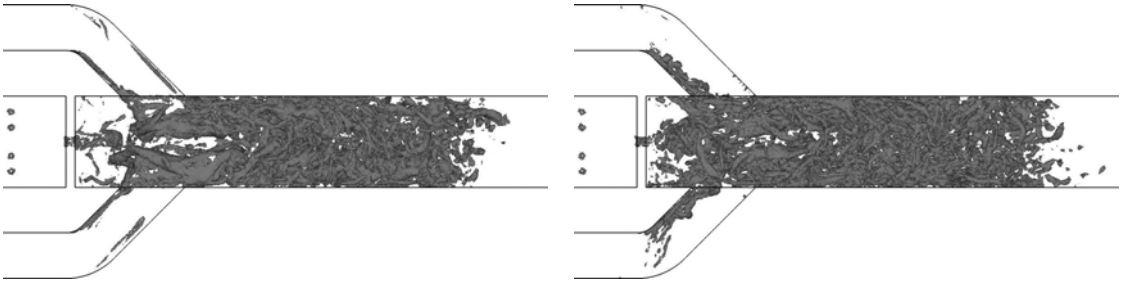


FIG. 12.20 - *Evolution du débit et de la pression moyennés sur un plan situé dans le coude de la manche à air supérieure et un dans la chambre principale. Deux périodes du* **Mode 3** *sont identi ées : le graphe à gauche correspond au plan supérieur en noir et celui à droite au plan en gris.*

Ce phénomène de blocage aérodynamique issu des variations de débits relevées précédemment in ue fortement les distributions spatiales de vitesse dans la chambre de combustion comme le montrent les Figs. 12.21 et 12.22 :

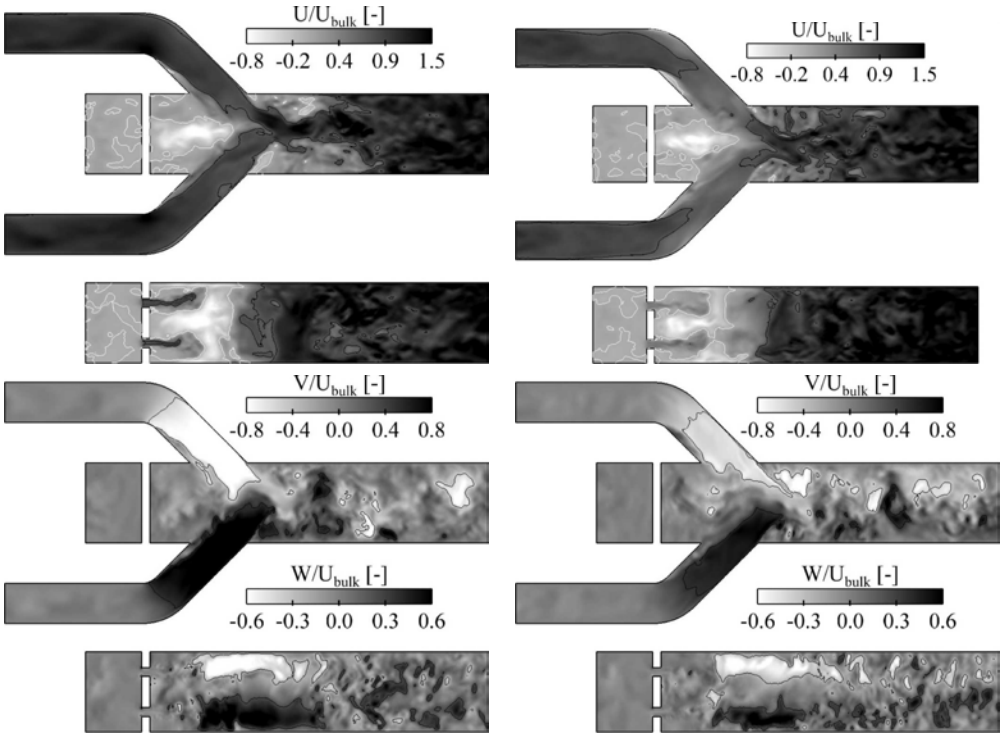
- Lorsque le blocage est minimum, Figs. 12.21 et 12.22 a), la nappe de vitesse créée par les jets provenant des manches à air renforce la circulation des écoulements hélico¨daux de coins comme l'atteste la Fig. 12.21. Celle-ci représente deux iso-volumes du critère Q Hussain & Jeong (1995) lors du minimum (a) et du maximum (b) du blocage aérodynamique. L'impact de ce phénomène est notable sur la figure a) où les multiples tourbillons formant les quatre écoulements hélico¨daux ne forment qu'une seule et même structure. La séparation entre le dôme et le droit des manches à air est ainsi nette tandis que l'écoulement en provenance du dôme peut contourner la nappe grâce à ces quatre tourbillons. De fortes zones de recirculation sont créées dans le dôme ainsi que dans le latéral au droit des manches à air. On note également que la dépression entre le dôme et la boˆte de préinjection de carburant mènent à de fortes vitesses au niveau des deux trous d'injection à la base du fût et à une injection de carburant accrue en amont du fût.
- Lorsque le blocage est maximum, Figs. 12.21 et 12.22 b), un décollement important apparaˆt dans les coudes des manches et une quantité importante d'air est amenée dans le dôme, y favorisant le mélange avec la quantité importante de carburant introduit lors de la phase précédente. La combus-

tion y est ainsi favorisée, la richesse locale étant fortement diminuée. Les zones de recirculation dans le dôme et dans le latéral au droit des manches à air sont convectées vers l'aval. Celles-ci vont alors brûlées. Ce phénomène sera illustré par la suite.



a) Minimum b) Maximum

FIG. 12.21 - *Critère Q (5 $\left(U_{bulk}\ D\right)^2$) pris à une demi-période d'intervalle du* **Mode 3** *: $T = 0$ et $T = \frac{1}{2}T_3$.*



a) Minimum b) Maximum

FIG. 12.22 - *Champs instantanées de vitesse axiale, verticale et orthogonale adimensionnalisées dans les plans (x,y) en haut et (x,z) en bas pris à une demi-période d'intervalle du* **Mode 3** *: simulation à =0.75.*

Ces phénomènes sont essentiels pour la stabilisation de la amme. La Fig. 12.23 montre quatre clichés pris à quatre phases du **Mode 3** et permet d'appréhender ce phénomène. Cette figure met en parallèle le blocage aérodynamique représenté par des iso-volumes de vitesse verticale en blanc et en gris clair, les différentes zones de recirculation en gris foncé et les zones de hautes températures en noir. Au début du blocage aérodynamique, des zones de recirculation en aval permettent de stabiliser la amme qui peut remonter vers l'amont en particulier au niveau des tourbillons de coin qui sont déstructurés (cf.

Fig.12.21). Au fur et à mesure que le blocage disparaît, l'écoulement s'organise, les différentes zones de recirculation sont convectées vers l'aval en même temps que les zones de recirculation du dôme qui sont relachées. Celles-ci étant chargées en carburant, la combustion peut s'entretenir. Finalement, le blocage se remet en place et la flamme peut remonter l'écoulement à nouveau grâce aux zones de vitesse axiale négative et le cycle suivant s'installe.

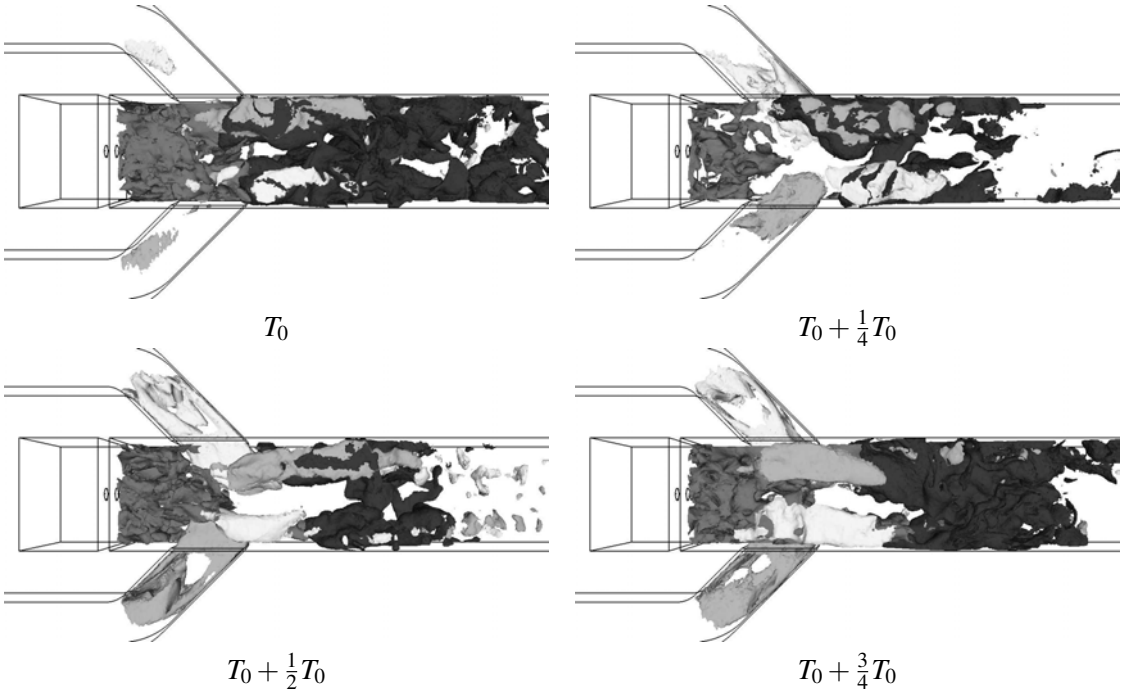


FIG. 12.23 - *Isosurface de vitesse axiale nulle en gris foncé, de vitesse verticale adimensionnée (-1 en gris clair et 1 en blanc) et de température en noir à quatre instants du* **Mode 3**.

Il a été montré dans le chapitre précédent que la présence de flammes dont la structure rappelle les flammes triples aidait à la stabilisation du processus de combustion monophasique dans le statofusée. Celles-ci se positionnent à la frontière des tourbillons de coin, fortement chargé en carburant et permettant la convection de ces derniers vers la tuyère de sortie. Si la présence de ce type de flamme est nette sur certaines figures, il est toutefois difficile de capter leur mouvement, celles-ci étant affectées par le mouvement de la nappe de vitesse ainsi que par les tourbillons de coin comme il l'a été montré dans d'autres configurations comme celle de Veynante *et al.* (1994) ou de Domingo & Vervisch (1996).

On s'attache désormais à caractériser plus précisément la structure de flamme à l'aide de diagrammes de mélange. La Fig. 12.24 montre l'évolution de la densité de probabilité du taux de réaction en fonction de la fraction de mélange Z définie par :

$$Z = \frac{sY_{C_3H_8} - Y_{O_2} + Y^0_{O_2}}{sY^0_{C_3H_8} + Y^0_{O_2}},\ s = 3,636,\ Y^0_{O_2} = 0,23,\ Y_{C_3H_8} = 1,0 \tag{12.2}$$

Et qui permet de définir la richesse locale :

$$= \frac{1-Z_{st}}{Z_{st}} \frac{Z}{1-Z}, \text{ avec } Z_{st} = 0,055 \tag{12.3}$$

La Fig. 12.24 met en parallèle deux PDF de dégagement de chaleur en fonction de la fraction de mélange locale pour le minimum et le maximum du blocage aérodynamique. Celles-ci mettent en avant trois pics dans les diagrammes de combustion, un premier à richesse pauvre centré à =0.39 ou 0.47, un second à richesse riche centré à =1,59 ou 1,46 et un dernier autour de la stœchiométrie. Si le pic de combustion riche peut se positioner dans le dôme où le carburant est en excès, ce diagramme est similaire à celui d'une amme triple où la zone de réaction s'organise autour d'un point triple duquel trois ammes distinctes s'organisent : une amme prémélangée pauvre du côté où l'air est en excès, une amme prémélangée riche du côté où le carburant est en excés et enfin, une amme de diffusion. L'avantage de ce mode de combustion est qu'il présente une vitesse de amme turbulente importante et permet de stabiliser plus facilement la amme.

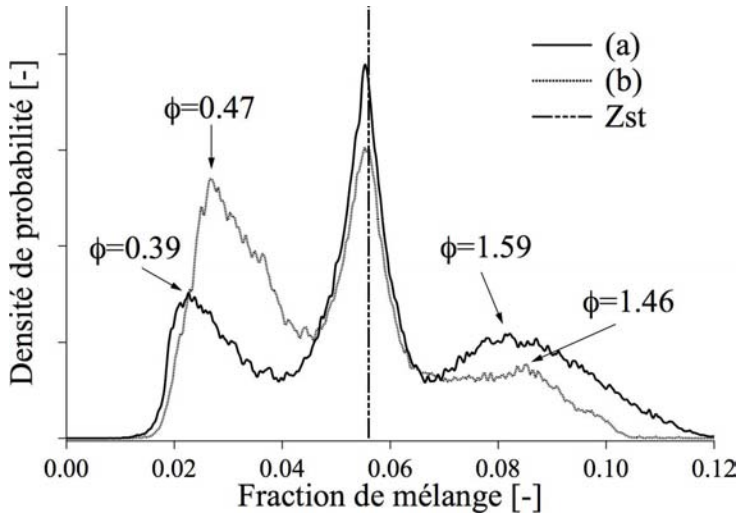


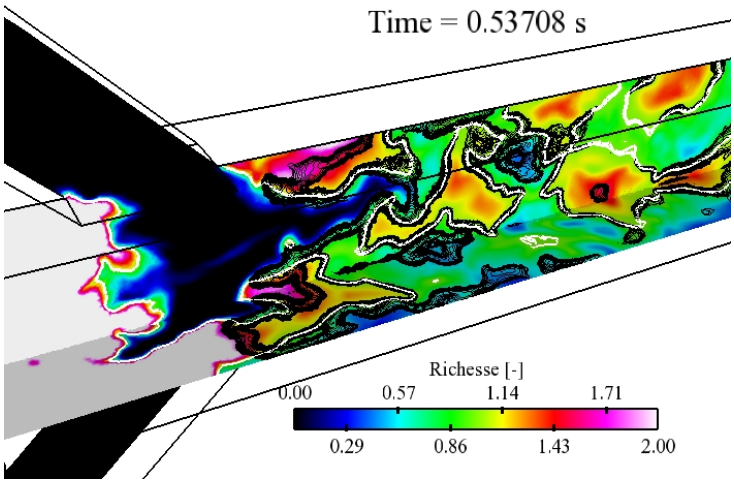
FIG. 12.24 - *Densité de probabilité du taux de réaction en fonction de la fraction de mélange ($Z_{st} = 0,055$). Les cas a) et b) correspondent à la Fig. 12.21, soit respectivement au minimum et au maximum du blocage aérodynamique.*

Afin de pouvoir détecter une telle amme, on s'intéresse au taux de réaction indexé par l'indice de Takeno, comme défini par Réveillon & Vervisch (2005) :

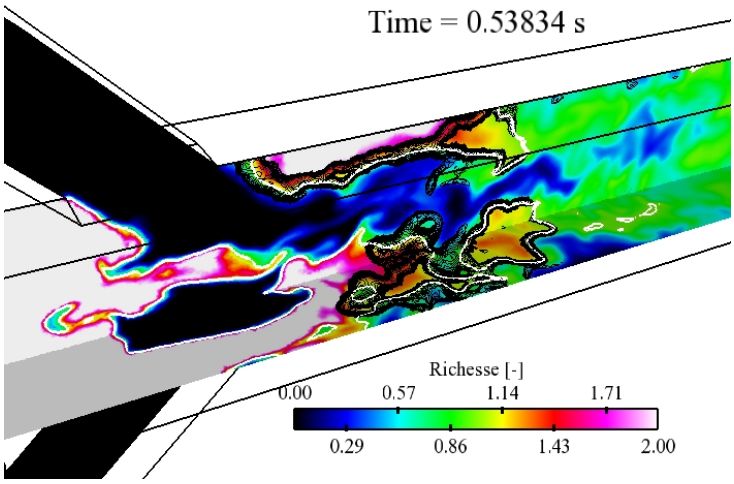
$$\overset{*}{}_F = \quad _F \frac{\vec{\nabla} Y_F \cdot \vec{\nabla} Y_O}{\vec{\nabla} Y_F \cdot \vec{\nabla} Y_O} \tag{12.4}$$

La Fig. 12.25 montre des clichés pris à T_0 et $T_0 + \frac{1}{2}T_0$ de la richesse locale auxquels ont été rajoutés des isocontours de taux de réaction et de richesse unitaire. Les champs de Takeno correspondants sont également présentés. Flammes de prémélange et de diffusion se côtoient. On note la présence de ammes triples non seulement dans le plan médian (x,y) mais également aux niveaux des tourbillons de coin. Celles-ci sont distordues par l'interaction des différents tourbillons (Veynante *et al.* (1994)). L'impact des tourbillons est marquant. Lorsque le blocage est minimum, la circulation des écoulements hélico¨daux est importante et la quantité de carburant convectée vers l'avant est accrue. Ces tourbillons étant très chargés

en propane, la amme ne peut s'y maintenir et se détache. Au contraire, lors du maximum du blocage, les tourbillons diminuent en intensité et la amme peut s'accrocher aux extrémités avales et ainsi remonter l'écoulement avec les tourbillons. Le maximum de dégagement de chaleur montre que la combustion s'organise autour d'anneau entourant ces tourbillons. Ceux-ci correspondent à l'ensemble des points triples de la amme comme montré par la Fig. 12.26. La amme de prémélange riche fait le lien entre les points triples et vient s'installer au centre des tourbillons tandis que la amme de prémélange pauvre est rabattue sur la amme de diffusion en raison du fort différentiel de vitesse provenant de la nappe issue des manches à air.



a) Minimum



b) Maximum

FIG. 12.25 - *Richesse locale dans les plan de symétrie (x,y) et (x,z), iso-contours de dégagement de chaleur entre* 2.10^8 *et* $2.10^{10}\,W.m^{-3}$ *en noir et ligne stoechiométrique en blanc*

La Fig. 12.27 permet de décrire le transitoire entre un minimum et un maximum du blocage aérodynamique. Lorsque la circulation des tourbillons se renforce, une quantité supplémentaire de carburant est injectée au centre des anneaux que forment les points triples. Une poche de carburant se forme alors, entourée par la amme de prémélange pauvre issue des ammes triples, elle-même

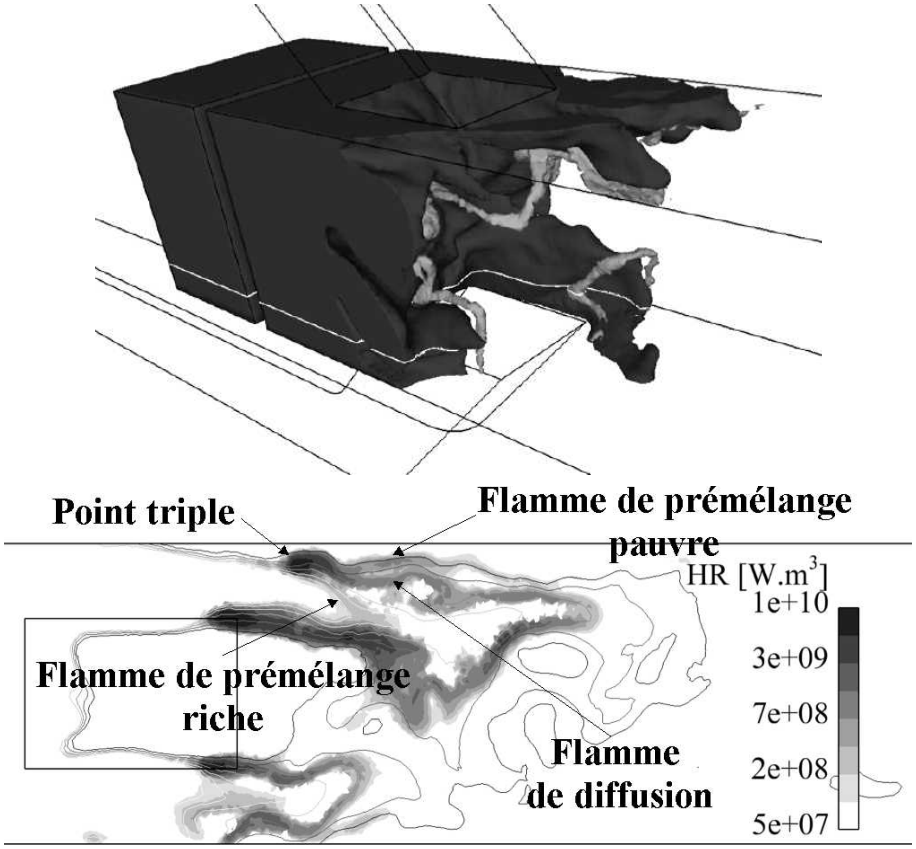


FIG. 12.26 - *En haut : iso-surface de fraction massique de carburant ($Y_{C_3H_8}$=0,055) en noir, iso-surface de dégagement de chaleur à 10^{10} W.m^{-3} en gris. Le trait en blanc représente le plan décrit en bas : champ de dégagement de chaleur et iso-contours de richesse entre 0.5 et 1,5. La structure d'une amme triple est décrite en particulier.*

entourée d'une amme de diffusion. Ces poches sont ensuite convectées vers l'aval pour finir par brûler en diffusion pure en raison de la vitesse de l'écoulement. Ce phénomène de combustion par poches a également été révélée dans l'expérience en PLIF (Reichstadt *et al.*, 2007).

Les Figs. 12.28 et 12.29 permettent de décrire un cycle complet du **Mode 3** en terme de combustion. Le minimum du blocage correspond à la sous-figure 11). La propagation des ammes triples y est soulignée, par exemple sur les figs 12.28 6) à 12) le long de la fenêtre de la manche à air supérieure (*i.e.* du coin supérieur droit au coin supérieur gauche). On notera surtout que l'intervalle de temps du **Mode 3** n'est pas suffisament long pour permettre à la amme de remonter jusqu'au dôme. La Fig. 12.29 représente les diagrammes de mélange pour chacune des sous-figures de la Fig. 12.28. Les points sont répartis en fonction du taux de réaction, de la fraction de mélange locale ainsi que de la position axiale. Loin du dôme (en bleu sur les figures), la combustion est principalement caractérisée par les poches qui brûlent d'abord en riche (9 13) puis en diffusion. Le régime non-prémélangé est visible sur toutes les sous-figures car la amme est convectée jusqu'à la sortie[3].

En conclusion, au niveau des tourbillons de coin, une amme triple se développe grâce à l'apport

[3]Même si la combustion est terminée avant d'atteindre la tuyère avale.

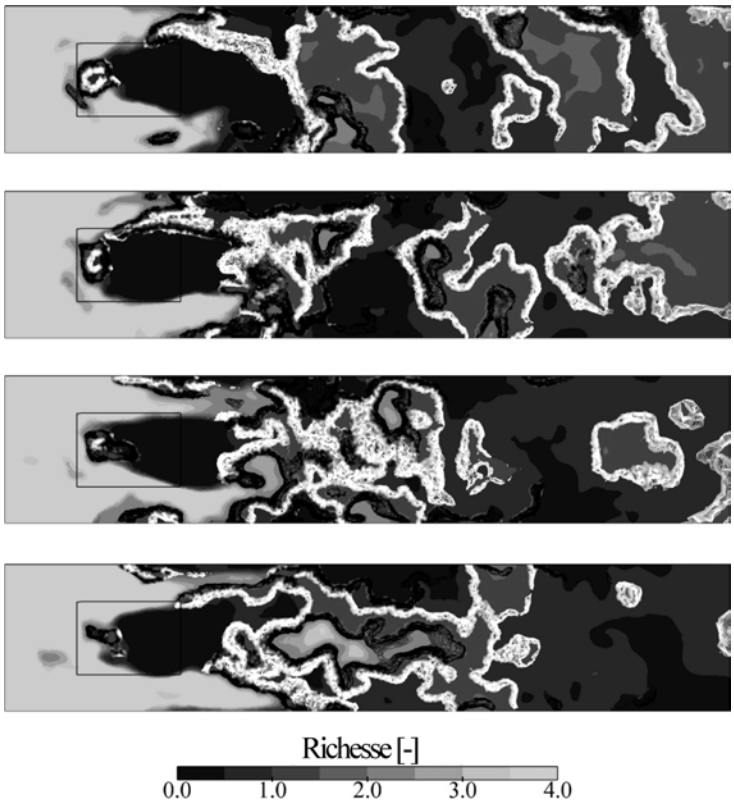


FIG. 12.27 - *Champs instantanés de richesse locale et iso-contours de taux de réaction indexé par l'indice de Takeno (amme de prémélange en noir et de diffusion en blanc). Cas C.*

massif de carburant réalisé par les structures cohérentes. Le blocage aérodynamique permet de créer une zone de recirculation en amont de la amme ce qui vient la stabiliser à l'interface. Lorsque le blocage aérodynamique se termine, la amme est repoussée vers l'aval, la circulation des tourbillons s'intensifie, favorisant la convection de carburant vers l'aval qui permet d'entretenir les différentes ammes triples. Les poches de gaz brassés dans le dôme sont alors en ammés et convectés vers l'aval grâce à leur connexion avec ces premières zones de combustion.

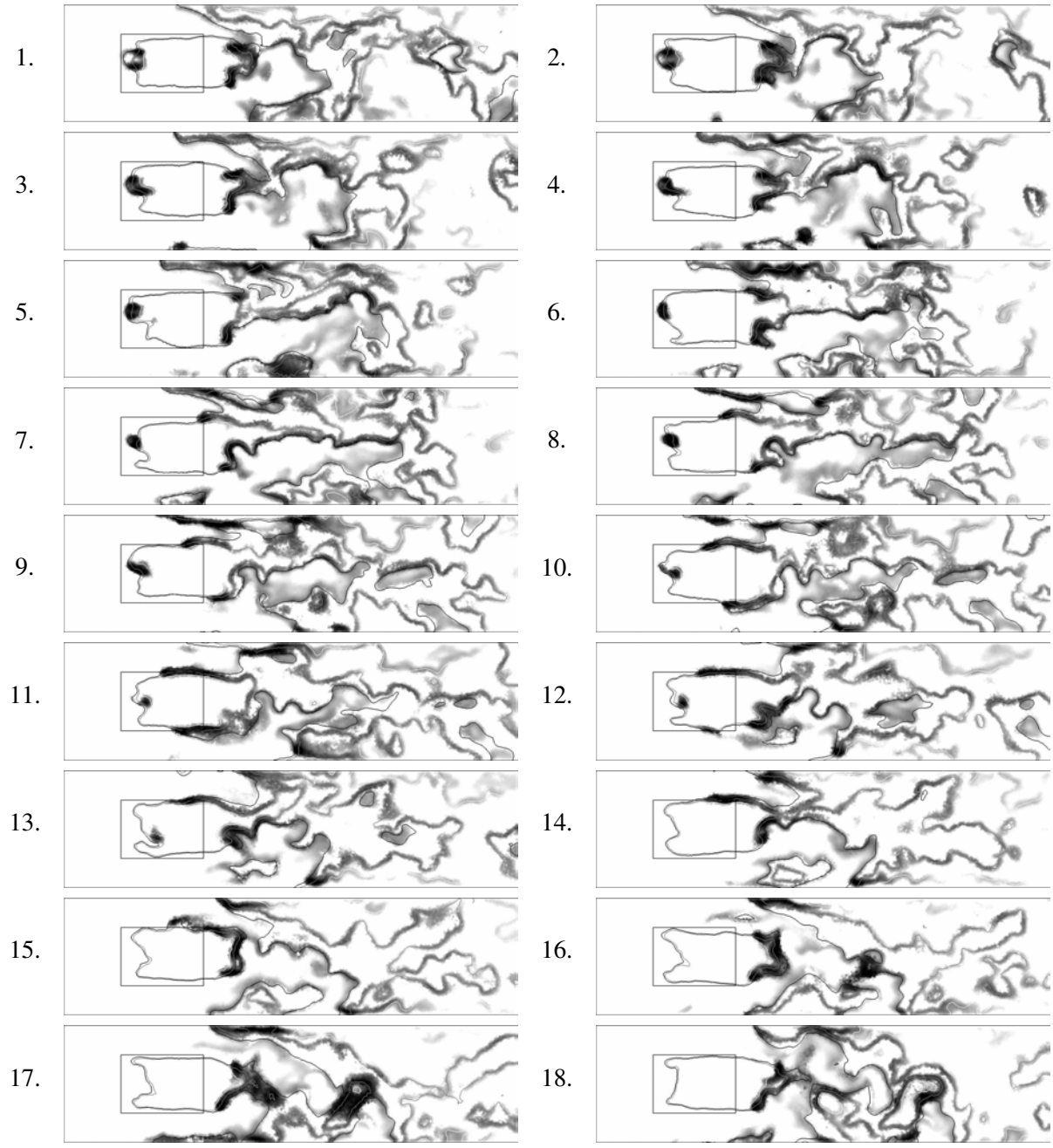


FIG. 12.28 - *Champs instantannés de taux de réaction (entre 10^2 et 10^4 $W.mol^{-1}.m^{-3}$) et iso-contours de richesse locale (=0.5 en blanc, 1.0 en gris et 1.5 en noir). Cas C.*

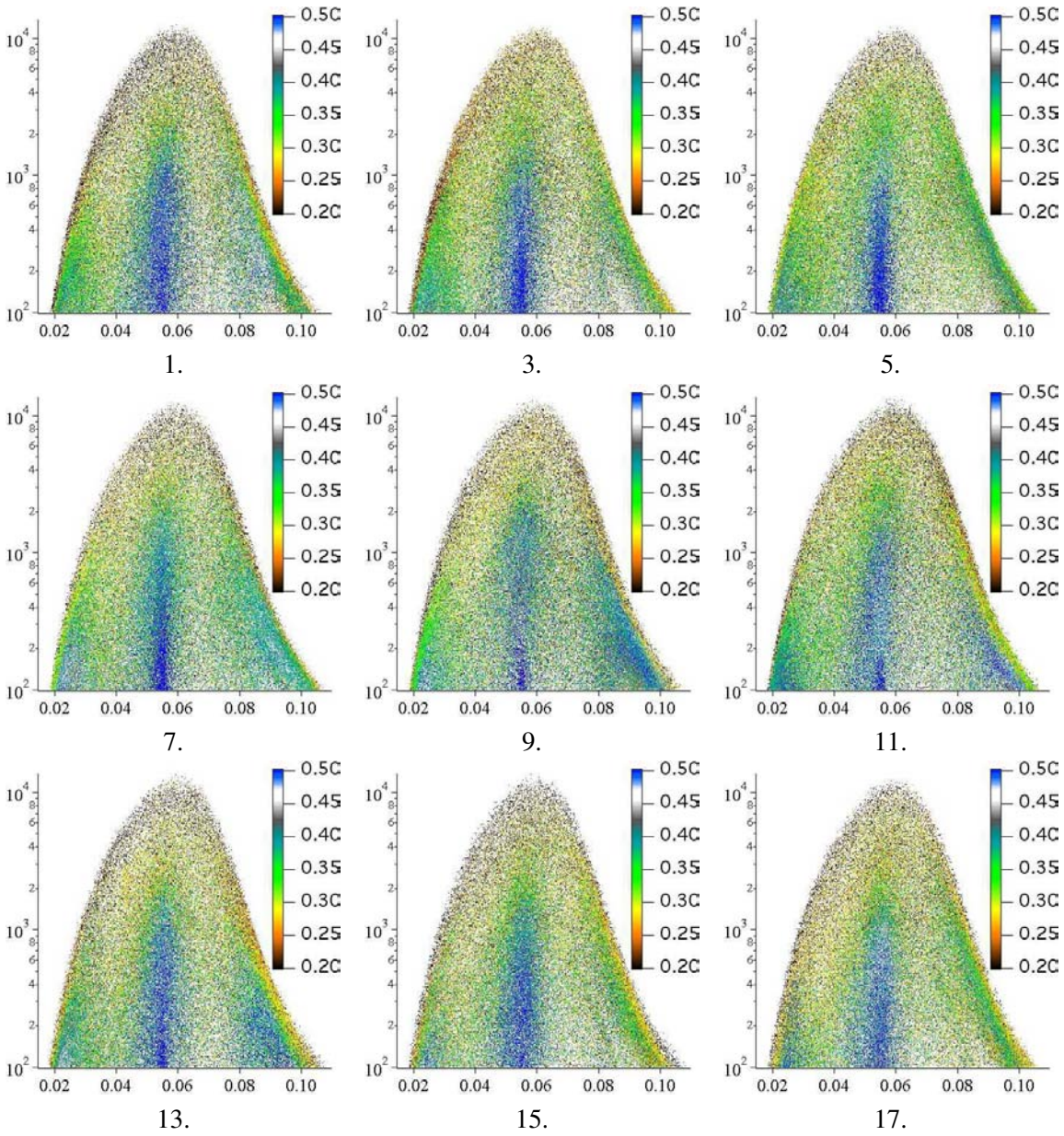


FIG. 12.29 - *Répartition des points du maillage en fonction du dégagement de chaleur en $W.m^{-3}$ en ordonnée et de la fraction de mélange en abscisse.*

12.3.2 Etude détaillée du Mode 1, cas A

On s'intéresse désormais à décrire le **Mode 1** dans le cas de la simulation A, à =0.35. Sa structure globale est donnée en Fig. 12.30. Comme dans le cas du **Mode 3**, différentes parties sont identifiables[4] :

- La zone (1) représentant le tube d'air n'est pas affecté par l'oscillation en raison de la présence des tuyères amonts.
- La zone (2) est représentative des jets issus des tuyères amonts avec en particulier un réseau de choc beaucoup plus développé que dans le cas de la simulation à =0.75.
- La zone (3) oscille à la manière d'un mode demi-onde des manches à air avec une convection sensible des ondes de pression ne permettant pas de définir de noeuds dans ces dernières.
- La chambre de combustion principale oscille en phase en tout point de la zone (5) et est en opposition de phase avec le battement des jets.

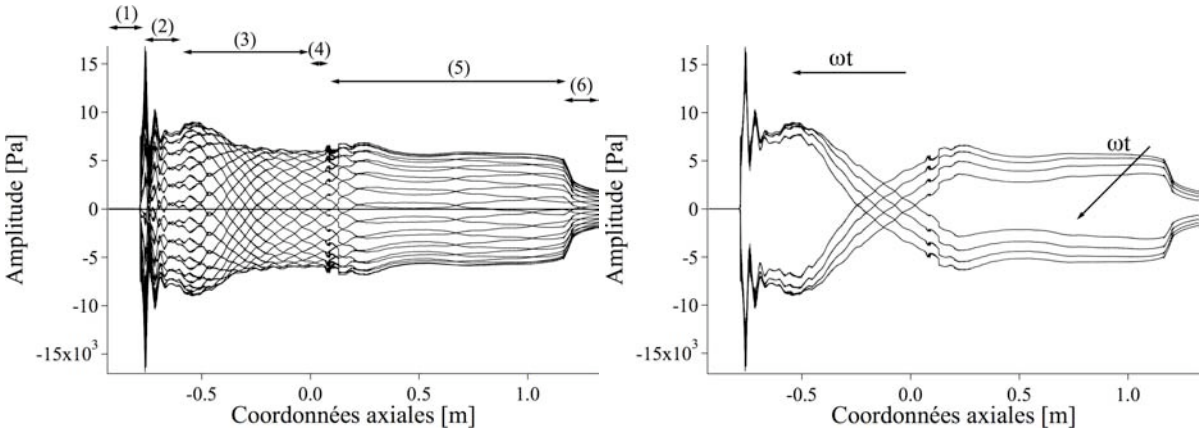


FIG. 12.30 - *Evolution temporelle de la structure spatiale des uctuations de pression à la fréquence du* **Mode 1** *et décrite par l'Eq. 12.1, Cas A. A gauche : cycle total et à droite : quelques courbes uniquement.*

Le **Mode 1** est ainsi différent du **Mode 3**. Celui-ci impose une variation de pression constante dans la totalité de la chambre principale. On rappelle qu'il a été identifié par les expérimentateurs comme étant caractéristique du souf age de la amme dans le dôme (Ristori *et al.*, 1999) (ce qui est par ailleurs en accord avec la Fig. 12.16).

Comme pour le **Mode 3**, la Fig. 12.31 montre la modulation temporelle du débit dans la chambre dans le plan noir de la Fig. 12.20. On note l'in uence du **Mode 3**, toujours présent pour le cas A. On étudie par la suite le champ aérodynamique pendant la période définie par la Fig. 12.31 qui commence et finit par un maximum de blocage aérodynamique (débit minimum).

La Fig. 12.32 décrit deux instants caractéristique du **Mode 1** lors du minimum (a) et du maximum (b) du blocage aérodynamique. Les caractéristiques sont similaires au cas décrit précédemment pour la richesse 0.75. Lors du minimum, les deux jets viennent s'impacter l'un sur l'autre pour dégénérer en une nappe de vitesse. En particulier, on note l'impact des jets sur la circulation des écoulements hélico¨daux sur les composantes de vitesse verticale et orthogonale. Une zone de recirculation intense existe dans le dôme et dans le latéral au droit des manches. La dépression entre le dôme et la bo^te de pré-injection de carburant accélère le vidage de cette dernière et remplie le fût en propane. Au contraire, lors du maximum du blocage, la surpression entre le dôme et la bo^te de pré-injection de carburant

[4]On notera que la zone (4) est un artefact de construction des courbes.

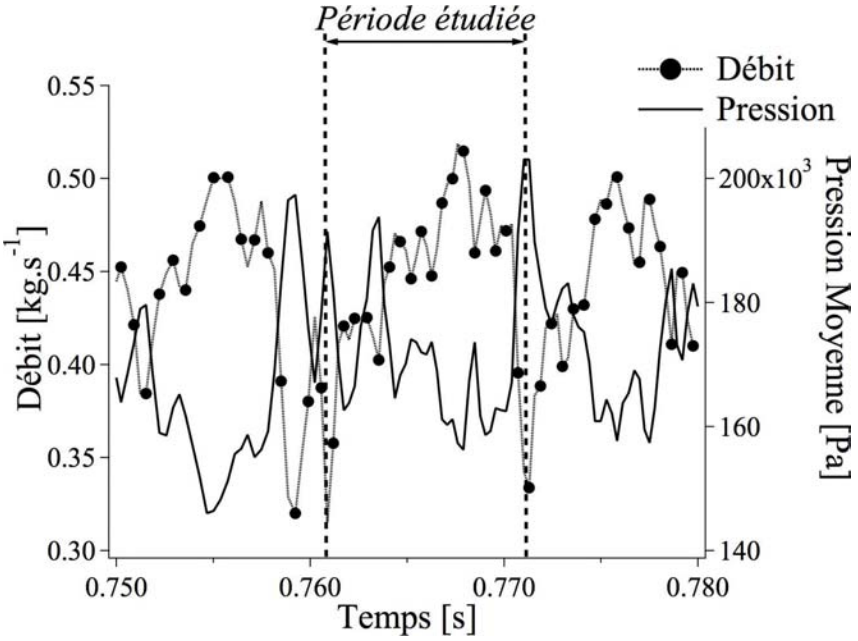


FIG. 12.31 - *Evolution du débit et de la pression moyenne dans le plan d'entrée des manches à air dans la chambre principale (Y=0.05 m). La période entre T_0=0,76 et T_1=0,77 correspond à une période du mode 1. Cas A, =0.35.*

induit des vitesses axiales négatives dans les conduites entre ces deux zones et des gaz frais pénètrent la boˆte d'injection comme le montre la Fig. 12.33. Les différentes zones de recirculation ont toutes diminuées d'intensité et les tourbillons de coins ont quasiment disparus. Ce dernier constat est visible sur la Fig. 12.34 qui montre deux iso-volumes de critère Q à une demi-période d'intervalle du **Mode 1**. Lors du minimum (a), des tourbillons de taille sensible sont visibles et l'écoulement dans les manches à air est bien organisé tandis que lors du maximum du blocage aérodynamique, les tourbillons de coins ne sont plus qu'un ensemble de petits tourbillons. On note également la présence de structures cohérentes dans les manches à air, issues non seulement du décollement au niveau du coude des manches à air mais aussi des structures plus amonts issues des jets des tuyères en entrée. Le retour dans la boˆte d'injection est également visible.

L'impact sur la combustion est visible en Fig. 12.35 où des iso-volumes de vitesse verticale adimensionnée permettent de statuer sur l'avancement du blocage aérodynamique tandis qu'un iso-volume de taux de dégagement de chaleur permet de positionner les différentes zones réactives dans la chambre de combustion principale. Là encore, les similitudes avec le **Mode 3** sont réelles (d'autant plus que ce mode est présent dans la simulation). Toutefois, la principale différence réside dans le fait que la amme a le temps de remonter et de s'installer dans le dôme, ce qui était freiné dans la simulation à $= 0.75$ (cas C). Effectivement, dans cette dernière réalisation, le **Mode 1** est atténué et la amme est principalement liée à l'activité du **Mode 3**. Le blocage aérodynamique n'est pas assez long pour permettre l'allumage du dôme et la surpression dans le dôme n'est pas suffisante pour améliorer la convection des zones réactives vers l'aval.

L'évolution globale du processus de combustion pour le cas A diffère du cas C. En effet, la richesse globale est environ deux fois plus faible et par conséquent, le dôme est moins riche et la proportion

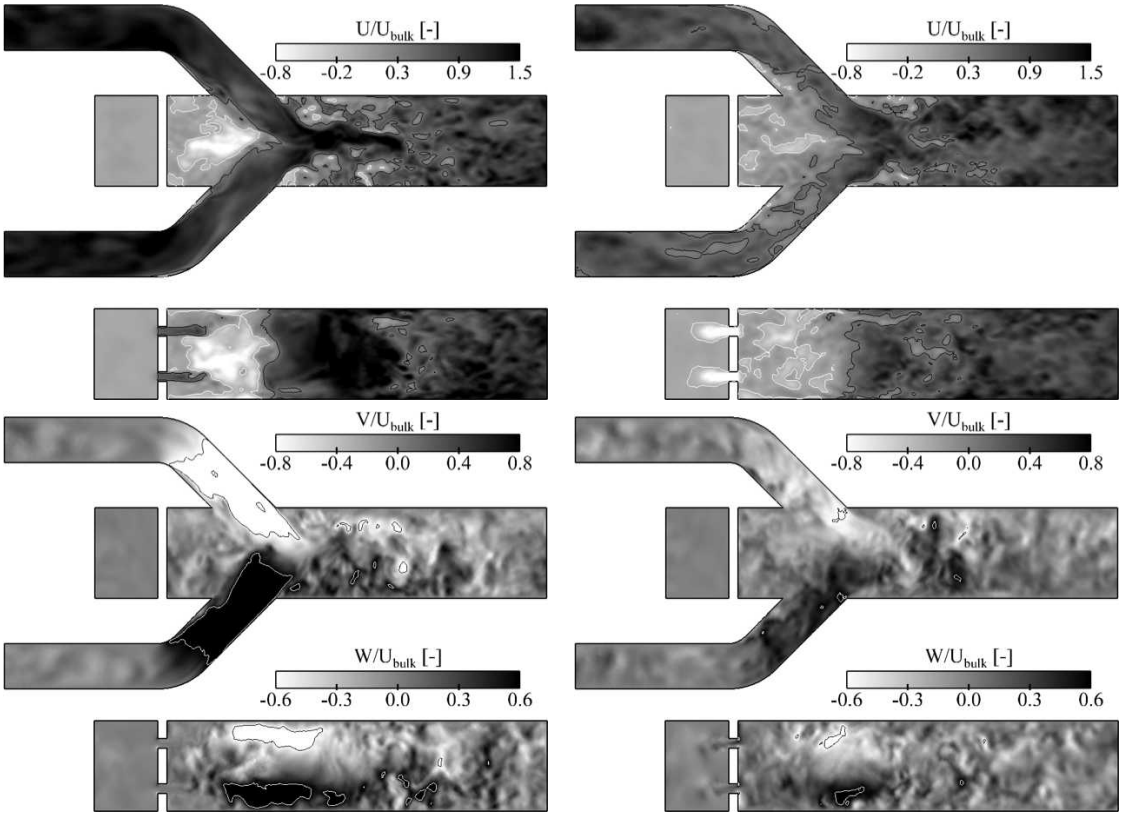
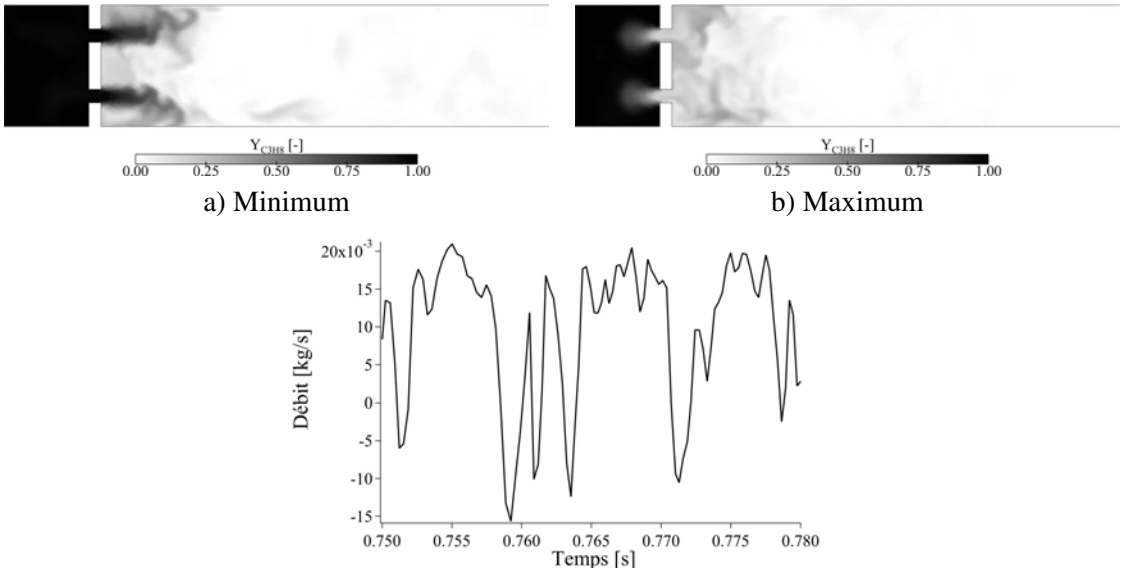


FIG. 12.32 - *Champs instantanées de vitesse axiale, verticale et orthogonale adimensionnalisées et de pression dans les plans (x,y) en haut et (x,z) en bas pris à une demi-période d'intervalle du* **Mode 1**. *Simulation à =0.35.*

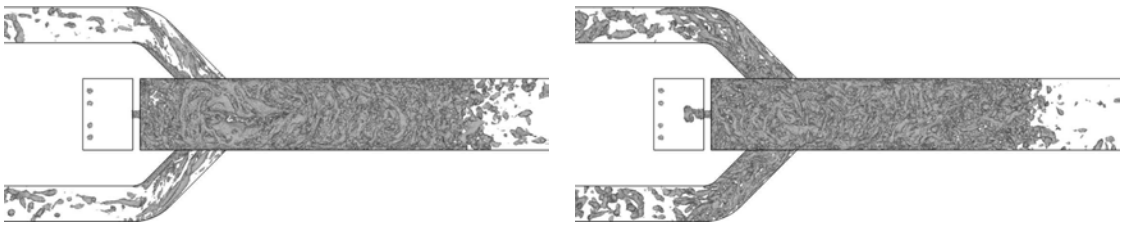
de carburant convectée par les tourbillons de coin moindre. La Fig. 12.36 présente l'évolution temporelle de la distribution spatiale de carburant dans le plan $Y = 0.02$ m associée à des iso-contours de richesse lors d'une période du **Mode 1**. Celle-ci est définie par la Fig. 12.31 et débute et se termine par le maximum du blocage aérodynamique (Fig. 12.36 -1- et -36-), la Fig. 12.36 -18- correspondant au minimum de ce dernier. Ces figures sont associées au scatter-plot des points dont le taux de réaction est supérieur à 100 J.mol^{-1}.m^{-3} donnés en Fig. 12.37 et coloriées par la position axiale. Différentes phases se distinguent. Des sous-figures -1- à -10-, on note la propagation d'une amme "triple" le long de la ligne stoechiométrique du droit des manches à air vers le dôme le long des tourbillons de coin. Ce phénomène va permettre l'allumage du dôme où une grande quantité d'air apportée par l'intermédiaire des décollements dans les manches est brassée avec le carburant provenant de la boˆte de préinjection. Les sous-figures 12.37 correspondantes mettent en avant les trois régimes de combustion associés à cette position dans la chambre (entre 0.1 et 0.3 m) : deux régimes de combustion prémélangée pauvre et riche et un régime de diffusion. Au fur et à mesure que cette amme progresse, on note également la propagation vers l'aval de la amme de diffusion associée. Le second processus associé à cette phase est la combustion des zones de recirculation formées lors du précédent minimum du blocage aérodynamique et caractérisé par une combustion prémélangée pauvre (abscisse supérieure à 0.3 m). Lorsque le blocage disparaˆt (sous-figures -11- à -21-), toutes les ammes au droit des manches à air sont convectées vers l'aval et aucun processus n'arrive à se maintenir au droit des manches à air. La combustion est alors



a) Minimum b) Maximum

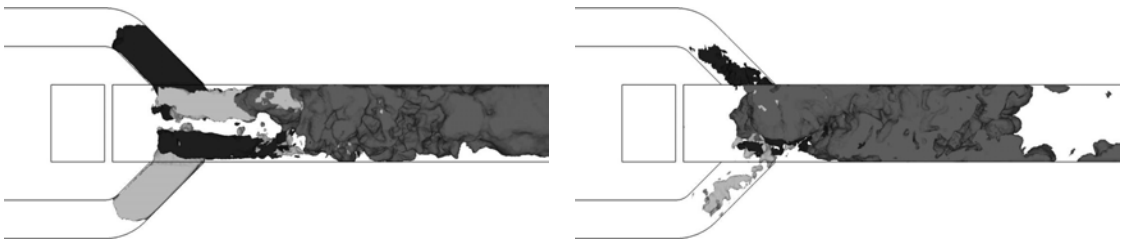
c)

FIG. 12.33 - *Champs instantannés de fraction massique de carburant C_3H_8 lors du minimum (a) et du maximum (b) du blocage aérodynamique et (c) : évolution du débit dans la conduite reliant le dôme à la boˆte de préinjection de carburant.*



a) Minimum b) Maximum

FIG. 12.34 - *Critère Q ($5\left(U_{bulk}\ D\right)^2$) pris à une demi-période d'intervalle du* **Mode 1**



a) Minimum b) Maximum

FIG. 12.35 - *Iso-volumes de vitesse verticale adimensionnée ($-0.75xU_{bulk}$ en noir et $0.75xU_{bulk}$ en gris clair) et de taux de dégagement de chaleur (un centième de la valeur maximale) en gris foncé.*

localisée entre $X = 0.1$ et $X = 0.3$ avec une amme de diffusion entourant les écoulements hélico¨daux de coins ainsi que par une combustion pauvre dans le dôme. Au fur et à mesure que le blocage disparaˆt,

l'écoulement s'organise, ces dernières structures s'intensifient et la combustion dans le dôme devient quasiment nulle. Les ammes "triples" identifiées précédemment n'ont alors plus une vitesse suffisante pour remonter l'écoulement et sont convectées vers l'aval. La fin du **Mode 1** arrive alors et vient stabiliser ces ammes qui vont pouvoir remonter l'écoulement et démarrer un nouveau cycle de combustion.

La principale différence entre les **Mode 1** et **3** est donc liée à la phase des uctuations de pression dans la chambre de combustion. Pour le premier mode, les oscillations de pression dans les manches à air imposent un tel débit dans le fût que celui-ci répond immédiatement à ces sollicitations. Le fût oscille ainsi en phase et impose des états extrêmes en tous points de la chambre. Au contraire, pour le **Mode 3**, c'est la chambre de combustion qui est soumise à un mode acoustique stationnaire avec une convection des ondes de pression vers les manches. Il existe ainsi un déphasage en fonction de l'abscisse de la zone étudiée.

12.3.3 Couplage entre les modes

Deux modes ont été étudiés dans les sous-sections précédentes :

- Le **Mode 1** est un mode propre des entrées d'air et est caractérisé par un battement de volume dans la chambre principale.
- Le **Mode 3** est un mode propre de la chambre principale et est caractérisée par la convection d'ondes de pression dans les entrées d'air.

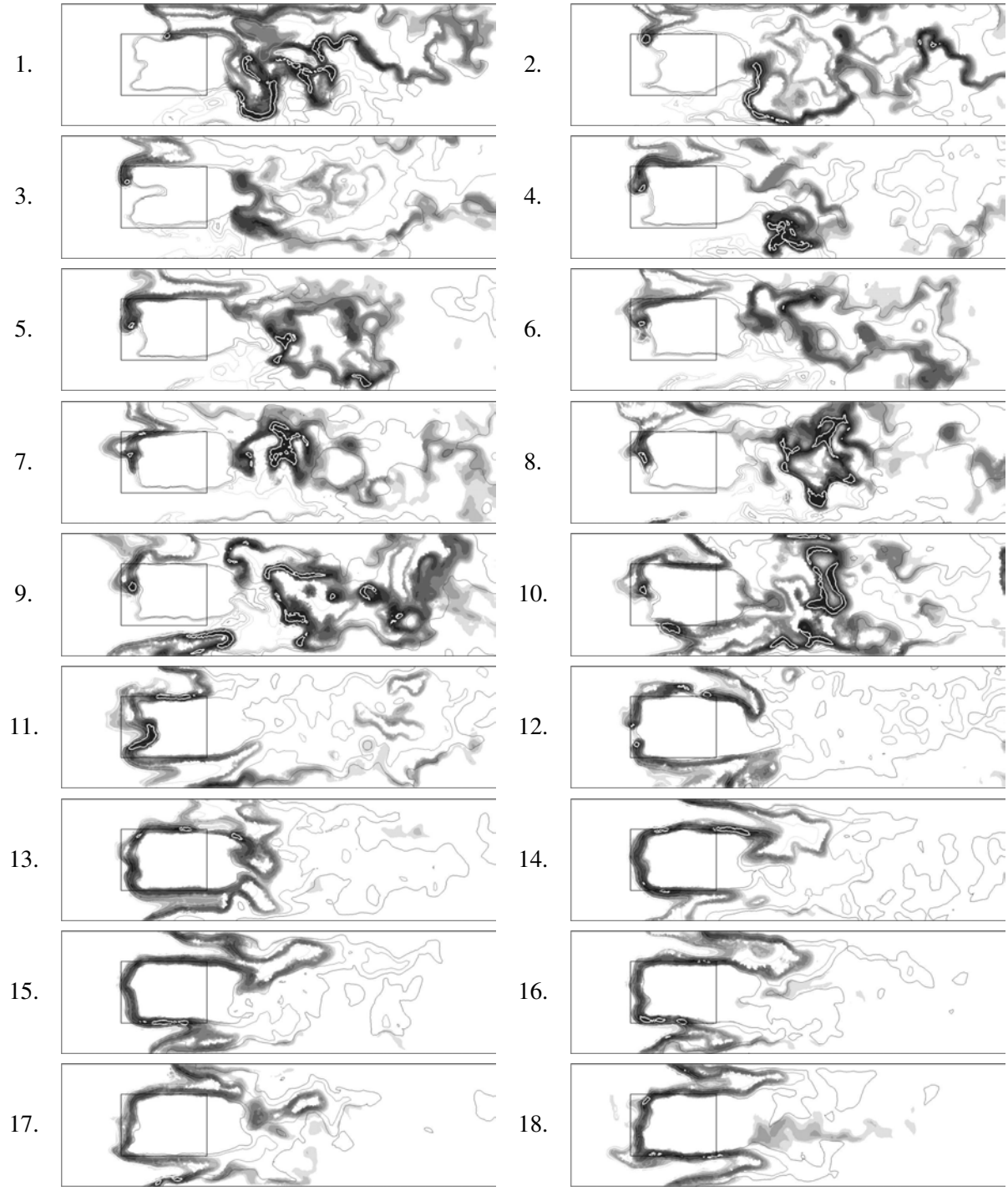
La Sec. 12.3.1 a ainsi montré que pour le cas C, un forçage acoustique intervenait dans les manches par l'intermédiaire du **Mode 3**. Celui-ci est résumé en Fig. 12.38 : les ondes L_1 issues du fût sont convectées vers les cols amonts dans les manches à air. Celles-ci vont venir se ré échir sur les chocs présents et générer non seulement des ondes acoustique L_5 mais aussi des ondes entropiques L_2 dont l'amplitude est définie par $L_2 = \frac{1}{0}\frac{p_1}{p_0} - \frac{1}{0}$ allant à la vitesse de l'écoulement $\vec{u}$ et expliquant en partie les variations de débit observées.

La Fig. 12.39 illustre ce phénomène : il montre l'évolution des différentes ondes L_1 (à gauche), L_2 (au centre) et L_5 (à droite) dans les manches et en fonction du temps. Ces ondes sont filtrées[5] sur une bande de fréquence correspondant au **Mode 3** afin de supprimer les autres phénomènes et le bruit issu de l'écoulement turbulent. La pente des ondes $\frac{x}{t}$ ainsi construites correspond à leur vitesse de convection : $\vec{u}\cdot\vec{n} - c$ pour L_1, $\vec{u}\cdot\vec{n}$ pour L_2 et $\vec{u}\cdot\vec{n} + c$ pour L_5. L'impédance du jet en sortie de tuyère est particulièrement visible ($x \approx$-0.8 m) : les ondes L_1 sont ré échies en ondes L_2 et L_5.

Le premier constat est donc que ces ondes acoustiques et entropiques ré échies par les jets issus des tuyères avales vont être transportées vers le fût et venir s'additionner aux ondes initialement présentes comme montré par la Fig. 12.38. Il est possible d'estimer le temps d'interaction $_{15}$ entre les deux ondes acoustiques par l'Eq. 12.5. On calcule de même le temps d'interaction $_{12}$ entre la convection de l'onde L_1 et l'onde entropique L_2.

$$
\begin{aligned}
_{15} &= \frac{l}{\vec{u}\cdot\vec{n} - c} \quad + \quad \frac{l}{\vec{u}\cdot\vec{n} + c}, \\
_{12} &= \frac{l}{\vec{u}\cdot\vec{n} - c} \quad + \quad \frac{l}{\vec{u}\cdot\vec{n}}.
\end{aligned}
\tag{12.5}
$$

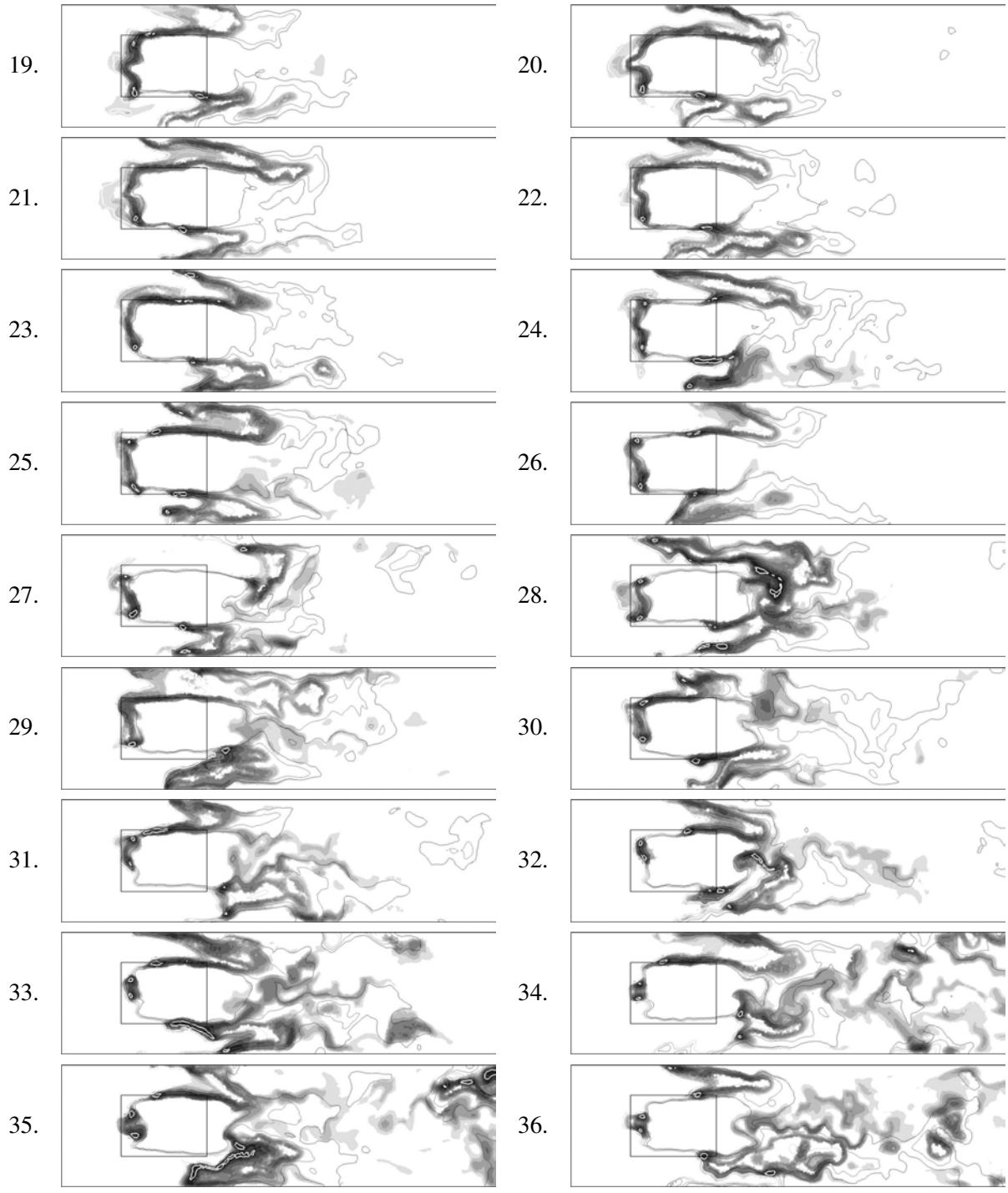
[5] On notera que le filtre de Butterworth utilisé induit un déphasage constant indépendant de la fréquence



(a) Première partie

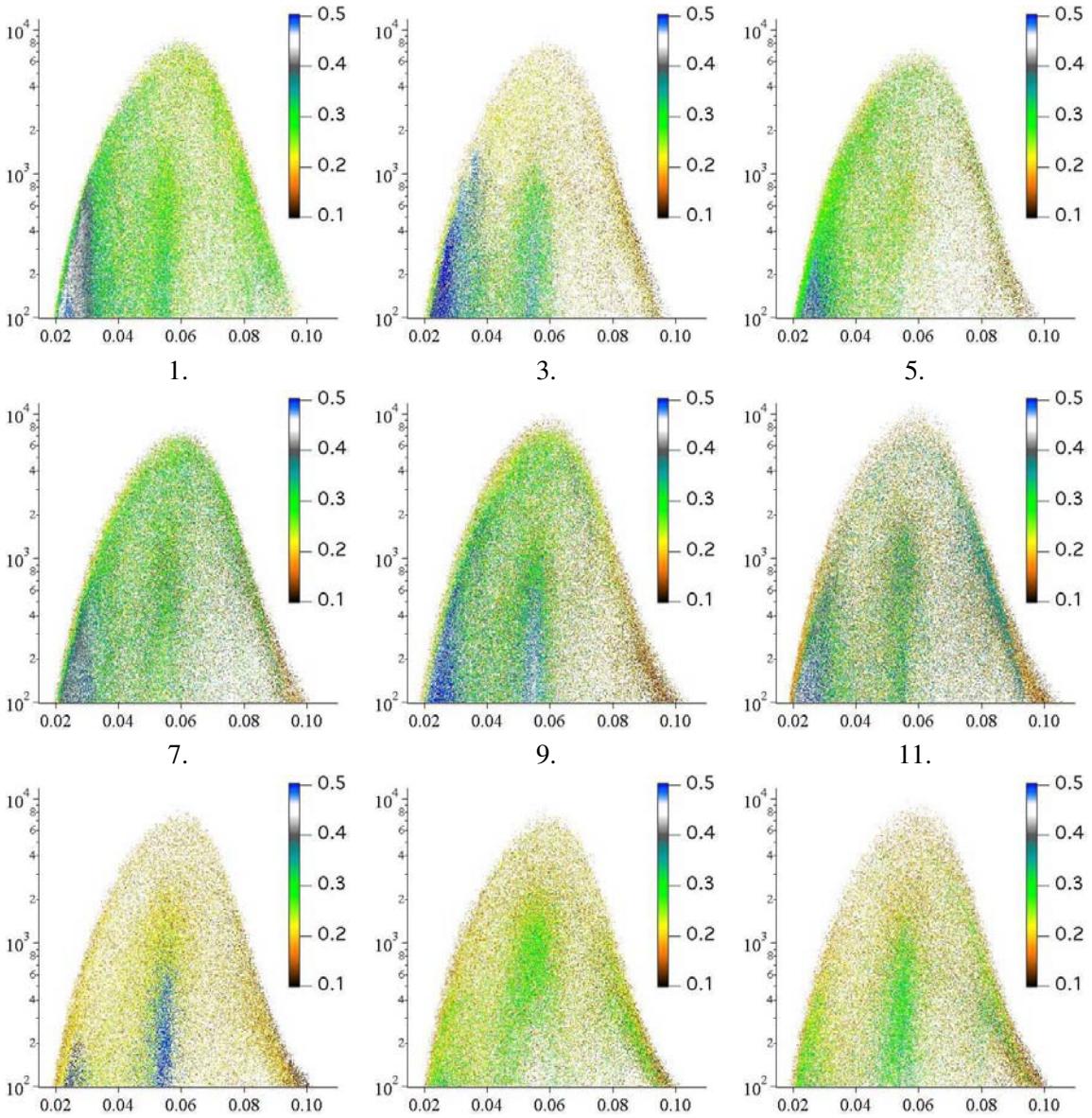
FIG. 12.36 - *Allumage du dôme par propagation de la amme vers l'amont. =0.35. Le plan de coupe correspond à celui décrit Fig. 12.26.*

La longueur l est assez difficile à estimer car la position du jet issu de la tuyère varie dans le temps. En ce qui concerne les interactions acoustiques pures (ré exion de L_1 en L_5), on retrouve les fréquences



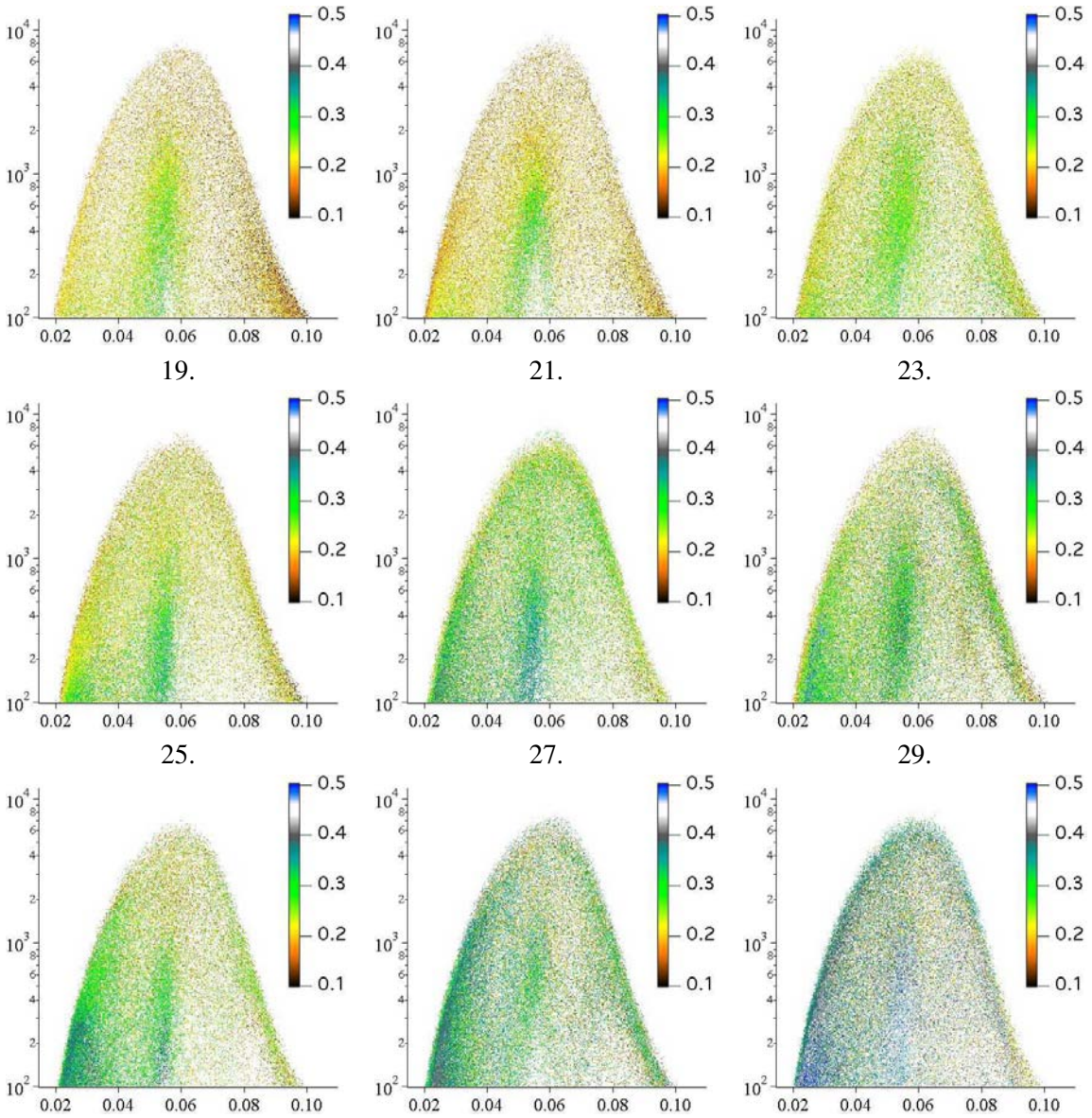
(b) Seconde partie

FIG. 12.36 - *Allumage du dôme par propagation de la amme vers l'amont. =0.35. Le plan de coupe correspond à celui décrit Fig. 12.26.*



(a) Première partie

FIG. 12.37 - *Répartition des points du maillage en fonction du dégagement de chaleur en W.m^{-3} en ordonnée et de la fraction de mélange en abscisse. =0.35.*



(b) Seconde partie

FIG. 12.37 - *Répartition des points du maillage en fonction du dégagement de chaleur en W.m^{-3} en ordonnée et de la fraction de mélange en abscisse. =0.35.*

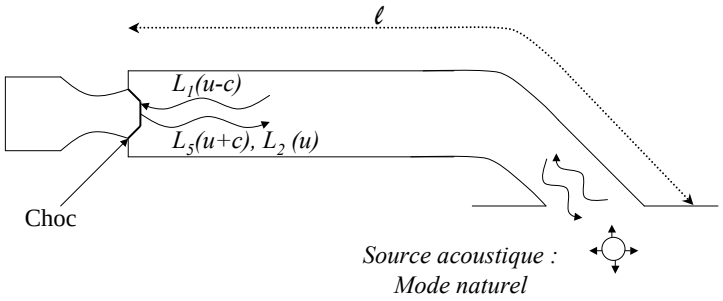
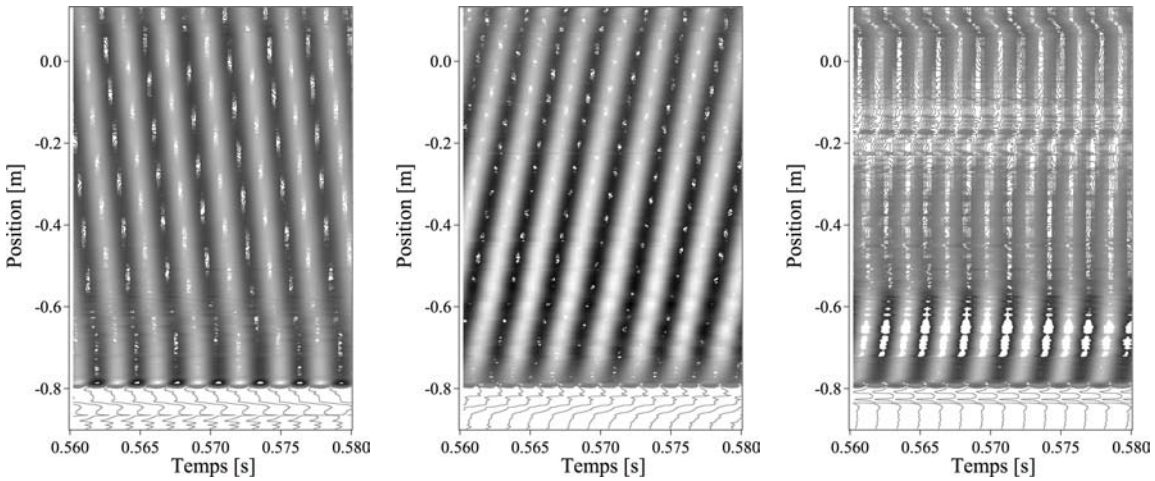


FIG. 12.38 - *Mécanisme d'interaction entre les ondes L_1 et L_5 dans les manches.*



$L_1 = \frac{1}{0}\frac{p_1}{p_0} - \frac{u_1}{c_0}$ $L_2 = \frac{1}{0}\frac{p_1}{p_0} - \frac{1}{0}$ $L_5 = \frac{1}{0}\frac{p_1}{p_0} + \frac{u_1}{c_0}$

FIG. 12.39 - *Evolution des ondes acoustiques L_1 et L_5 et de l'onde entropique L_2 en fonction de la position axiale dans la manche à air supérieure du statofusée. Echelle de couleur arbitraire : cas C.*

identifiées en Tab. 12.3 pour le **Mode 2**. Toutefois, ce phénomène est d'importance relativement faible comme le montre la Fig. 12.39 ou la magnitude de la transformée de Fourier pour ces modes (Fig. 12.11). Les fréquences calculées pour la ré exion acoustique/entropie correspondent à celles du **Mode 1**. En particulier, on rappelle que cette fréquence ne varie quasiment pas en fonction des cas calculés (A, B et C). Ce mécanisme est résumé en Fig. 12.40 qui montre l'évolution spatio-temporelle des ondes dans les manches. On note que celles-ci se rejoignent au centre du fût au point d'intersection des jets issus des manches à air.

Simulation	$= 0.35$	$= 0.50$	$= 0.75$
$\mathscr{F}_{15}$	150	190	220
$\mathscr{F}_{12}$	108	108	108

TAB. 12.4 - *Fréquences caractéristiques $\mathscr{F}$ des interactions entre l'onde L_1 remontant les manches et les ondes se propageant vers l'aval L_5 et L_2. Cas C.*

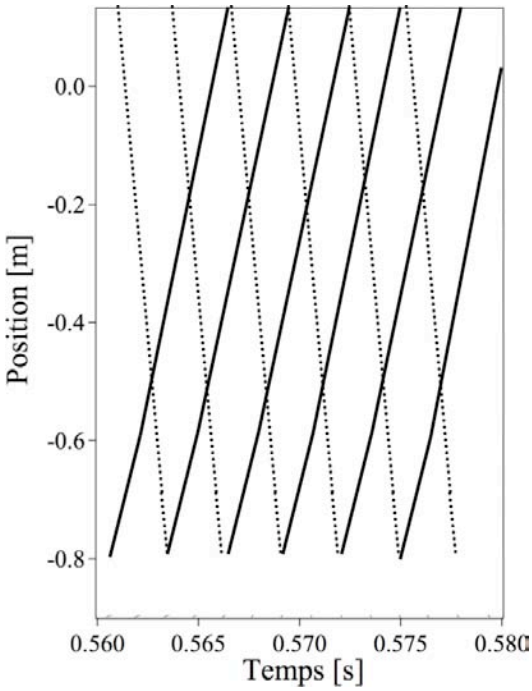


FIG. 12.40 - *Schéma de la propagation des ondes L_1 (...) et L_2 (−) dans les manches du statofusée pour le* **Mode 3**. *Cas C.*

Il existe ainsi un couplage fort entre le **Mode 3** et le **Mode 1**. On s'intéresse désormais à caractériser leur évolution en utilisant une décomposition en mode propre (POD) du cas B, simulation pour laquelle les deux modes ont une amplitude comparable. La Fig. 12.12 a montré que la POD appliquée à l'énergie acoustique permettait la décomposition de chacun de ces deux modes en un doublet de deux vecteurs propres. Ceux-ci sont présentés en Fig. 12.41 pour les signaux de pression et de vitesse axiale. Les modes 1a et 1b correspondent au **Mode 1** tandis que les deux suivants (3a et 3b) sont liés au **Mode 3**. La présence de doublets met en avant le caractère propagatif des modes. Ainsi, pour le **Mode 3** caractérisé par un phénomène acoustique stationnaire dans le fût et par la propagation des uctuations de pression issues du dôme dans les manches à air, le caractère convectif est retrouvé dans les manches avec un décalage spatial et temporel des vecteurs propres, les signaux associés aux deux modes POD étant en quadrature de phase. Si on s'intéresse aux modes 1a et 1b, le mode le plus énergétique (le mode 1a) est principalement lié à un mode de type demi-onde des manches (deux ventres de pression dans les jets issus des tuyères amonts et dans le dôme) et à une uctuation de pression en phase dans tout le fût tandis que le mode 1b est associé à un mode de type quart-d'onde dans les manches avec un ventre de pression au niveau de la tuyère amont et une activité quasi-nulle dans la chambre de combustion. Les oscillations du mode 1b ne sont pas uniquement liées au **Mode 1**. Il existe en effet une corrélation forte à la fréquence du **Mode 3** ce qui permet de mettre en lien ces deux modes, **1** et **3**, tel qu'il l'a été observé en début de section, Tab. 12.4.

Les Figs. 12.42 et 12.43 représentent la distribution des vecteurs propres en espace pour la pression et en temps. Le décalage temporel entre chaque doublets de mode est en particulier visible (quadrature de phase). La Fig. 12.44 montre l'évolution temporelle de la pression moyenne et du taux de réaction moyen en fonction du temps. Globalement, les deux signaux sont déphasés de 45°. On note que la

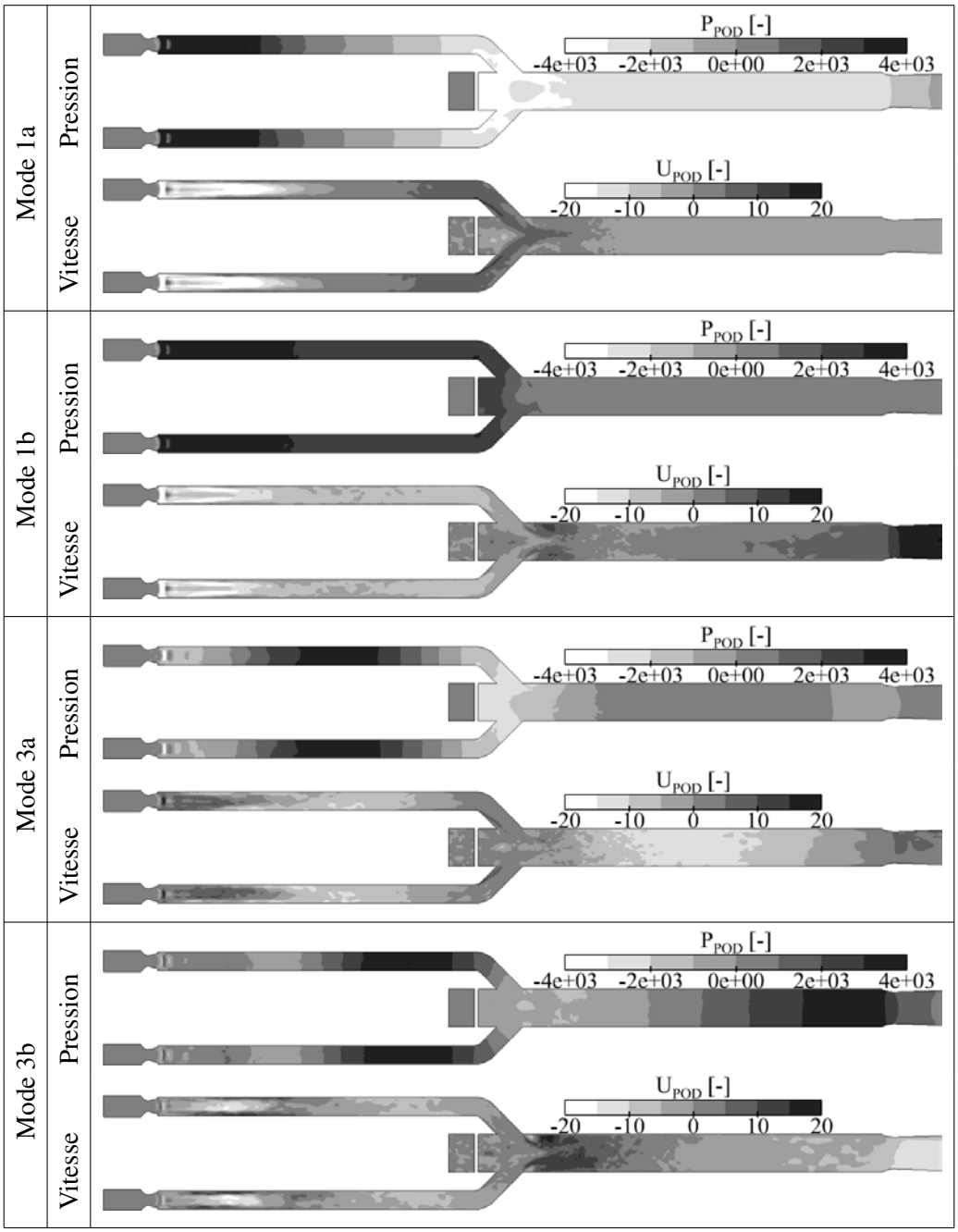


FIG. 12.41 - *Décomposition en modes propres du cas B. Champs de vitesse axiale et de pression dans le plan* $Z = 0$ *m.*

pression moyenne est fortement corrélée avec le mode 1a (ce dernier étant lié à une uctuation quasi-constante dans la totalité du fût) tandis que le taux de réaction moyen est lui en phase avec le mode 1b[6]. Ainsi, la variation de débit liée au ux d'entropie entrant dans la chambre vient stabiliser encore plus le

[6]On notera que si on applique la POD au dégagement de chaleur, le mode le plus énergétique correspond au **Mode 1** et est en phase avec le mode 1b.

processus de combustion en intensifiant le blocage aérodynamique lié au **Mode 3**. La résultante de cette combustion intense créée est une forte augmentation de la pression dans la chambre.

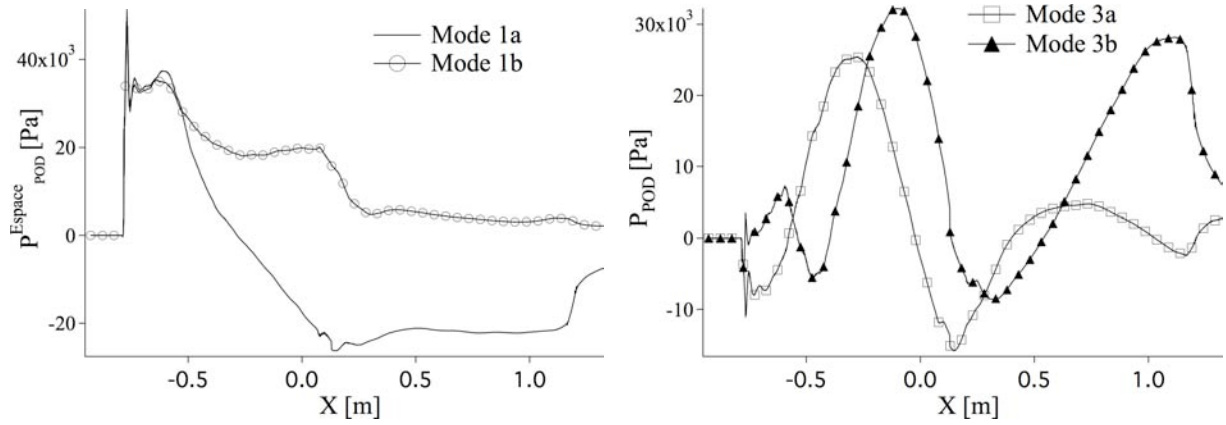


FIG. 12.42 - *Distribution spatiale des modes propres pour le signal de pression. Cas B.*

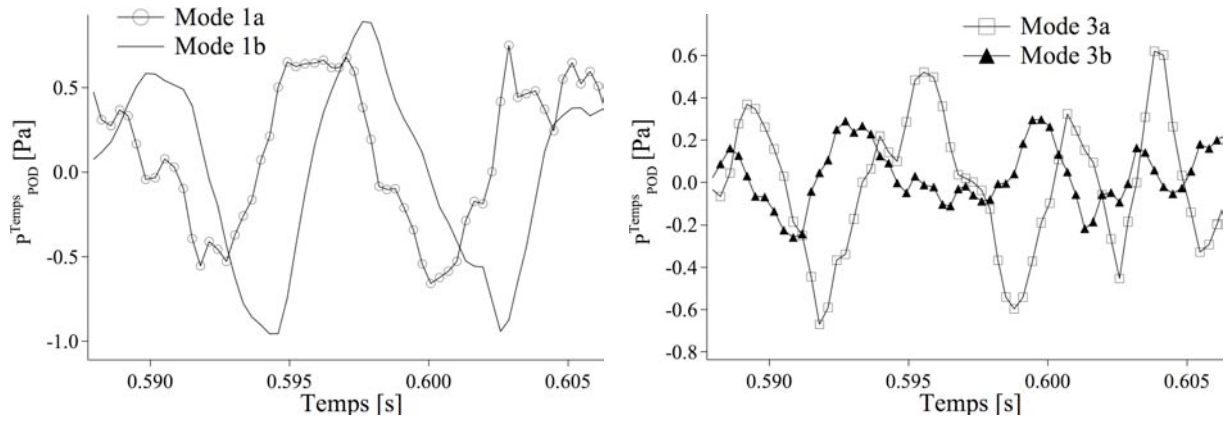


FIG. 12.43 - *Modes propres temporaux de la décomposition en mode propre du cas B.*

Les doublets étant en quadrature de phase, il apparaît que l'impact des jets issus des deux tuyères amonts est essentiel : l'excitation du mode 1a par le mode 1b est en lien direct avec la réponse des jets à ce dernier mode. Comme observé précédemment Figs. 12.9 et 12.10, ceci est en accord avec le fait que la structure de ces jets évolue avec la richesse. En premier lieu, la Sec. 12.1 a montré que la pression statique à "l'infini aval" (*i.e.* au bout des manches) diffère selon les cas et est de plus en plus importante avec la richesse ce qui est corroboré par la Fig. 12.45. Celle-ci montre la pression moyenne le long de l'axe de symmétrie des manches pour les trois cas de richesse calculée. La pression à l'infini aval est notée par P . Plus cette pression est importante, plus le réseau de choc se simplifie et le choc s'attache aux lèvres (Fig. 6.1). La Fig. 12.46 illustre ce phénomène en montrant la distribution de déviation standard de pression pour les cas A, B et C. On note ainsi que pour le cas C un choc oblique fort est situé en sortie de tuyère en fin de diffuseur tandis que pour le cas A, il existe plusieurs cellules de chocs avec des chocs forts détachés ainsi que des interactions avec la ligne de glissement issue des lèvres de la tuyère.

Le mode 1b est caratérisé par une variation de pression qui modifie la pression statique locale et qui va impacter le réseau de choc. La Fig. 12.47 montre la distribution de pression dans le cas A dans les

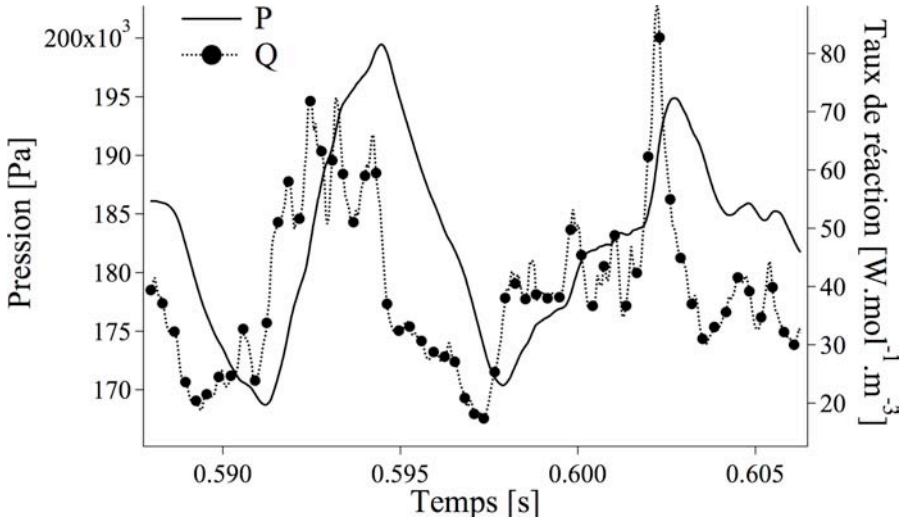


FIG. 12.44 - *Evolution temporelle de la pression et du taux de réaction moyen dans tout le statofusée. CasB.*

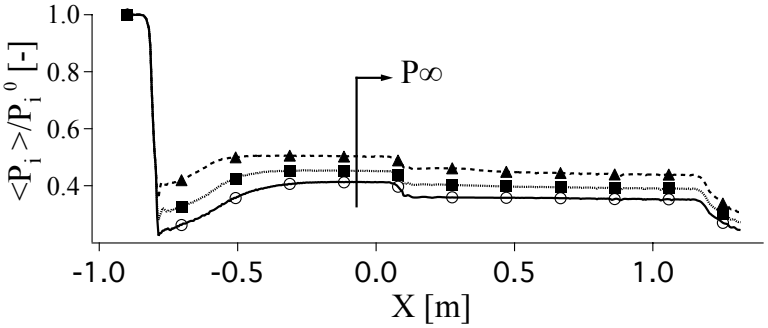


FIG. 12.45 - *Evolution temporelle des de la pression totale adimensionnée par la pression totale en entrée dans le statofusée pour les trois cas simulés.*

manches à une demi-période d'intervalle du **Mode 1**. Lorsque l'onde L_1 arrive sur le jet, la pression est suffisament élevée pour qu'un seul choc fort oblique se positionne en sortie de tuyère et force l'adaptation de cette dernière. Au contraire, lorsque la dépression touche le jet, de nombreuses cellules sont visibles.

Il existe ainsi une modification profonde de l'écoulement en entrée du statofusée qui permet d'expliquer la réponse différente des manches au mode 1b, résultant lui-même de l'interaction des ondes L_1 et L_2 du **Mode 3**. La modification de la position des chocs entraîne une modification du volume de la chambre de manière isentropique si on considère que les chocs délimitent le volume interne de la chambre. Avec une relation d'isentropie, $P \times V \ = C^{te}$ soit $\frac{P}{P} + \ \frac{V}{V} = 0$, la variation de pression dans le cas A est de l'ordre de $\ P = 20 \times 10^3$ Pa soit une variation de volume d'environ 5% (en prenant en compte les deux manches). Si on considère que cette variation de volume est directement liée à la variation de la position du jet issu des tuyères avales (donc avec une section de 0.1×0.1 m^2), on obtient une variation de la position axiale de ce jet de ≈ 0.15 m, ce qui est en parfait accord avec la Fig. 12.47. Ainsi, le mode 1b entraîne une modification du réseau de chocs et la réponse à cette modification est le mode 1a, comparable à une compression isentropique de la chambre. Ce mode est caractéristique de la

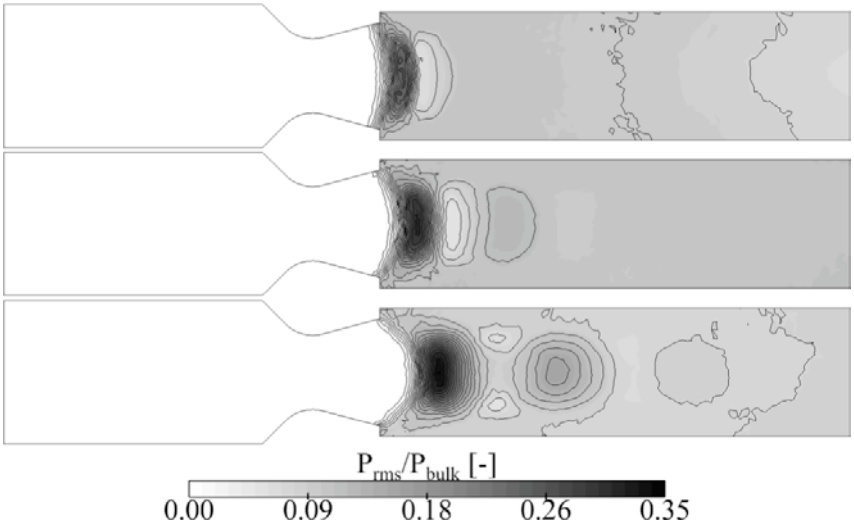


FIG. 12.46 - *Champs moyens de déviation standard de pression pour les trois richesses. De bas en haut : =0.35, 0.50 et 0.75.*

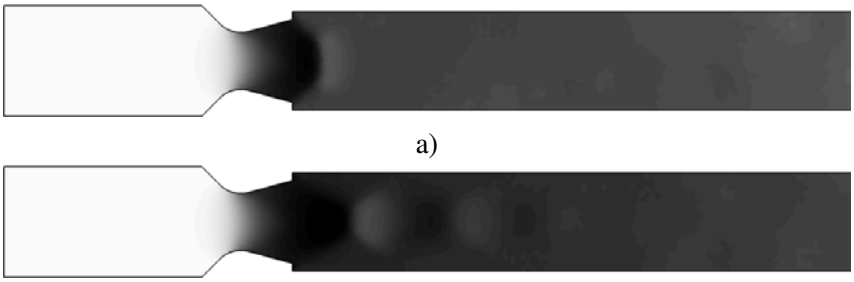


FIG. 12.47 - *Champs de pression statique adimensionnée par la pression statique en entrée dans la manche à supérieure. Cas A.*

combustion dans le dôme et par la même du souf age de la amme dans cette même zone.

12.4 Conclusion

Cette partie a permis d'étudier l'écoulement réactif monophasique dans un statofusée pour un régime de vol à haute altitude et à trois richesses différentes. Globalement, l'accord avec l'expérience est très bon, en particulier en ce qui concerne les positions des zones réactives moyennes. L'utilisation de la SGE a montré tout son potentiel avec la détection de deux modes principaux, le **Mode 1** et le **Mode 3**, caractéristiques de tout le statofusée et clairement identifiés sur le banc expérimental (Reichstadt *et al.*, 2007). Il a été montré que la simulation d'une configuration acoustiquement bien définie, *i.e.* incluant les deux tuyères d'entrée et celle de sortie, est essentielle. Le **Mode 3** est un mode demi-onde du fût et entraîne la création d'ondes acoustiques qui sont convectées dans les manches à air et remontent l'écoulement. Leur réflexion sur les chocs en amont génèrent non seulement des ondes acoustiques mais aussi des ondes entropiques qui reviennent dans le fût à la vitesse de l'écoulement. La fréquence associée à cette réflexion est caractéristique du **Mode 1**. L'impact du retour d'ondes générées dans le fût a une influence sur les chocs. En effet, le mode généré entraîne une forte augmentation de la pression dans les jets d'entrée et modifie le réseau de choc issu des tuyères amonts. La modification de ce réseau entraîne une compression quasi-isentropique dans la chambre qui se traduit par une brusque montée en pression de tout le fût pour répondre à la variation de volume liée à la position des chocs. La stabilisation de la flamme est fortement liée à ces deux modes. Le **Mode 3** entraîne une variation de pression et de débit dans les manches. Cette fluctuation mène à un blocage aérodynamique dans la chambre. La flamme peut alors se stabiliser dans le fût et remonter l'écoulement par l'intermédiaire des quatre tourbillons de coin. L'impact du **Mode 1** est encore plus violent : la brusque montée en pression modifie fortement l'écoulement et la vitesse diminue encore plus. La flamme peut alors dans ce cas atteindre le dôme et s'y installer. Toutefois, ce dernier phénomène dépend de la richesse locale. Si celle-ci est trop élevée, les flammes ne peuvent s'y installer et restent à la périphérie des structures hélicoïdales.

Cette première étude bien que concluante et validant les divers développements n'a cependant pas pris tous les phénomènes en compte. En particulier, le rayonnement est essentiel dans cette configuration confinée. En effet, celui-ci a un impact fort sur les niveaux et les distributions de température comme l'ont montré Gonsalves Dos Santos *et al.* (2008) sur une flamme derrière un trièdre, et sur la dynamique de flamme. Différentes méthodes permettent d'estimer les pertes de chaleur par transfert radiatif. L'approximation la plus simple est celle du modèle de gaz gris où on suppose que tous les points ont une vue directe sur l'environnement froid à l'infini (Barlow *et al.*, November 2001; Schmitt *et al.*, 2007; Ihme, 2007). Les effets de rayonnement peuvent aussi être intégrés directement dans le modèle de combustion comme le modèle *Flamelet/Progress Variable* (FPV) pour la combustion non-prémélangée (Pitsch *et al.*, 2008). Une dernière méthode, beaucoup plus complexe et coûteuse, est de calculer réellement (moyennant quelques suppositions) le rayonnement en utilisant des méthodes comme la méthode ordonnée discrète[7] (DOM), la méthode de lancer de rayons ou encore le recours à des méthodes de Monte-Carlo (Desjardin & Frankel, 1999; Gonsalves Dos Santos *et al.*, 2008; Tessé *et al.*, 2002). Ces techniques permettent de tenir compte des niveaux de température moyenne et fluctuantes en chaque point de la configuration mais à des coûts bien plus élevés (discrétisation par angle solide et par bande de fréquence). Le recours à ces différents outils nécessite le couplage de deux codes différents, l'un pour la SGE et l'autre pour le rayonnement. Ce type de méthode a en particulier été couplé à des cinétiques tabulées (comme la méthode FPI ou FGM) en ajoutant une dimension à la table, celle de l'enthalpie (Fiorina *et al.*, 2003). Si le rayonnement est d'importance, il en est alors de même avec les pertes de chaleur aux parois, en particulier avec le refroidissement appliqué dans l'expérience. Là-encore, différentes méthodes sont utilisables, d'une

[7] *Discrete Ordinate Method* en anglais

simple parois iso-therme au recours à un couplage avec un code de transfert thermique (Duchaine *et al.*, 2008).

Troisième partie

Stratégie numérique pour la simulation diphasique de statoréacteurs

Table des Matières

13 Dé nition d un schéma adapté à la simulation de la phase dispersée 263
13.1 Les schémas à résidus distribués ou *RDS* . . . 263
13.1.1 Notations . . . 265
13.1.2 Le schéma N (*Narrow*) . . . 265
13.1.3 Le schéma LDA (*Low-Diffusion A*) . . . 266
13.1.4 Le schéma PSI (*Positive Stream Invariant*) . . . 267
13.1.5 Formulation système des schémas RDS . . . 267
13.2 Adaptation des schémas au formalisme Eulérien . . . 268
13.3 Présentation de la méthode *FCT* . . . 270
13.3.1 Combiner deux schémas numériques ? . . . 270
13.3.2 Procédure de limitation du ux anti-diffusif . . . 270

14 Expériences numériques 275
14.1 Convection . . . 275
14.1.1 Cas n°1 : Gaussienne . . . 276
14.1.2 Cas n°2 : Cylindre . . . 278
14.1.3 Cas n°3 : Burgers . . . 279
14.2 Tourbillons de Taylor-Green . . . 279
14.3 Croisement de jets : la question des -chocs . . . 281
14.4 Conclusion . . . 281

15 Turbulence homogène isotrope chargée en particule 283
15.1 Description du cas test . . . 283
15.1.1 Schémas numériques et maillages testés . . . 283
15.1.2 Initialisation du calcul . . . 284
15.2 Propiétés intégrales . . . 285
15.3 Champs instantanés de la phase dispersée . . . 287
15.4 Comparaison des trois schémas sur le maillage *Tetra2* . . . 287
15.5 Conclusion . . . 290

16 Application à une chambre académique : le banc MERCATO de l ONERA 291
16.1 Contexte . . . 291
16.2 Configuration . . . 292
16.2.1 Configuration de base . . . 292

16.3 Paramètres numériques 293
16.3.1 Maillage 293
16.3.2 Conditions aux limites 294
16.3.3 Paramètres numériques 295
16.4 Résultats moyens 295
16.5 Résultats instantanés 298
16.6 Conclusion 299

La Simulation aux Grandes Echelles s'est révélée être un outil très efficace pour décrire la turbulence et ses interactions avec d'autres phénomènes physiques tels que le mélange ou la combustion (Prière *et al.*, 2004). En particulier, le dernier chapitre a montré la puissance d'un tel outil pour décrire les phénomènes d'aértothermochimie apparaissant dans un statofusée à semi-propergol (*Solid-propellant Ducted Rocket* -SDR-), *i.e.* l'injection de carburant est réalisée en fond de chambre et remplace les gaz brûlés provenant du générateur de gaz. La suite logique à cette étude est la simulation diphasique d'un statoréacteur à combustible liquide (*Liquid-Fueled Ramjet* -LFJR-). Pour de telles configurations, le carburant est injecté soit dans le dôme (au même endroit que pour un SDR) soit dans les entrées d'air en amont des coudes (Fig. 12.48) comme l'ont décrit Ristori *et al.* (2003).

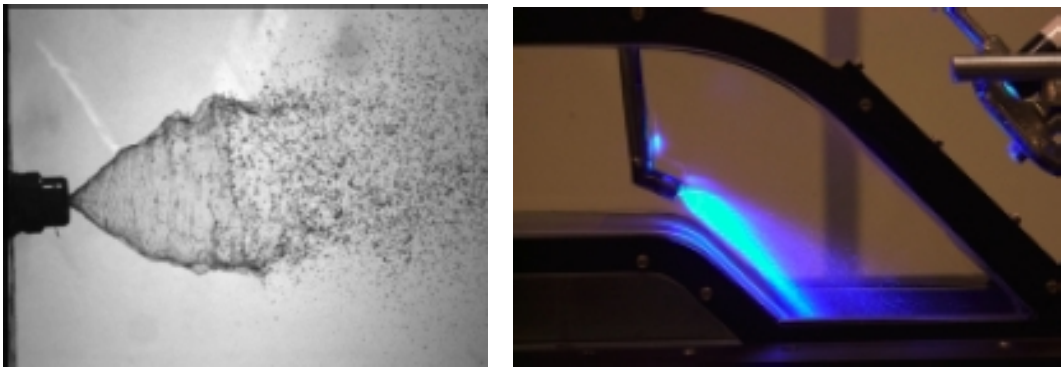


FIG. 12.48 - *Injecteur et visualisation du spray de carburant utilisé dans le statoréacteur de recherche à gauche et positionnement de l'injecteur dans les coudes des entrées d'air à droite.*

Si de nombreuses simulations diphasiques Euler-Euler ont été à ce jour réalisées avec le code AVBP (Riber *et al.*, 2009; Kaufmann *et al.*, 2008; Boileau *et al.*, 2008*b*; Sanjosé *et al.*, 2008), certaines questions se posent toujours. Il est en particulier reconnu que la qualité de la SGE dépend des choix de la discrétisation des termes convectifs (Ham *et al.*, 2003). Dans les géométries complexes, des grilles régulières structurées ne peuvent pas être facilement employer et le domaine de calcul est discrétisé en utilisant des grilles non structurées (triangles en 2D et tétraèdres en 3D par exemple). Le stencil du schéma numérique est alors réduit le plus possible pour ne pas pénaliser le coût de calcul et ceci au dépend de la précision (Hirsch, 1988). Dans ce contexte spécifique, les schémas numériques centrés souffrent de l'augmentation de la dispersion des erreurs et du phénomène de Gibbs pour de tels maillages (Gibbs, 1898). Ils provoquent ainsi la création d'oscillations appelées *ripples*, qui menacent fortement la stabilité des calculs en raison de la nature non linéaire des équations (Hirsch, 1988). Une solution pour annuler ce problème est d'utiliser une viscosité artificielle (AV), dont l'application est contrôlée par des capteurs (Jameson *et al.*, 1981). En règle générale, celle-ci est appliquée très localement et en petites quantités. La précision globale des calculs n'est pas affectée par cette stratégie, comme le montre (Selle *et al.*, 2004). Néanmoins, dans certains cas fortement compressible et/ou en simulation diphasique eulérienne-eulérienne, de très forts gradients (front de ammes, chocs, concentration préférentielle de goutellettes...) peuvent apparaˆtre et d'autres solutions doivent être envisagées.

Le problème est encore plus critique dans le contexte de la modélisation de la phase dispersée basée sur la formulation Eulérienne mésoscopique décrite par Simonin (1996*b*); Riber *et al.* (2006). En effet et bien que les équations sont similaires à celles d'Euler et de Navier-Stokes, ce qui permet d'utiliser les mêmes algorithmes pour les deux phases liquides et gazeuses, les phénomènes de concentration préférentielle peuvent induire de très grandes variations de densité des gouttes qui doivent être proprement gérées par les méthodes numériques.

Nous présentons ici la revue de trois méthodes numériques pour traiter la phase dispersée par une approche Eulérienne. La première, non détaillée par la suite, consiste à utiliser les schémas classiques d'AVBP associées à une viscosité artificielle scalaire. La seconde introduit l'utilisation de schémas décentrés. Ceux-ci sont pour le moment d'ordre faible, le but étant de regarder l'impact d'une telle formulation par rapport aux schémas classiques TTGC. Finalement, une méthode Flux-Corrected Transport (FCT) est étudiée. Cette méthode, introduite par Boris & Book (1973), exprimée par Zalesak (1979) dans le cas multidimensionnel et généralisée aux éléments finis par Lohner *et al.* (1987) et Kuzmin (2009), s'avère être très efficace mais très coûteuse. Le principe de base est d'associer un schéma d'ordre faible monotone à un second schéma d'ordre plus élevé afin d'assurer à la fois une haute précision dans les régions où l'écoulement n'est pas perturbé et la stabilité là où se produisent des discontinuités.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec Nicolas Lamarque (Lamarque, 2007) et cherche à statuer sur les schémas numériques à appliquer à la description des écoulements diphasiques Euler/Euler en SGE sur des maillages non-structurés comme ceux disponibles dans AVBP. A cette occasion, de nouveaux schémas sont développés dans AVBP et testés dans l'optique des simulations SGE des statoréacteurs.

Chapitre 13

Dé nition d un schéma adapté à la simulation de la phase dispersée

13.1 Les schémas à résidus distribués ou *RDS*

Les schémas RDS multi-dimensionnels décentrés aussi nommés *uctuation splitting* ont été introduits par Roe (1982) comme une alternative aux solvers de Riemann en *volumes nis* et à la méthode des éléments finis stabilisés. Le formulation RDS combine la physique du premier (en dissociant le résidus) et le cadre mathématique du second (très proche de la méthode Petrov-Galerkin). Deconinck *et al.* (2000) (Von Karmann Institute), Roe (1982) (Université du Michigan), Abgrall (2001) (Université de Bordeaux) et leurs collaborateurs (Ricchiuto *et al.*, 2005) ont développés les schémas RDS depuis les vingt dernières années.

La méthode RDS présente l'avantage d'être équivalente à la méthode *cell-vertex* (les métriques sont identiques, la construction du résidu à la cellule et sa distribution aux noeuds du maillage...) pour des éléments linéaires de type P1 (triangles et tétrahèdres) (Rudgyard, 1993*b*). L'implémentation de ces schémas dans AVBP est ainsi aisée. Trois schémas RDS décentrés vont être présentés :

- Le schéma N (*Narrow*).
- Le schéma LDA (*Low Diffusion A*).
- Le schéma PSI (*Positive Streamwise Invariant*).

Si on s'intéresse à l'équation de convection linéaire à coefficients constants :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u = 0. \tag{13.1}$$

La première étape est de décomposer le domaine 2D (3D) noté $\mathscr{T}_h$ en triangles (tétrahèdres) notés T_e :

$$= \bigcup_{T_e \in \mathscr{T}_h} T_e. \tag{13.2}$$

La solution est approximée à l'aide des fonctions de forme $_k(\vec{x})$ associées à k, sommet de l'élément

considéré :

$$u_h(\vec{x},t) = \sum_{k=1}^{N_h} U_k(t) \ \ _k(\vec{x}). \tag{13.3}$$

A l'instar de la méthode *cell-vertex* , on introduit le calcul d'un résidu :

$$R_e = \int_{T_e} \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h d\mathscr{V}, \tag{13.4}$$

qui peut s'écrire pour un élément k_e[1] :

$$R_e = -\frac{1}{V_e} \sum_{l \in K_e} k_l U_l, \tag{13.5}$$

où $k_l = -\frac{1}{d}\vec{c} \cdot \vec{S}_l$ est un senseur "entrant" et $\vec{S}_l$ est la normale sortante à la face opposée au noeud l multipliée par l'aire de la surface considérée. On introduit également la *uctuation*[2] comme définie par Hubbard & Roe (2000) :

$$\Phi_e = -R_e V_e. \tag{13.6}$$

Le nombre de noeuds N_h diffère du nombre de cellules N_T (et par là-même du nombre d'équations à résoudre). Afin d'équilibrer le système à résoudre, les résidus sont distribués aux noeuds :

$$N_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathscr{D}_j} D_{j,e} R_e V_e. \tag{13.7}$$

où $D_{j,e}$ est la matrice de distribution (également notée $\ _{j,e}$).

Ainsi, pour obtenir un schéma centré, le résidu peut être distribué équitablement entre les différents noeuds appartenant à l'élément considéré (Rudgyard, 1990). En formulation RDS, le principe est de ne distribuer le résidu qu'aux noeuds dits "avals", définis par $k_l > 0$. Par conséquence, les schémas RDS sont dits *décentrés*.

Comme présenté par Struijs (1994), différentes configurations peuvent être rencontrées en fonction du nombre de ces noeuds "avals". Intéressons nous au cas bidimensionnels (triangles) : en fonction de la direction du vecteur vitesse $\vec{c}$, on peut trouver un ou deux sommets *cibles*.

Dans le cas "1 cible", les trois schémas décrits par la suite sont identiques : ils consistent tous à envoyer le résidu en un noeud unique de la cellule considérée. Le schéma est alors amont, positif et préserve la linéarité (schéma d'ordre 2). L'approche va différer dans le cas d'une configuration à "2 cibles".

[1] L'indice e se réfère à la cellule.

[2] qui a ici le signe opposé à celui du résidu classique

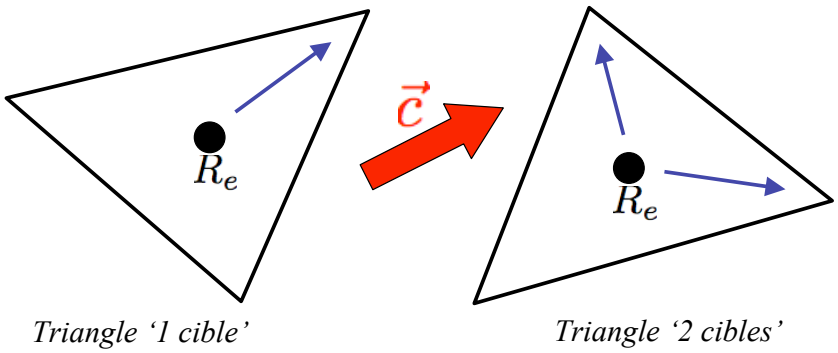


FIG. 13.1 - *Distribution du résidu dé ni à la cellule dans le cas d'une con guration "1 cible" ou "2 cibles" en 2 dimensions pour des triangles*

13.1.1 Notations

On introduit les notations suivantes qui seront utiles pour la définition des schémas amont qui suivent :

$$\begin{array}{rcl} k_l^+ & = & \max(0,k_l) \\ k_l^- & = & \min(0,k_l) \\ U_{e,in} & = & \left(\sum_{l\in K_e} k_l^-\right)^{-1} \cdot \left(\sum_{l\in K_e} k_l^- U_l\right), \end{array}$$

et $U_{e,in}$ correspond à la valeur de u_h dans le triangle K_e au point d'entrée de l'écoulement[3]. Ces notations vont permettre de définir les contributions $\Phi_{j,e}$ aux résidus aux noeuds pour chaque schéma, quel que soit le type de triangle (ou de tétraèdre) considéré. On a de plus :

$$N_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e\in\mathscr{D}_j} D_{j,e} V_e R_e = \frac{1}{V_j} \sum_{e\in\mathscr{D}_j} \Phi_{j,e}.$$

On considèrera également l'égalité suivante :

$$\left(\sum_{l\in K_e} k_l^-\right)^{-1} = -\left(\sum_{l\in K_e} k_l^+\right)^{-1}.$$

13.1.2 Le schéma N (*Narrow*)

Ce schéma a le plus petit stencil parmi les schémas amont linéaires. Il est positif (Struijs, 1994; van der Weide, 1998; Mezine *et al.*, 2003) mais ne préserve pas la linéarité (les coefficients $R_{j,e}$ N_j ne sont pas bornés quand R_e tend vers zéro).

Le résidu au sommet j de l'élément e est défini par :

$$\boxed{\Phi_{j,e}^N = k_j^+ (U_j - U_{e,in})} \tag{13.8}$$

[3]Ce point d'entrée correspond au seul point amont pour le triangle à 2 cibles et à la projection suivant la direction de $\vec{c}$ du seul point aval sur l'arête où l'écoulement entre dans le cas à 1 cible.

Qui peut se réécrire sous la forme :

$$\Phi^N_{j,e} = k^+_j \cdot \left(\sum_{l \in K_e} k^-_l \right)^{-1} \cdot \left[\sum_{l \in K_e} k^-_l \, (U_j - U_l) \right]$$

Une interprétation géométrique peut être donnée à la distribution du résidu aux deux noeuds avals (van der Weide (1998)) : en les notant 1 et 2, le vecteur vitesse $\vec{c}$ est décomposé en deux parties $\vec{c} = \vec{c}_1 + \vec{c}_2$, suivant les directions des arêtes reliant le point 3 (amont) au point aval 1 ou 2. Les contributions aux points 1 et 2 correspondent alors aux résidus construits avec $\vec{c}_1$ et $\vec{c}_2$ au lieu de $\vec{c}$ (voir figure 13.2). Si on somme les 2 contributions, on retrouve bien le résidu R_e :

$$\begin{aligned} \Phi_{1,e} + \Phi_{2,e} &= R_e(\vec{c}_1) V_e + R_e(\vec{c}_2) V_e \\ &= \oint_{\partial K_e} u_h \, \vec{c}_1 \cdot \vec{n} \, d\mathscr{S} + \oint_{\partial K_e} u_h \, \vec{c}_2 \cdot \vec{n} \, d\mathscr{S} \end{aligned}$$

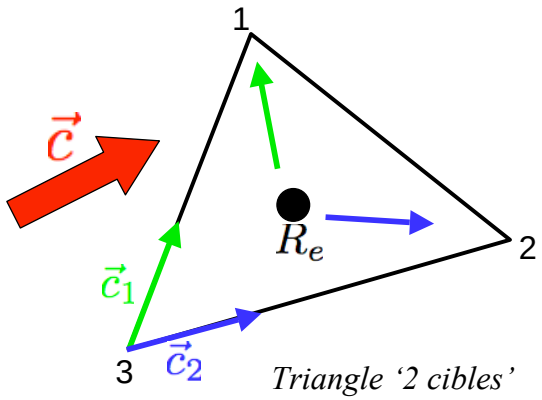


FIG. 13.2 - *Schéma N pour un triangle à 2 cibles. Le vecteur vitesse se décompose en deux composantes $\vec{c}_1$ et $\vec{c}_2$ qui permettent de construire les contributions aux sommets en aval.*

13.1.3 Le schéma LDA (*Low-Diffusion A*)

Ce schéma, au contraire du N, préserve la linéarité. Toutefois, étant linéaire, la propriété de positivité est perdue.

Le coefficient de distribution du schéma LDA est le suivant (van der Weide, 1998) :

$$\boxed{D^{LDA}_{j,e} = \frac{k^+_j}{\sum_{l \in K_e} k^+_l}} \tag{13.9}$$

Le schéma LDA peut aussi être interprété géométriquement pour un triangle à 2 cibles. Il partage le résidu R_e entre les deux triangles définis par le point amont, un point aval et le point de sortie P_{out} qui correspond à la projection suivant la direction $\vec{c}$ du point amont sur l'arête d'où sort l'écoulement. La pondération pour le partage du résidu est fonction de l'aire des triangles (Struijs, 1994) (voir figure 13.3).

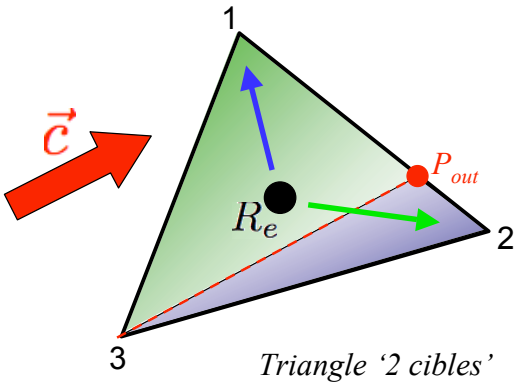


FIG. 13.3 - *Schéma LDA pour un triangle à 2 cibles. Le résidu est partagé entre les points 1 et 2 en fonction de l'aire des triangles* $12P_{out}$ *et* $13P_{out}$.

13.1.4 Le schéma PSI (*Positive Stream Invariant*)

Ce schéma est le plus intéressant des trois présentés dans cette section : il rassemble les propriétés des schémas N et LDA : il est en effet positif et préserve la linéarité (non linéaire) (Struijs, 1994).

Le coefficient de distribution correspondant est le suivant :

$$\boxed{D_{j,e}^{PSI} = \frac{\max(0, D_{j,e}^{N})}{\sum_{l \in K_e} \max(0, D_{l,e}^{N})}} \tag{13.10}$$

où $D_{j,e}^{N} = \frac{\Phi_{j,e}^{N}}{R_e V_e}$. Différentes approches peuvent être utilisées pour décrire ce schéma. En particulier, Sidilkover & Roe (1995) ont montré *a posteriori* qu'il peut être interprété comme un schéma N limité par le limiteur minmod.

Ce schéma a été retenu pour la suite.

13.1.5 Formulation système des schémas RDS

On considère le système d'équations écrit sous forme conservative :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathscr{F}}(\mathbf{U}) = \mathbf{S} \tag{13.11}$$

Qui peut se réécrire sous forme quasi-linéaire :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\mathscr{A}}(\mathbf{U}) \cdot \vec{\nabla}\mathbf{U} = \mathbf{0} \tag{13.12}$$

où $\vec{\mathscr{A}}(\mathbf{U}) = (\underline{\mathbf{A}}, \underline{\mathbf{B}}, \underline{\mathbf{C}})^T$ représente la matrice jacobienne des ux. Le passage d'une équation scalaire à un système se fait en réalisant une analogie entre le paramètre "entrant" k_l et les valeurs propres de cette jacobienne.

On peut alors écrire :

$$\mathbf{K}^{\pm} = \mathbf{R_i} \cdot \left(\frac{ {}_i \pm \quad {}_i}{2} \right) \cdot \mathbf{R_i^{-1}} \tag{13.13}$$

où $\mathbf{R_i}$ est la matrice des vecteurs propres à droite et ${}_i$ la matrice des vecteurs propres.

La formulation du schéma est alors identique à l'Eq. 13.10.

13.2 Adaptation des schémas au formalisme Eulérien

On ne s'intéresse ici qu'à la partie hyperbolique des équations de conservation pour la phase dispersée[4]. Pour plus de simplicité, le symbole $\cdot$ est omis pour indiquer les valeurs mésoscopiques. L'ensemble des écritures, en particulier les matrices des vecteurs propres, est donné en Annexe A.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\ {}_p\ {}_p + \frac{\partial}{\partial x_j}\ {}_p\ {}_p u_{p,j} &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial t}\ {}_p\ {}_p u_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\ {}_p\ {}_p u_{p,i} u_{p,j} &= -\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\ {}_p\ {}_p\ {}_p \\
\frac{\partial}{\partial t}\ {}_p\ {}_p\ {}_p + \frac{\partial}{\partial x_j}\ {}_p\ {}_p\ {}_p u_{p,j} &= -\frac{2}{3}\ {}_p\ {}_p\ {}_p \frac{\partial}{\partial x_j} u_{p,j} \\
\frac{\partial}{\partial t}\ {}_p\ {}_p h_p + \frac{\partial}{\partial x_j}\ {}_p\ {}_p h_p u_{p,j} &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial t} d_{00}\ + \frac{\partial}{\partial x_j} d_{00}\ u_{p,j} &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial t} n_p + \frac{\partial}{\partial x_j} n_p u_{p,j} &= 0
\end{aligned} \tag{13.14}$$

Ces équations de conservation peuvent être écrites sous formes compactes :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathscr{F}}(\mathbf{U}) = \mathbf{S} \tag{13.15}$$

[4]Il est à noter que d_{00} n'est introduit que pour parfaire au formalisme suivi dans AVBP. Le caractère polydisperse de sous-maille n'est pas pris en compte dans la présente étude

Où **U** est le m-vecteur des variables conservatives, $\vec{\mathscr{F}}$ le tenseur des ux correspondant et :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{2}{3} \ p \ p \quad p\frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_j} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{13.16}$$

Pour construire un schéma numérique décentré, il est plus approprié d'utiliser la forme quasi-linéaire de l'Eq.13.15 :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\mathscr{A}}(\mathbf{U}) \cdot \vec{\nabla}\mathbf{U} = \mathbf{0} \tag{13.17}$$

où $\vec{\mathscr{A}}(\mathbf{U}) = (\underline{\mathbf{A}}, \underline{\mathbf{B}}, \underline{\mathbf{C}})^T$ est la matrice jacobienne des ux.

Posons $\vec{n} = n_x\vec{e}_x + n_y\vec{e}_y + n_z\vec{e}_z$. On définit alors :

$$\underline{\mathbf{K}} = \vec{\mathscr{A}} \cdot \vec{n} = \underline{\mathbf{A}}n_x + \underline{\mathbf{B}}n_y + \underline{\mathbf{C}}n_z$$

Si **K** est diagonalisable, alors le calcul des vecteurs propres et des valeurs propres est possbiles. On notera en particulier la matrice des valeurs propres du système :

$$\begin{pmatrix} \vec{u_p}\cdot\vec{n} - \sqrt{\frac{10}{9}\frac{p}{p \ p}}\ \vec{n} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \vec{u_p}\cdot\vec{n} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \vec{u_p}\cdot\vec{n} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \vec{u_p}\cdot\vec{n} + \sqrt{\frac{10}{9}\frac{p}{p \ p}}\ \vec{n} \end{pmatrix} \tag{13.18}$$

Il est intéressant à ce niveau de faire apparaître une vitesse de propagation par analogie à la vitesse du son dun gaz parfait :

$$c_p = \sqrt{\frac{10}{9} \quad p}$$

On notera qu'ici, un terme de pression lié au mouvement décorrélé (*R.U.M*) peut être introduit par analogie avec les équations d'Euler et s'écrit :

$$p_{RUM} = \frac{2}{3} \ p \ p \quad p \qquad \text{ce qui donne :} c_p = \sqrt{\frac{5}{3}\frac{p_{RUM}}{p \ p}}.$$

Il est possible d'utiliser p_{RUM} comme variable primitive mais nous conserverons $_p$ pour des raisons pratiques. On notera qu'une singularité apparaît si cette pseudo-vitesse du son devient nulle. Toutefois, on considère ici que le mouvement décorrélé est non nul du moment où plusieurs particules se trouvent localisées dans une même cellule. Un epsilon est alors introduit.

13.3 Présentation de la méthode *FCT*

On propose d'adapter la méthode FCT décrite par Hubbard & Roe (2000) pour la phase dispersée et de la tester dans AVBP. En effet, si les méthodes numériques utilisées dans AVBP ont montré tout leur potentiel pour la simulation des écoulements réactifs monophasiques (Lamarque, 2007), il n'en est pas de même pour la phase liquide. En particulier, le comportement global d'un nuage de goutte rappelle celui d'un uide très compressibles[5]. Des gradients très importants peuvent alors apparaître dans un écoulement turbulent et l'emploi de viscosité artificielle massive est nécessaire (Lamarque, 2007). Si des travaux menés sur les différents senseurs sont en cours (Sanjosé *et al.*, 2008) et ont déjà montré des progrès très encourageant, il semble nécessaire d'avoir accès à un schéma numérique robuste, comme peut l'être le schéma PSI, mais également précis, ce dernier schéma ayant montré une dissipation forte dans le sens de l'écoulement (autre avantage par rapport à la viscosité artificielle).

Une solution prometteuse est donc la méthode *Flux-Corrected Transport* (Zalesak, 1979). Celle-ci combine deux schémas numériques :

- Un schéma bas ordre, diffusif, si possible positif et robuste. Le schéma utilisé sera le schéma PSI associé à une intégration temporelle de type Runge-Kutta d'ordre 1.
- Un schéma haut ordre qui va donner au schéma final ses caractéristiques de précision. Les premiers tests de cette méthode ont utilisé le schéma Lax-Wendroff basé sur une méthode *éléments nis* .

13.3.1 Combiner deux schémas numériques ?

Le principe même de la méthode FCT est d'utiliser au maximum la uctuation définie par le schéma haut ordre. Celle-ci peut se décomposer en cinq étapes :

1. Calculer les contributions d'ordre faible $w_{low\,order}$ et d'ordre élevée $w_{high\,order}$ pour chaque élément[6].
2. Mettre à jour la solution avec la contribution d'ordre faible
3. Calculer les limites que la solution à l'instant n+1 ne devra pas dépasser afin de garantir les caractéristiques de positivité du schéma.
4. Corriger ainsi la solution avec le ux antidiffusif $w_{high\,order} - w_{low\,order}$ pondéré par un limiteur permettant de respecter l'étape précédente.
5. Mettre à jour la solution finale.

Les étapes fondamentales 3 et 4 sont décrites par la suite.

13.3.2 Procédure de limitation du ux anti-diffusif

Le but premier de la méthode est de rendre la contribution du schéma d'ordre élevé la plus grande possible sans introduire de nouveaux extremum dans la solution.

[5]Une analogie peut-être faite avec la vitesse du son définie pour la phase dispersée par $c_p = \sqrt{\frac{5}{3}\frac{p_{RUM}}{\rho_p}}$: en l'absence de mouvement décorélé, celle-ci tend vers zéro et le nombre de Mach représentatif de la goutte vers l'infini

[6]On rappelle que notre choix d'utiliser le schéma PSI nous limite pour le moment à des éléments de type triangle ou tétrahèdre.

Différentes quantités sont tout d'abord évaluées pour connaˆtre les valeurs extrêmes u_i^{min} and u_i^{max}, au-deçà et au-delà desquelles la positivité n'est plus assurée.

Notons que i représente un noeud tandis que j représente l'élément.

Ces limites sont calculées de la manière suivante :

$$u_i^* = \left\{ \begin{array}{ll} min & \left(u_i^{low}, u_i^n\right) \\ max & \end{array} \right. \tag{13.19}$$

$$u_j^* = \left\{ \begin{array}{ll} min & u_i^*, \quad i \in \quad _j \\ max & \end{array} \right. \tag{13.20}$$

$$u_i^{\substack{max \\ min}} = \left\{ \begin{array}{ll} min & u_j^*, \quad j \in \quad _i \\ max & \end{array} \right. \tag{13.21}$$

Cette étape du calcul du minimum et du maximum de la solution intiale et celle mise-à-jour à l'aide du schéma d'ordre faible et est illustrée en Fig. 13.4 (a). Celle-ci montre la solution obtenue, pour une convection de gaussienne, à la fin de l'itération et ses bornes minimale et maximale.

Une fois ces bornes évaluées, l'étape suivante consiste à calculer un facteur limite qui contraindra le ux anti-diffusif. En notant AEC_i^j, la contribution anti-diffusive de l'élément j au noeud i, quatre quantités sont alors évaluées :

– Les ux anti-diffusifs maximum/minimum qui peuvent être ajoutés :

$$P_i^{\substack{+ \\ -}} = \sum_{j \in \quad _i} \left\{ \begin{array}{ll} min & \left(0, AEC_i^j\right) \\ max & \end{array} \right. \tag{13.22}$$

– Les ux anti-diffusif maximum/minimum admissible sans introduire de nouveaux extrema :

$$Q_i^{\substack{+ \\ -}} = u_i^{\substack{max \\ min}} - u_i^{low} \tag{13.23}$$

– Ces dernières quantités sont alors comparées :

$$W_i^{\substack{+ \\ -}} = \left\{ \begin{array}{ll} min\left(0, P_i^{\substack{+ \\ -}}\right) & \text{if } P_i^{\substack{+ \\ -}} = 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{array} \right. \tag{13.24}$$

– Et finalement le facteur pondérant le ux anti-diffusif s'écrit :

$$\left(\begin{array}{c} j \\ i \end{array} \right)^{max} = \left\{ \begin{array}{ll} W_i^+ & \text{if} \quad AEC_i^j > 0 \\ W_i^- & \text{if} \quad AEC_i^j < 0 \end{array} \right. \tag{13.25}$$

Finalement, l'écriture du schéma devient :

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \quad t \sum_{e \in \mathscr{D}_j} dU_{j,e}^{n,low} + \quad t \underbrace{\sum_{e \in \mathscr{D}_j} \quad _e \left(dU_{j,e}^{n,high} - dU_{j,e}^{n,low}\right)}_{\text{contribution anti-diffusive}} \tag{13.26}$$

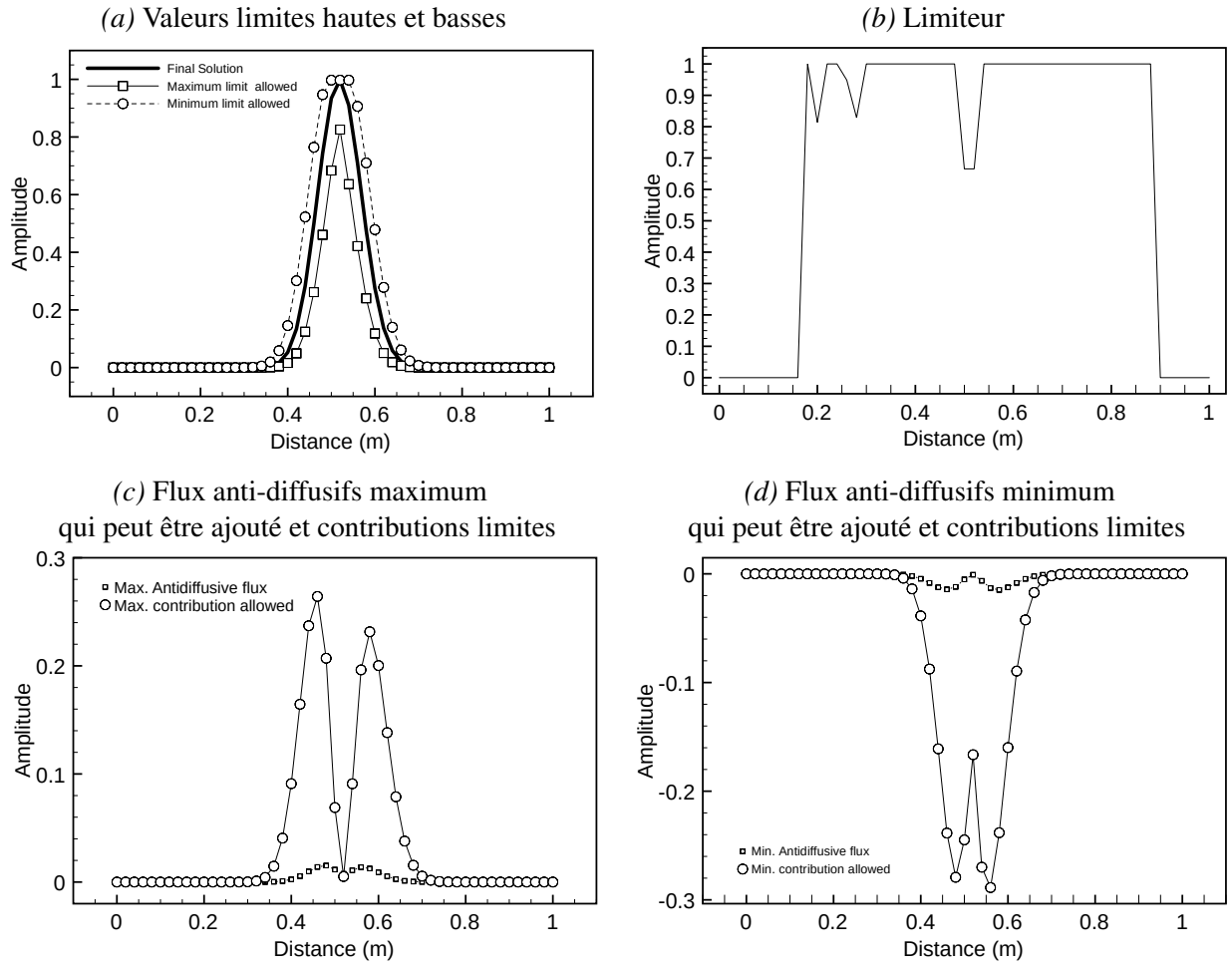


FIG. 13.4 - *Exemple de fonctionnement de la méthode FCT : calcul du limiteur lors de la convection d'une gaussienne.*

Le calcul du limiteur $_e$ peut être évalué à partir des variables conservatives ou primitives. Dans ce travail, le choix a été fait de se concentrer sur le transport des grandeurs primitives comme la fraction volumique de liquide ou la vitesse. Ceci se traduit par une diffusion supplémentaire apportée aux équations de transport de quantité de mouvement, d'enthalpie du liquide et de l'énergie décorrélée.

Chapitre 14

Expériences numériques

Le but de cette partie est de mieux appréhender les points positifs mais également négatifs des différents schémas étudiés. En particulier, on s'intéressera à qualifier la dissipation du schéma PSI par rapport aux schémas d'AVBP actuels. Ces expériences confirmeront *a posteriori* les différentes conclusions précédentes, en particulier la diffusion importante dans le sens de propagation uniquement mais aussi l'aspect non linéaire du schéma et son impact sur la dispersion. Les divers développements apportés au code SGE du CERFACS seront validés à cette occasion. Les différents cas tests choisis n'ayant pas pour but uniquement de montrer les meilleures qualités de tel ou tel schéma, on s'intéressera surtout à des cas tests représentatifs de la réalité dans une chambre de combustion industrielle diphasique ou de statoréacteur.

14.1 Convection

Le cas le plus simple est bien évidemment la convection linéaire, qui caractérisera directement la diffusion et la dispersion d'un schéma. L'étude est simplifiée au maximum et représente la convection d'un scalaire associé à un champ de vitesse $\vec{c}$ uniforme défini par sa valeur à l'instant initial $\vec{u}(\vec{x},t) = \vec{u}_0$. Deux types de solutions initiales seront étudiées : la première sera régulière afin d'évaluer la méthode numérique pure tandis que la seconde sera discontinue afin de montrer la limitation des schémas numériques centrés. Cette situation peut apparaˆtre par exemple dans le cas d'une configuration d'injection coaxiale avec élargissement brusque. Le maillage utilisé sera constitué de triangles et composé de 31x31 points aux bords donné par la Fig.14.1.

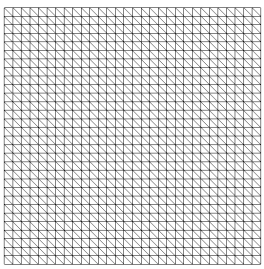


FIG. 14.1 - *Maillages utilisés pour les cas académiques présentés dans ce chapitre : triangles réguliers* 31×31

Une intégration temporelle de type Runge-Kutta d'ordre 1 est utilisée avec le schéma **PSI**. Il sera inmportant par la suite d'améliorer l'intégration temporelle si ce schéma est utilisé seul et non avec une méthode **FCT**.

14.1.1 Cas n°1 : Gaussienne

La première distribution prend la forme Gaussienne donc régulière et $\mathscr{C}^{\infty}$. Celle-ci est définie par :

$$\begin{cases} \vec{x} \in [0,1] \times [0,1] \\ \vec{c} = (1,0)^T \\ u(\vec{x},0) = \exp\left(\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma^2}\right) \end{cases}$$

avec $\sigma = 0.05$ m, $(x_0, y_0)^T = (0.5, 0.5)^T$. La Fig. 14.2 présente une coupe du scalaire passif le long de l'axe de convection tandis que la Fig. 14.3 présente des iso-contours du scalaire u pour la solution intiale (et par là-même la solution finale) et pour trois schémas : **Lax-Wendroff**, **PSI** et **FCT**. Le schéma de **Lax-Wendroff** se caractérise par une dispersion importante en particulier dans la direction diagonale définie par l'orientation des éléments. Le schéma **PSI** est très diffusif dans la direction de propagation mais ne présente pas de dispersion de la solution. Il est important de rappeler qu'une intégration temporelle de type Runge-Kutta d'ordre 1 a été utilisée et qu'une amélioration du schéma en temps permettrait une amélioration de la diffusion du schéma **PSI**, au détriment du temps de calcul. Finalement, pour la combinaison entre **PSI** et **LW**, la dispersion du schéma d'ordre élevé est limitée par l'introduction du schéma **PSI** tandis qu'à l'inverse, la diffusion du schéma **PSI** est limitée par le schéma **Lax-Wendroff**. Le schéma **TTGC** n'est pas présenté afin d'alléger la figure mais l'accord avec la solution analytique est quasiment parfait (super-convergence du schéma *éléments finis* sur ce type de maillage).

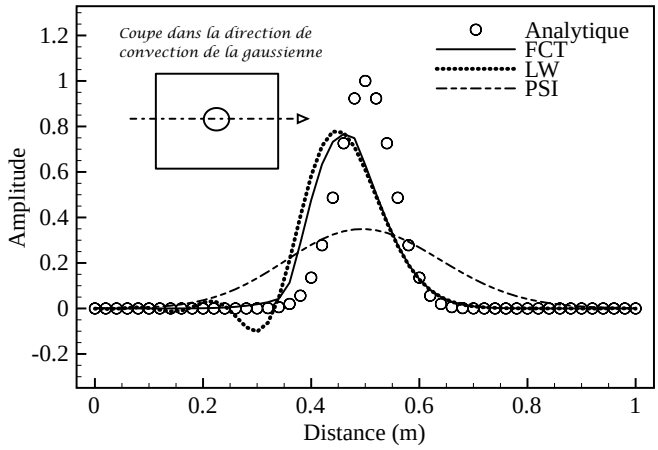


FIG. 14.2 - *Solutions pour la convection de gaussienne (grille 31×31). Profils le long de l'axe de convection.*

La Fig. 14.4 présente la convergence en maillage sur la convection de Gaussienne. Le schéma **PSI** est d'ordre inférieur à 1, le schéma **LW** d'ordre 2 tandis que le schéma **FCT** présente non seulement l'ordre de convergence du schéma d'ordre élevé mais aussi une erreur plus faible que ce dernier.

Il a été montré que le schéma **PSI** ne présente pas de dispersion de la solution (caractère non-linéaire du schéma). On s'intéresse désormais à caractériser l'impact de l'hyperviscosité d'ordre 4 (permettant

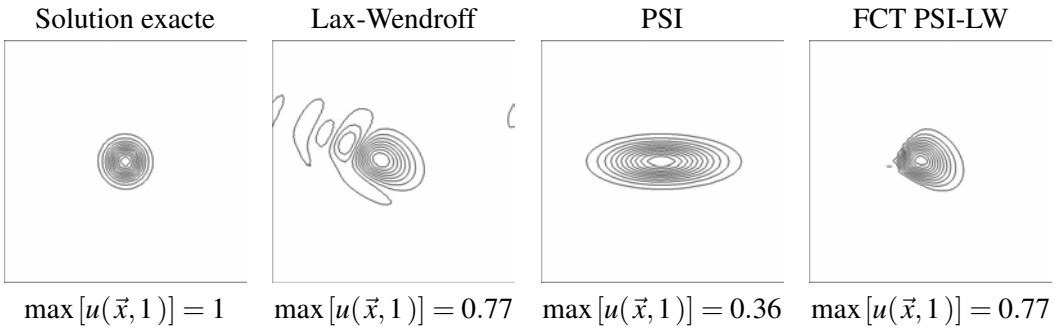


FIG. 14.3 - *Solutions pour la convection de gaussienne (grille 31×31) : iso-contours entre 0 et la valeur maximale atteinte par le scalaire passif après un tour.*

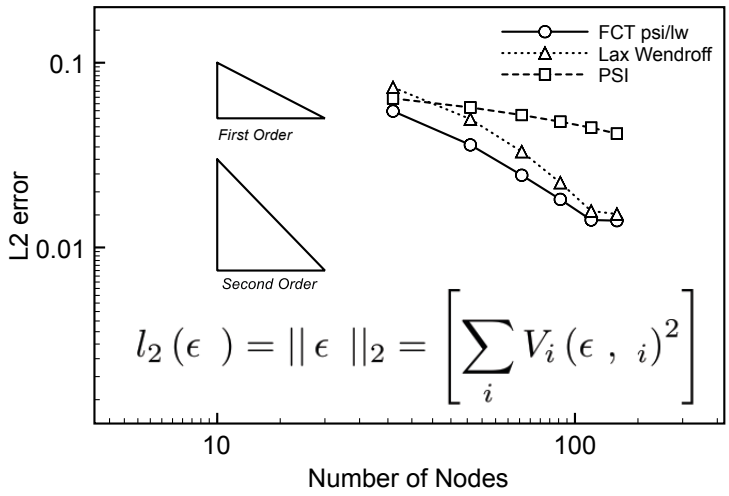


FIG. 14.4 - *Norme L^2 de l'erreur sur la convection d'une gaussienne.*

de corriger les oscillations noeuds-à-noeuds) sur la solution, en utilisant un maillage plus proche de ce qui peut être utilisé pour des calculs plus complexes (pas d'alignement des noeuds, pas de directions privilégiées...). Cette viscosité est appliquée dans tout le calcul excepté là où agit la viscosité d'ordre 2 et vient donc modifier la solution. Cette technique est celle utilisée de façon classique avec les schémas centrés d'AVBP. En effet, le schéma **TTGC** par exemple ne dissipe pas les hautes fréquences et le recours à cette viscosité est nécessaire pour amortir les oscillations noeud-à-noeud.

Deux valeurs des senseurs sont évaluées, caractéristiques des calculs réalisés actuellement, 0.05 et 0.1. Les résultats sont présentés en Fig. 14.5 et en Fig. 14.6 pour les deux schémas **TTGC** et **LW**. La convection est réalisée avec $\vec{c} = (1,1)^T$. L'impact de cette viscosité est sensible et une valeur du smu_4 de 0.05 dégrade déjà les valeurs maximales du scalaire. Ainsi, le recours à un schéma non-linéaire permet d'annuler les oscillations points-à-points et de ne pas utiliser de viscosité du quatrième ordre pour le schéma **FCT**.

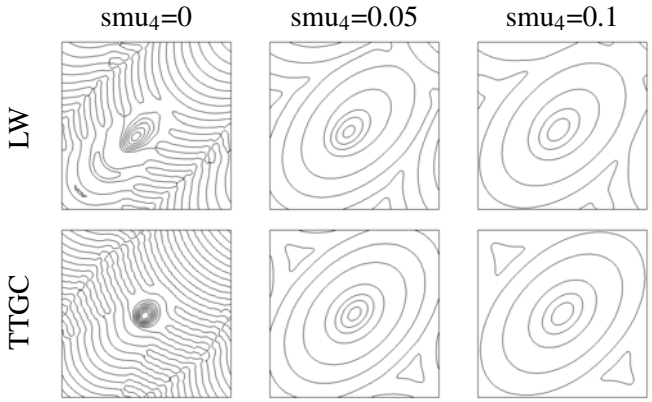


FIG. 14.5 - *Impact de la viscosité d'ordre 4 sur la convection de gaussienne.*

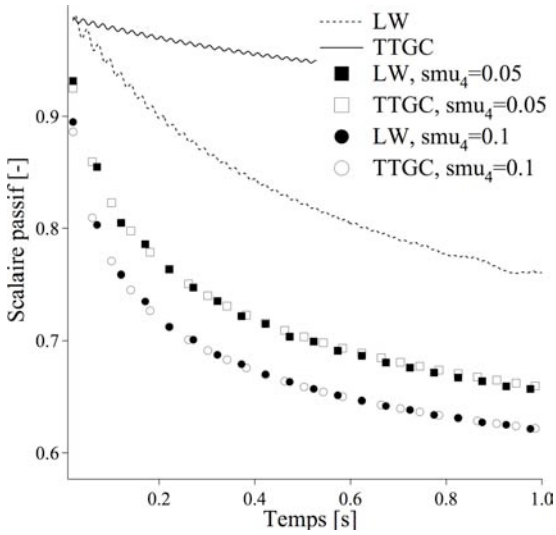


FIG. 14.6 - *Impact de la viscosité d'ordre 4 sur la convection de gaussienne. Evolution du maximum du scalaire passif en fonction du temps*

14.1.2 Cas n°2 : Cylindre

Le test précédent est repris en modifiant la condition initiale :

$$\begin{cases} \vec{x} \in [0,1] \times [0,1] \\ \vec{c} = (1,0)^T \\ u(\vec{x},0) = 1 \text{ si } \|\vec{x} - \vec{x}_0\| \leq r, \quad 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$

et $r = 0.25$ m. La fonction est continue par morceaux et n'est plus dérivable en tout point.

Ce cas test devient compliqué pour des schémas centrés en raison de la discontinuité et une viscosité d'ordre 2 doit être utilisée. En effet, ces schémas souffrent du phénomène de Gibbs (oscillations numériques près des discontinuités *-undershoot* et *overshoot-* dues à la discrétisation spatiale). La Fig. 14.7 présente après un tour deux coupes le long de la direction de propagation et dans la direction perpendiculaire. Le schéma **PSI** est positif. On note en particulier l'intérêt d'avoir un schéma qui n'intro-

duit pas de dissipation croisée (Fig. 14.7 -b)-). Le schéma **FCT** s'avère être un très bon compromis entre les deux schémas : non seulement les bornes de la solution sont conservées et très peu diminuées mais les gradients près des discontinuités transverses sont bien résolus. On note toutefois une dissymétrie de la solution (Fig. 14.7 -a)-) due au schéma **LW**.

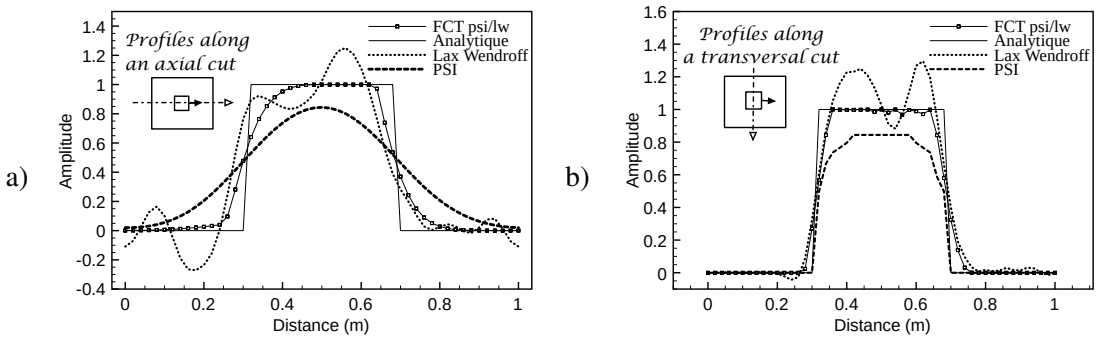


FIG. 14.7 - *Pro l pour un créneau à gauche et un triangle à droite (maillage 31-par-31).*

La Fig. 14.8 présente des iso-contours du scalaire *u* pour les trois schémas.

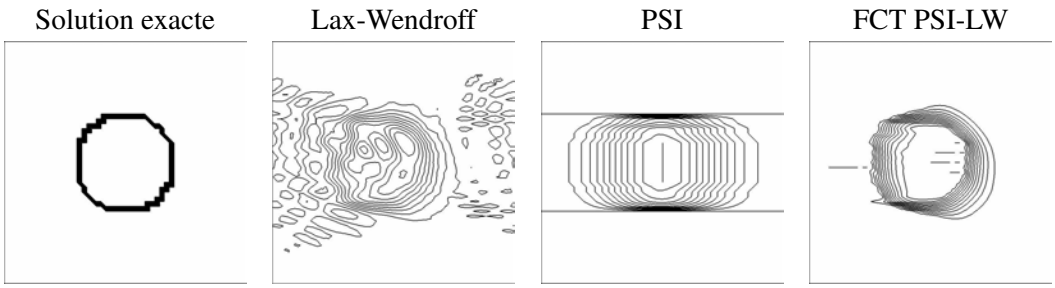


FIG. 14.8 - *Solutions pour la convection de créneau (grille 31×31).*

14.1.3 Cas n°3 : Burgers

Le dernier cas test simple concerne la convection d'une Gaussienne de fraction volumique de liquide associée à une Gaussienne de vitesse. Le différentiel de vitesse va créer une zone vide de goutte ainsi qu'une autre où les gouttes vont venir s'accumuler. Les résultats sont présentés en Fig. 14.9. Les schémas **TTGC** (avec viscosité artificielle) et **PSI** donnent des résultats comparables avec une diffusion accrue pour le dernier schéma. Au contraire, le schéma **FCT** gère beaucoup mieux les gradients en particulier grâce au choix du limiteur $_e$ basé sur les variables primitives. Si les résultats de ce dernier sur la vitesse sont comparables aux deux autres schémas, les deux zones de vide et d'accumulation sont bien décrites et surtout distinctes.

14.2 Tourbillons de Taylor-Green

Le cas test des tourbillons de Taylor-Green est une première étape vers la validation multidimensionnelle des schémas numériques pour la phase dispersée. En effet, bien que ce cas test reste 2D, il permet

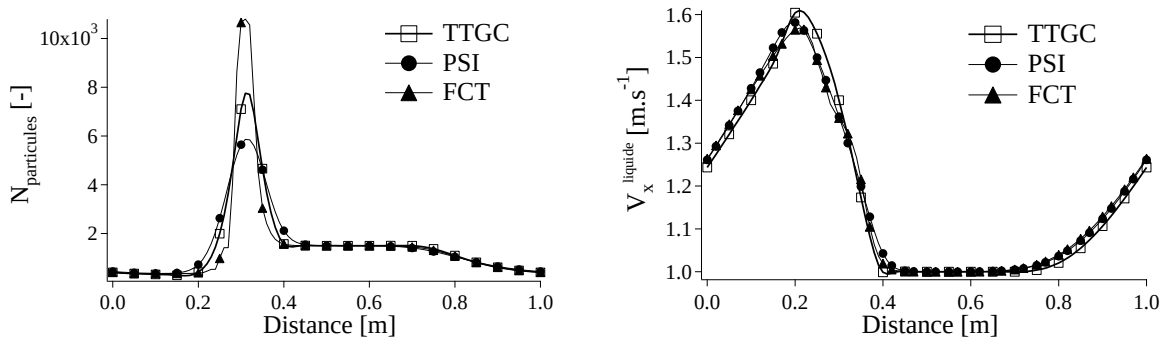


FIG. 14.9 - *Evolution spatiale de la densité de particule à gauche et de la vitesse axiale à droite pour les trois différents schémas.*

de valider, si le Stokes des gouttes est inférieur à un Stokes critique, l'accumulation de gouttes aux endroits de faible vorticité (concentration préférentielle) et leur éjection des zones fortement rotationnelles. Il présente ainsi des gradients de densité de goutte et de fraction volumique importants et est un cas test intéressant pour tester la robustesse des trois méthodes comparées. Ce cas a été décrit par De Chaisemartin (2009) pour comparer les résultats obtenus par un solveur Lagrangien à une description Eulérienne multi uide, résolue par un schéma cinétique robuste de type *volumes nis* du second ordre.

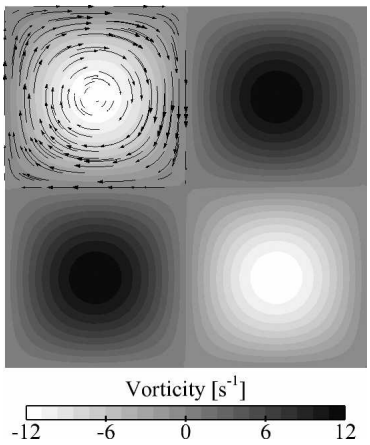


FIG. 14.10 - *Condition initiale : champ de vorticité et vecteurs vitesse pour le tourbillon supérieur gauche.*

Le cas test consiste à étudier la répartition de gouttes dans un champ de $[1 \times 1]$ m^2 comprenant quatre tourbillons contra-rotatifs placés en $(X_0;Y_0) = (0.25;0.25) = (0.75;0.25) = (0.75;0.75) = (0.25;0.75)$ m^2.

L'avantage de la non-diffusion du schéma décentré dans les directions transverses est ici fortement apprécié. En effet, les zones où les gouttes s'accumulent sont résolues sur seulement **PSI** que pour le schéma **TTGC** au centre de la configuration et au même temps (t=1.38 s). On note toutefois que la diffusion dans la direction perpendiculaire est supérieure pour **TTGC**.

Les résultats avec le schéma **PSI** sont qualitativement proches de ceux obtenus par De Chaisemartin (2009) avec un schéma gérant les systèmes sans terme de pression, ce qui donne une bonne idée de la qualité du schéma pour une telle application. On note toutefois une diffusion importante dans la direction

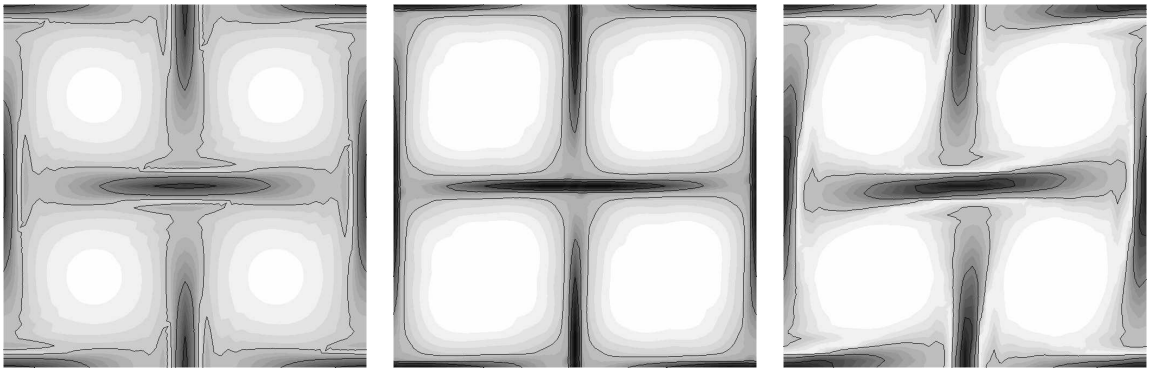


FIG. 14.11 - *Champs de densité de goutte pour les différents schémas. Du blanc (1×10^2) au noir ($1,25 \times 10^{14}$).*

de l'écoulement (intégration temporelle). Pour les deux autres schémas, les résultats sont relativement proches au niveau des zones de forte concentration en particules. Ainsi, la viscosité artificielle utilisée avec **TTGC** gère bien les gradients même si le maximum de concentration atteint est inférieur à celui obtenu avec **FCT**. La diffusion dans la direction transverse est également plus faible. La seconde observation se focalise sur les zones vides de goutte. En raison de l'utilisation de viscosité artificielle, le calcul avec **TTGC** présente des niveaux plus hauts en terme de densité de goutte dans ces zones.

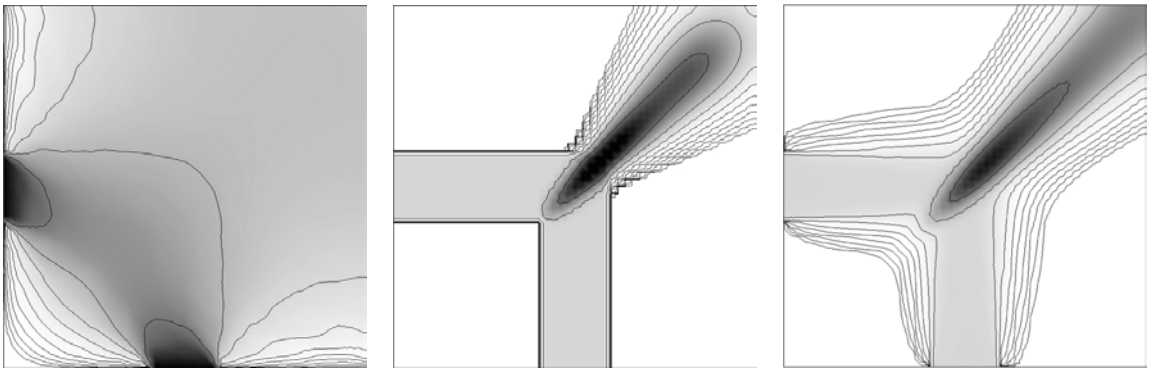
14.3 Croisement de jets : la question des -chocs

Le dernier cas test cherche à éprouver la robustesse des schémas par rapport à la formation de -chocs lors de croisement de jet. Deux sprays de liquide sont injectés à 10 m.s^{-1} dans une boˆte carrée de 1 m de côté et vont venir s'impacter au centre de la boˆte à 90°. L'aspect monodisperse de l'approche utilisée dans AVBP ne permet pas de gérer une telle configuration. Il résulte ainsi un jet ayant les propriétés moyennes des deux jets, tant en terme de densité de goutte qu'en terme de vitesse. La Fig. 14.12 présente les résultats pour les trois schémas. Deux conclusions apparaˆssent, en lien avec les cas test précédents. D'une part, l'utilisation de viscosité artificielle pour l'injection des jets dégrade fortement la qualité de la simulation (ce point est essentiel quant à l'utilisation de la viscosité dans des configurations plus complexes où des profils d'injection sont imposés). D'autre part, le schéma **PSI** gère parfaitement ce genre de configuration (qui est parfaitement adaptée pour un schéma décentré). Le schéma **FCT** apparaˆt comme une méthode intermédiaire avec une diffusion notable dans le sens tranverse à l'écoulement dès les surfaces d'injection.

On notera qu'une meilleure résolution en espace ne corrige pas suffisamment le mauvais comportement de l'opérateur de viscosité artificielle au niveau de l'injection.

14.4 Conclusion

Ces différents cas-tests ont permis d'observer et de qualifier le comportement de trois schémas pour différentes configurations. Le recours à un schéma centré d'ordre élevé pour la convection d'un scalaire



TTGC - $\max(\ _l) = 5 \times 10^{-3}$ **PSI** - $\max(\ _l) = 4.5 \times 10^{-2}$ **FCT** - $\max(\ _l) = 4 \times 10^{-2}$

FIG. 14.12 - *Champs de densité de goutte pour les différents schémas. Du blanc (*1×10^2*) au noir (*1.24×10^{12}*).*

donne d'excellents résultats comparés à un schéma décentré d'ordre faible ou au schéma **FCT**. Toutefois, en augmentant la complexité des cas tests, ces différences se prononcent et le schéma **TTGC** montre des faiblesses, en particulier pour reproduire l'injection de carburant dans une configuration simple. Les trois schémas vont maintenant être évalués sur des configurations tridimensionnelles.

Chapitre 15

Turbulence homogène isotrope chargée en particule

La Turbulence Homogène Isotrope librement décroissante (*THI*) est un cas test classique intéressant car elle offre un cadre théorique bien déterminé. En particulier, la simulation numérique directe de la phase gazeuse permet de se soustraire au modèle de sous maille tandis que la dispersion et la dynamique des particules peut être étudiée avec précision (Elghobashi & Truesdell, 1992; Kaufmann *et al.*, 2002*b*).

L'étude qui suit reprend les travaux de Riber (2007) et Kaufmann (2004) qui ont étudié l'impact du modèle d'énergie décorrélée dévelopé par Simonin (1996*a*) et Kaufmann *et al.* (2008) ainsi que du schéma numérique et de la viscosité artificielle sur une THI chargée en particules. Effectivement, celle-ci montre un impact sensible des effets de compressibilité qui sont difficiles à gérer numériquement. Le but de cette partie est ainsi d'évaluer l'apport d'un schéma numérique décentré ou d'une méthode hybride **FCT** pour le transport de la phase dispersée par rapport au schéma **TTGC** stabilisé par des viscosités artificielles du second et du quatrième ordre.

Les résultats seront comparés avec ceux obtenus par Moreau (2006). Ce dernier a utilisé le code *NTMIX3D* pour réaliser une simulation numérique directe des particules en Lagrangien. Ce code, basé sur les différences finies, utilise une discrétisation spatiale du sixième ordre (schéma de Lele (1992)) et une intégration temporelle de Runge-Kutta à l'ordre 3 pour la phase gazeuse. Une fois la simulation terminée, les résultats sont projetés grâce à une projection Gaussienne adéquate (Moreau, 2006).

15.1 Description du cas test

15.1.1 Schémas numériques et maillages testés

Le schéma **PSI** n'étant défini que sur des maillages composés de tétrahèdres, différents maillages vont être étudiés. Ceux-ci sont résumés en Tab. 15.1 : le maillage *Tetra1* est le plus lâche. Il est proche de ceux utilisé pour la simulation de configuration complexe : aucune direction de propagation n'est privilégiée. Le maillage *Tetra2* est quant à lui plus fin et est en réalité constitué d'hexaèdres qui ont été découpés en huit tétrahèdres. Il existe ainsi des directions privilégiées. Finalement, un calcul réalisé avec le schéma

TTGC a également été effectué sur un maillage hexaédrique en 128^3. Le schéma **FCT**, utilisé avec un schéma **LW** *éléments nis* , n'a lui été utilisé que sur le maillage *Tetra2* afin de voir les améliorations apportées par rapport au calcul à iso-maillage avec le schéma **PSI**.

Nom	Type	Noeuds	Celules	$V_{min}[mm^3]$	$t[\ s]$	TTGC	PSI	FCT
Hexa1	Hexa.	35,937 (64^3)	32,768	$9,46.10^{-4}$	0,133	x		
Hexa2	Hexa.	2,097,152 (128^3)	2,114,689	$1,18.10^{-4}$	0,077	x		
Tetra1	Tétra.	282,920	1,485,609	$1,14.10^{-5}$	0,033	x	x	
Tetra2	Tétra.	588,289	3,449,952	$7,1.10^{-5}$	0,064	x	x	x

TAB. 15.1 - *Maillages et schémas numériques testés sur la THI chargée en particule*

15.1.2 Initialisation du calcul

La procédure d'initialisation est classique. Le calcul est tout d'abord réalisé en monophasique : un champ de vitesse à divergence nulle est imposé de telle sorte que le spectre d'énergie cinétique corresponde à la relation de Passot & Pouquet (1987). Un temps de convection avec le schéma **Lax-Wendroff** est alors simulé. Pour la comparaison avec les résultats Lagrangien, les quantités d'intérêt sont adimensionnalisées par la vitesse du son c_{ref}, la longueur de la boˆte L_{ref} et un temps caractéristique T_{ref} (Tab. 15.2). Les grandeurs adimensionnalisées notées avec l'exposant $^+$.

$c_{ref}(m.s^{-1})$	$L_{ref}(m)$	$T_{ref}(s)$
347.0	10^{-3}	2.881810^{-6}

TAB. 15.2 - *Valeurs de référence utilisées pour l'adimensionnement des quantités d'intérêt.*

Le Tab. 15.3 compare les statistiques du champ turbulent lors de l'initialisation du calcul gazeux et à sa fin, avant injection des gouttes. Durant cet intervalle de temps, les structures les plus énergétiques sont bien modélisées par le spectre de Passot-Pouquet, transfèrent une part de leur énergie aux plus petites structures ce qui permet d'en donner une meilleure représentation. On note ici q_f^2 l'énergie cinétique du gaz, u_f la vitesse uctuante de la phase porteuse, $_f$ la dissipation du uide et L_{ii}^i les échelles de longueur intégrale.

t^+	q_f^{2+}	u_f^+	$_f^+$	L_{11}^{1+}	L_{22}^{2+}	L_{33}^{3+}
0	0.015	0.1	0.0015	0.881	0.852	0.571
t_0^+	0.00945	0.079	0.0012	0.926	0.935	0.557

TAB. 15.3 - *Analyse statistique du champ turbulent obtenu numériquement aux temps 0 et* t_0^+.

La phase dispersée est alors ajoutée de manière uniforme dans toute la boˆte avec une vitesse liquide égale à celle de la phase porteuse. Le niveau d'énergie décorrélée est mise à q_p=0.1. Le diamètre des particules est de d_p=17.3 m et la densité du liquide de $_p$=1916 kg.m^{-3}. Le nombre de Stokes correspondant est de 1.1. Celui-ci est basé sur l'échelle de temps intégrale du uide lorsque les particules sont

injectées ($^{+}_{f,t} = 4.19$). Il correspond au cas le plus difficile observé par Kaufmann (2004), le phénomène de concentration préférentielle étant très important comme le montre la Fig. 15.1 : les particules s'accumulent dans les zones de faible vorticité, menant à des forts gradients de densité de liquide.

t^+ $(-)$	St $(=$ $_p$ $_{f,t})$	$_p$ $(kg.m^{-3})$	d_p $($ $m)$	n_p (m^{-3})	$u_{p,i}$ $(m.s^{-1})$	$_p$ $(m^2.s^{-2})$
t_0^+	1.1	1916	17.3	10^{13}	$u_{f,i}$	0.1

TAB. 15.4 - *Propriétés de la phase dispersée au temps* $t_0^+ = 4.233$ *lorsque les particules sont injectées dans l'écoulement.*

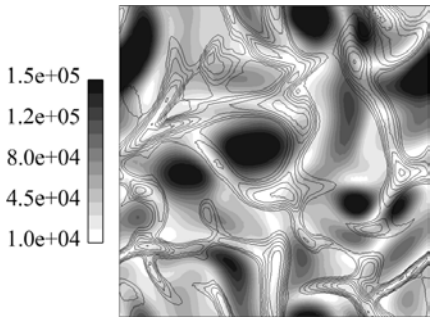


FIG. 15.1 - *Champ instantanné de vorticité* $[s^{-1}]$ *et contours de densité de goutte entre* 1×10^{12} *et* 5×10^{13} m^{-3}

15.2 Propiétés intégrales

La Fig. 15.2 montre l'évolution en fonction du temps réduit des grandeurs turbulentes diphasiques :

l'énergie cinétique du mouvement mésoscopique de la phase liquide $q_p^{2+} = \frac{1}{2}\, u_{l,i}u_{l,i}$,
la covariance des vitesses uide-particule $2q_{fp}^{+} = u_i u_{l,i}$,
l'énergie cinétique du mouvement décorrélé de la phase liquide $q_p^{2+} =$ $_l$,
la ségrégation n_p^2 n_p ^{2}.

La notation $^+$ représente une quantité adimensionnée par la vitesse du son $c_{ref} = 347$ m.s^{-1}, la longueur $L_{ref} = 1 \times 10^{-3}$ m et le temps $t_{ref} = 2.88181 \times 10^{-6}$ s. On note globalement un bon accord entre les différentes méthodes, quelque soit le maillage pour les quantités corrélées -Fig. 15.2 a) et b)- avec la simulation de référence Lagrangienne obtenue avec NTMIX. Les écarts sur la covariance uide-particule moyenne proviennent de l'énergie décorrélée dont l'évolution temporelle diffère sensiblement selon aussi bien le schéma que le maillage utilisé. Une meilleure discrétisation de la boˆte fournit une meilleure résolution des gradients et ainsi un meilleur comportemement du modèle eulérien. On notera que la simulation avec **TTGC** et le maillage *Tetra2* correspond aux résultats fourni par **PSI** et le maillage *Tetra1*. Aucun des calculs avec des maillages tétrahédriques ne permet de capter les bons niveaux d'énergie décorrélée moyenne, seul le calcul sur le maillage constitué d'hexaèdres (128^3) donne des résultats intéressants à ce niveau. Enfin, les niveaux de ségrégation -Fig. 15.2 d)- ne sont pas en accord avec la simulation Lagrangienne avec des écarts allant de 25% (**TTGC** sur *Tetra1*) à 10% (**PSI** sur *Tetra2*). Ceci peut s'expliquer pour le schéma **PSI** par une diffusion trop importante dans la direction

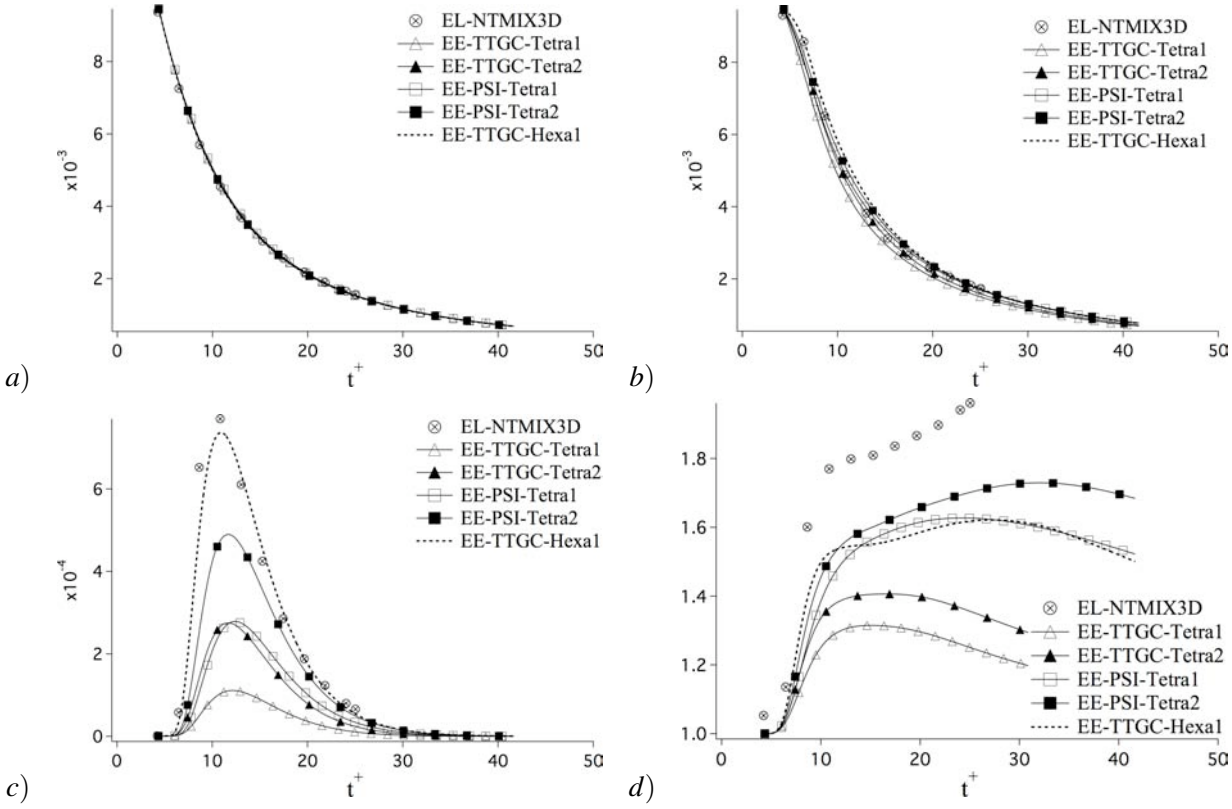


FIG. 15.2 - *Evolution temporelle de différentes quantités d'intérêt pour* **TTGC** *et* **PSI**, *comparées aux résultats de référence* **EL** *et pour trois maillages différents : a)* q_p^{2+} *, b)* $2\ q_{fp}^{+}$ *, c)* q_p^{2+} *et d)* $n_p^2 \quad n_p\ ^2$.

de l'écoulement. Les tendances fournies par les différentes simulations sont relativement bonnes. Toutefois, on note l'existence d'un point d'in exion à $t^+ \approx 15$ dans la simulation Lagrangienne qui n'est représentée que par la simulation **TTGC** sur *Hexa2*. Finalement, le manque de données de la simulation Lagrangienne est pénalisant. Celle-ci n'a pas en effet été prolongée suffisament de temps pour observer l'évolution de la ségrégation une fois la production d'énergie décorrélée terminée. La Fig. 15.3 présente l'évolution des valeurs minimales et maximales de l'énergie décorrélée des particules pour **TTGC** et **PSI** et pour les deux maillages *Tetra2* et *Hexa2*. Le schéma décentré conserve une valeur minimale de cette énergie positive tandis que les effets dus à la dispersion et aux phénomènes de Gibbs ne permettent pas à **TTGC** de reproduire cette physique. Il y a ainsi un grand dépassement, tant au niveau des valeurs minimales (fortement négatives) que maximales (fortement positives).

Des résultats plus récents avec **TTGC**[1] ont permis d'obtenir de très bons résultats sur la ségrégation (le second point d'in exion n'étant toujours pas reproduit). Toutefois, ceux-ci ont été obtenus en forçant la valeur minimale de l'énergie décorrélée à zéro et sa valeur maximale comme étant inférieure à 90% de la valeur maximale de l'énergie cinétique corrélée des particules dans la bo^te, seuillage irréaliste dans une configuration plus complexe. En effet, dans un statoréacteur par exemple, l'énergie cinétique des particules peut être très grande (par exemple dans les chocs où le couplage avec la tra^née induit de très fortes vitesses malgré une densité de particules quasi-nulle).

[1] Calculs réalisés par L. Martinez et A. Vie de l'IFP.

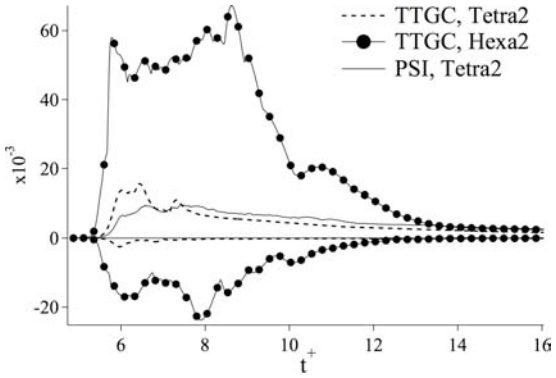


FIG. 15.3 - *Evolution temporelle de l'énergie décorrélée des particules minimale et maximale* q_p^{2+}

15.3 Champs instantanés de la phase dispersée

La Fig. 15.4 montre l'évolution de la répartition de la densité du nombre de goutte adimensionnalisée par le nombre de goutte moyen présent dans la boˆte ($n_p = 10^{13}$) pour cinq temps successifs dans le plan z=0 et obtenus en utilisant **TTGC** et **PSI** sur le maillage *Tetra2*. La comparaison des champs de densité de particules montre que les deux schémas capturent les grandes échelles de la phase dispersée. Les gradients de densité de particule sont toutefois moins diffusés avec le schéma décentré. Ceci est dû à la non-diffusion dans les directions transverses à l'écoulement.

On peut toutefois se demander quel est le vrai impact de la diffusion importante du schéma **PSI** associé à une intégration temporelle d'ordre 1 dans la direction parallèle à l'écoulement. Les champs de vitesse corrélée sont quant à eux similaires malgré quelques différences pour des t^+ importants. Là-encore, une question se pose, celle de l'utilisation d'un schéma de convection différent pour la phase gazeuse (**LW/PSI-TTGC/TTGC**). La Fig. 15.5 montre deux champs d'énergie décorrélée pour deux instants correspondants au maximum de production de R.U.M. Il existe plus de structures avec le schéma décentré comme l'a montré la Fig. 15.2 -c-, en raison d'une meilleure définition des gradients de densité de particule.

15.4 Comparaison des trois schémas sur le maillage *Tetra2*

La section précédente a permis d'étudier l'in uence du maillage ainsi que des premières comparaisons entre les schémas **PSI** et **TTGC** sur la THI. La Fig. 15.6 présente l'évolution temporelle de l'énergie corrélée moyenne des particules q_p^{2+} , de la corrélation uide-particule moyenne $2q_{fp}^{+}$, de l'énergie décorrélée moyenne des particules q_p^{2+} et de la ségrégation $n_p^2 \quad n_p\ ^2$ en fonction du temps réduit t^+ pour les trois schémas **TTGC**, **PSI** et **FCT** sur le maillage **Tetra2**. Le schéma **FCT** montre deux améliorations importantes :

– Le niveau d'énergie décorrélée est beaucoup plus proche de la simulation Lagrangienne, sans qu'aucun seuillage ne soit introduit (les valeurs restant positives). Il existe toujours une erreur de 7%.
– Les niveaux de ségrégation sont proches de ceux donnés par le schéma décentré. Au début, lorsque

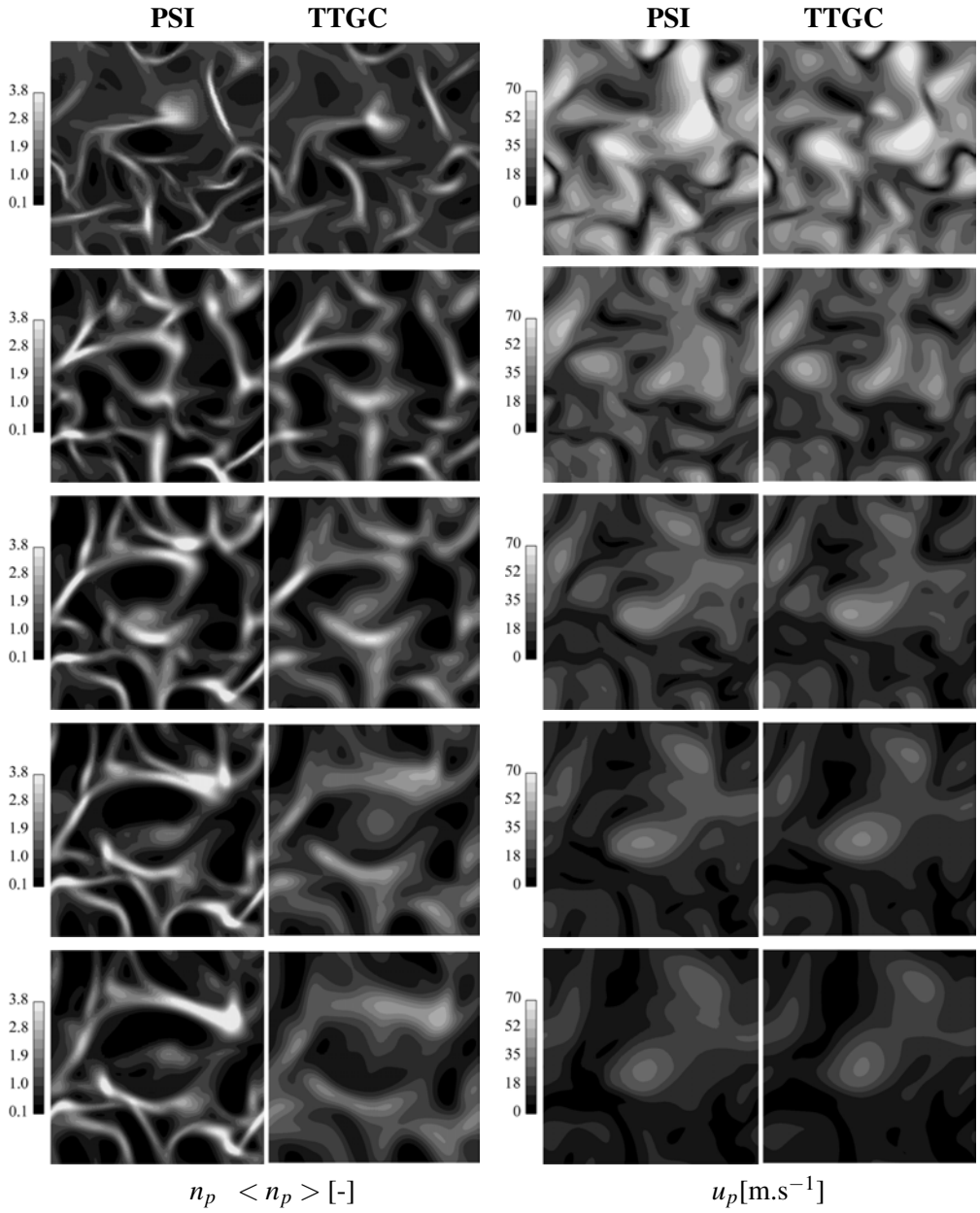


FIG. 15.4 - *Comparaison des champs de densité de nombre de particules* $n_p \ < n_p >$ *adimensionalisé par la valeur moyenne* $< n_p >= 10^{13}$ *pour les schémas* **PSI** *à gauche et* **TTGC** *à droite.* t^+*=8,34 à 41,6.*

les gouttes s'accumulent fortement dans les zones de faible vorticité ($10 < t^+ < 20$), le limiteur agit fortement et les niveaux deviennent plus faibles. Toutefois, une fois ce phénomène passé, le schéma **LW-FE** prend la suite avec des corrections beaucoup plus faibles. Ceci a un effet très intéressant : le second point d'in exion est alors capturé et les tendances sont bonnes comparées à **NTMIX**.

Le Tab. 15.5 résume les différents coûts de calculs des trois simulations. Ceux-ci sont très différents. En effet, le schéma à deux étapes **TTGC** est 15% moins cher que le schéma **PSI**. Ceci est dû au calcul des Jacobiennes $\mathbf{K}^{\pm}$ et de la matrice de distribution aux noeuds. Des améliorations sont actuellement

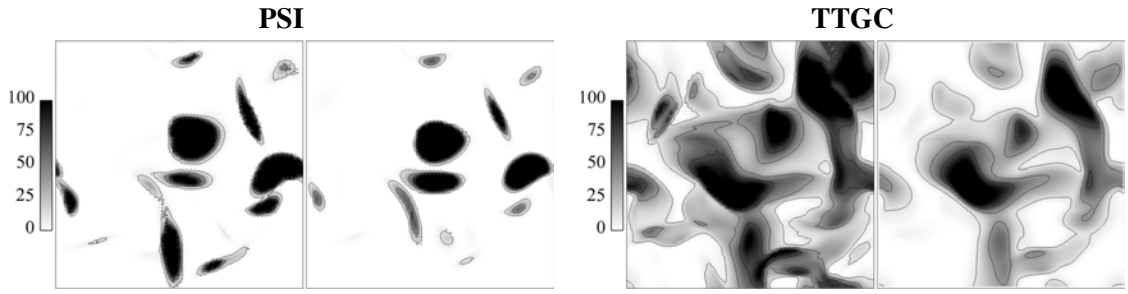


FIG. 15.5 - *Comparaison des champs d'énergie décorrélée des particules pour les schémas* **PSI** *à gauche et* **TTGC** *à droite pour les instants* $t^+ = 8,34$ *et* $16,6$.

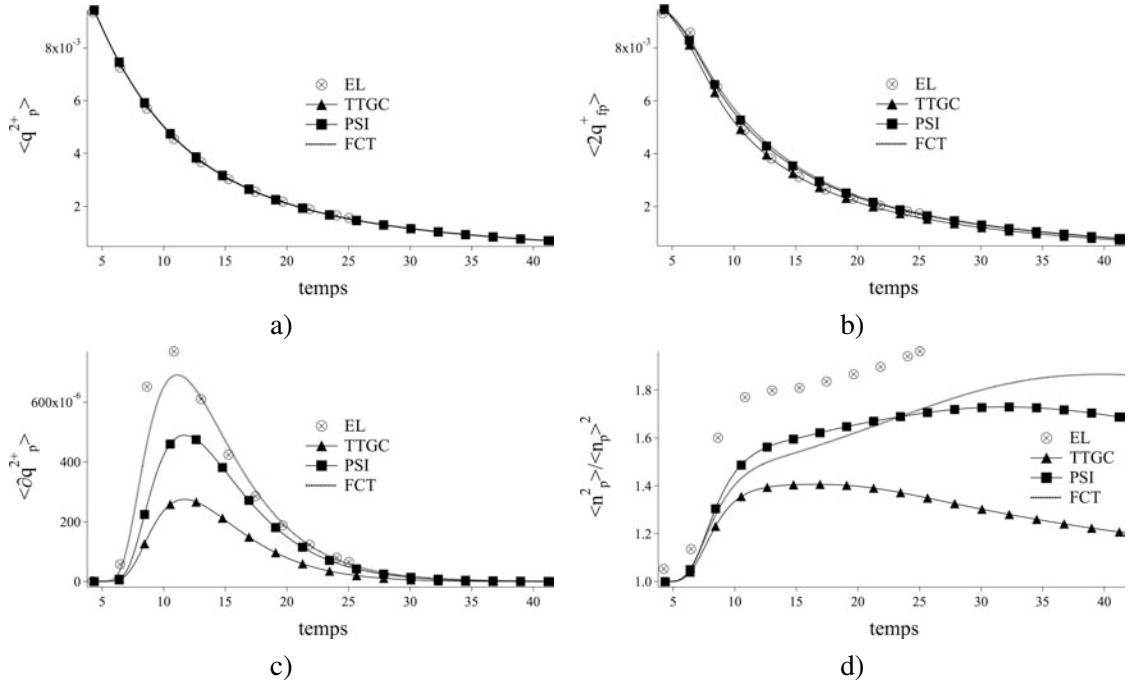


FIG. 15.6 - *Evolution temporelle de différentes quantités d'intérêt pour les trois schémas testés :* **TTGC**, **PSI** *et* **FCT**, *comparées aux résultats de référence* **EL** *fournis par NTMIX. a)* q_p^{2+} *, b)* $2q_{fp}^{+}$ *, c)* q_p^{2+} *et d)* $\frac{n_p^2}{n_p{}^2}$.

étudiées pour diminuer le coût de calcul. En particulier, connaissant $\mathbf{K}^+$ et $\mathbf{K}$, le calcul de $\mathbf{K}^-$ est direct et il est inutile de recalculer ce terme à partir des vecteurs et valeurs propres. Le gain en terme de temps de calcul est alors de 10%. Si l'objectif de ce travail est d'étudier différents schémas pour la phase dispersée et même si l'efficacité (coût de calcul) reste secondaire par rapport aux améliorations apportées, il est cependant important d'avoir une méthode efficace, en particulier si une montée en ordre est envisagée. Le schéma **FCT** est lui encore plus cher (plus de deux fois **TTGC**). En effet, il combine le calcul de deux matrices de distribution, **LW-FE** et **PSI** auquel s'ajoute le calcul d'un limiteur nécessitant plusieurs passages cellules/noeuds/cellules. Il reste cependant clair qu'une amélioration des schémas passe par une dégradation du temps de calcul.

Schéma	CPU time (s)	Ef cacité/ite/noeud (s)
PSI	7272	7
TTGC	6092	6
FCT	12928	12

TAB. 15.5 - *Ef cacité du code pour les trois schémas sur le maillage Tetra2. Les statistisques sont données pour* 0.09 *ms de calcul ($t^+ \approx 30$). La machine cible est une BlueGene/L où 256 processeurs ont été utilisés (soit environ 13500 cellules par processeurs).*

15.5 Conclusion

Le cas de la THI décroissante chargée en particules calculée par Kaufmann *et al.* (2008) a été réinvestiguée à l'aide de deux autres schémas numériques, respectivement le schéma décentré **PSI** et le combiné **PSI-LW-FE** sur des maillages tétrahédriques. Les résultats sont globalement très encourageants, en particulier au niveau de la gestion des gradients de densité de particules, phénomène qu'il est essentiel de correctement capturer dans une chambre de combustion industrielle. Si ce n'est qu'une étude préliminaire (en particulier l'ordre du schéma décentré doit être augmenté) et que les niveaux de ségrégation ne sont pas reproduits, l'introduction du schéma **FCT** permet la capture du second point d'in exion et un comportement pour des temps longs différent des autres schémas.

Chapitre 16

Application à une chambre académique : le banc MERCATO de l ONERA

16.1 Contexte

Les deux chapitres précédents ont présentés et validés trois approches numériques susceptibles d'être utilisés pour la convection de la phase dispersée dans AVBP, tous présentants des points faibles aussi bien que des avantages :

- Les schémas classiques d'AVBP, **LW** et **TTGC**, présentent l'avantage d'être déjà au point dans AVBP et validés dans le cadre des équations de Navier-Stokes. Toutefois, ceux-ci nécessitent l'utilisation de viscosité artificielle, dont les développements nécessaires sont incessants et sont fortement dépendants de la configuration étudiée. Ils ne garantissent pas les propriétés de positivité nécessaires au formalisme Eulérien.
- Les schémas *RDS* possèdent de nombreux avantages : leur positivité ainsi que leur linéarité les rendent robustes. Toutefois, dans la version actuelle codée dans AVBP, leur manque de précision est très limitant même si des voies existent pour augmenter l'ordre de ces schémas [1].
- La méthode FCT permet d'allier les deux schémas, malheureusement en ne conservant pas que les points positifs de chaque méthode. Dans le cas d'un système d'équations, le choix du limiteur est prépondérant et peu évident. On retiendra cependant que s'il existe effectivement un senseur, la méthode permettant de relier les deux schémas d'ordre faible et élevé apparaˆt être mieux posée que l'utilisation d'une viscosité scalaire alliée à un opérateur mal-posé pour les éléments déformés.

On s'intéresse ici à une géométrie plus complexe, le banc MERCATO étudié par l'ONERA au centre du Fauga-Mauzac pour la caractérisation de l'allumage de gouttes dans un foyer aéronautique. Cette configuration a été étudiée expérimentalement par Garcia-Rosa (2008) et numériquement par Lamarque (2007) et Sanjosé *et al.* (2008).

Ce chapitre présente succintement la simulation de l'écoulement non-confiné et non-réactif évaporant dans la chambre MERCATO avec les schémas **TTGC** (Sanjosé *et al.*, 2008) et **FCT**. Le but est d'iden-

[1] En particulier l'utilisation d'éléments P_2 permet l'augmentation de l'ordre spatial. En ce qui concerne l'ordre temporel, l'ajout d'une matrice de masse associée à une intégration temporelle d'ordre supérieure peut s'avérer intéressante bien que l'impact de la matrice de masse sur le schéma PSI se pose : que devient par exemple la positivité ?

tifier les apports réels des nouveaux schémas dans le contexte d'une SGE appliquée à une configuration réelle, diphasique et évaporante.

16.2 Con guration

16.2.1 Con guration de base

La description de la configuration Mercato reprend la thèse de Lamarque (2007). La configuration de base est consituée des composants suivants :

- **Un tube souple** vient alimenter la configuration avec de l'air dont la température est contrôlée en amont. L'air peut être refroidi pour reproduire des conditions de haute altitude ou chauffé.
- L'air venant du exible débouche dans une **chambre de tranquillisation** à section carrée de 100 mm de côté et de 200 mm de long.
- Dans le plénum se trouve **l injecteur**, tenu par des brides et dont la longueur et la largeur maximum sont d'environ 90 mm, obturant ainsi une grande partie de la section de passage de la boˆte (voir Fig. 16.1). L'air sort du plénum en passant par les 12 vannes du **tourbillonneur** qui imposent au uide un très fort mouvement de rotation. L'air passe ensuite par le **diffuseur** qu'on décrira un peu plus loin.
- L'air débite ensuite avec un fort mouvement de rotation dans **la chambre** de section carrée de 130 mm de côté et dont la longueur est de 285 mm. La chambre possède des fenêtres de visualisation en quartz su némométrie laser (LDA, PDP

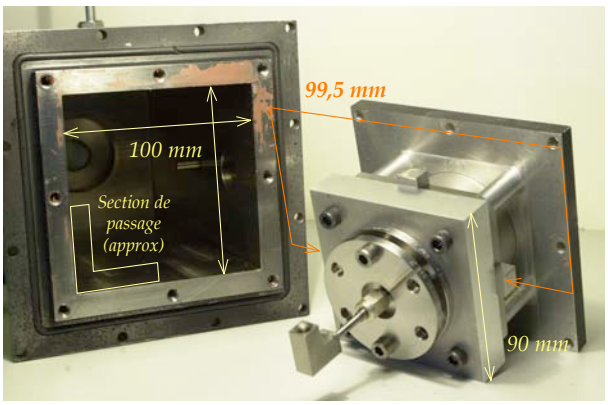


FIG. 16.1 - *Photo du plénum et du tourbillonneur. Celui-ci est xé à une paroi du plénum grâce à un jeu de brides et obstrue une grande partie de la section de passage de l'écoulement. Photo de N. Garc´a Rosa Garcia-Rosa (2008).*

La Fig. 16.2 présente les détails géométriques inclus dans le calcul. A l'exception du petit tube d'amenée du carburant et certaines vis situées dans le plénum qui ont été supprimées afin d'éviter d'avoir de trop petites mailles dans une zone ayant un intérêt limité, tous les détails ont été gardés. Le plénum a été conservé en particulier à cause de sa grande in uence acoustique sur le reste de l'écoulement (Lartigue, 2004). La difficulté majeur est que l'atomiseur se trouve au centre du domaine de calcul (voir la présentation des résultats de la simulation diphasique).

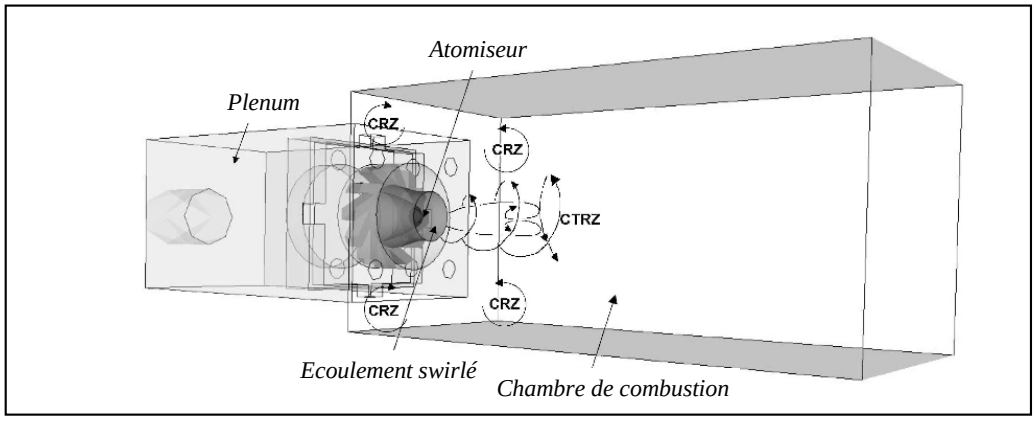


FIG. 16.2 - *Géométrie de la con guration de base du banc MERCATO. Les trois parties principales apparaissent : plénum - tourbillonneur - chambre. On indique en outre les grandes zones de recirculation qui apparaissent classiquement dans une telle con guration. Image de Lamarque (2007).*

16.3 Paramètres numériques

16.3.1 Maillage

La Fig. 16.3 présente le maillage utilisé pour la simulation diphasique du banc MERCATO. Un soucis particulier a été apporté à la discrétisation de l'injecteur ainsi que du tube à amme.

L'atmosphère a été incluse dans le calcul afin de limiter les problèmes numériques en sortie directe de chambre. Les conditions aux limites sont en effet repoussées loin de la sortie et l'évacuation d'un tourbillon ne viendra pas perturber le calcul. En particulier, le maillage est fortement déraffiné dans cette zone afin de détruire toutes les structures turbulente résiduelle qui sortent de la chambre.

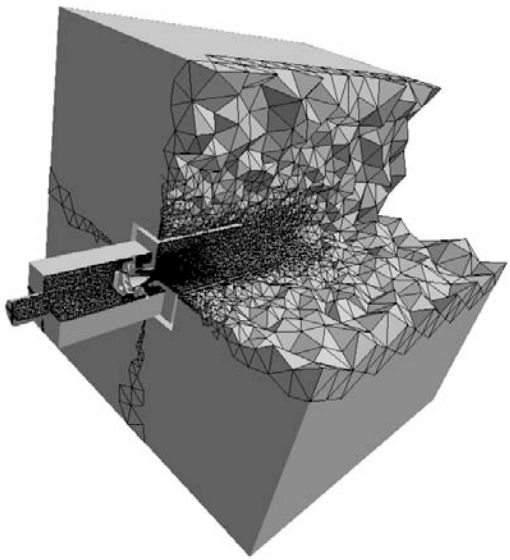


FIG. 16.3 - *Maillage de la con guration A : vue complète. L'atmosphère est beaucoup moins raf née que le reste de la con guration. (Crédits : N. Lamarque) Lamarque (2007).*

16.3.2 Conditions aux limites

La simulation correspond à un cas évaporant. L'air est en effet initialement pré-chauffé à 463 K. Celui-ci est injecté dans le plénum ainsi qu'en "entrée" d'atmosphère afin d'imposer un léger co-courant d'air censé reproduire l'effet d'entraînement créé par la chambre. Ces entrées correspondent à des conditions aux limites de type NSCBC (Poinsot & Lele, 1992) avec débit et température statique imposés dans le plénum et vitesse et température imposées pour le co-courant. Le reste est constitué de murs adiabatiques non-glissants.

Les différentes conditions aux limites sont résumées par le Tab. 16.1.

Paramètres	**Choix / Valeurs**
Noeuds N_h	920769
Cellules N_K	3610450
Volume minimal (m^3)	3.2×10^{-12}
Pas de temps (s)	1.7×10^{-7}
Entrée du plénum	Entrée Caractéristique à débit imposé (approche temporelle) $m = 15\ g\ \ s$ $T = 463K$ *mélange : air* $(N_2\ \ O_2)$
Entrée du cocourant	Entrée Caractéristique avec vitesse imposée (approche temporelle) $u_z = 0.5\ m\ \ s$ $T = 463K$ *mélange : air* $(N_2\ \ O_2)$
Sortie	Sortie NSCBC avec pression imposée (approche spatiale) $p = 101300Pa$
Parois	Murs adiabatiques avec lois de paroi
Limites de l atmosphère	Murs adiabatiques glissants

TAB. 16.1 - *Paramètres principaux du calcul. Phase gazeuse.*

En ce qui concerne les conditions aux limites liquides, il n'existe pas de méthodes dans AVBP permettant de simuler l'atomisation des jets liquides comme le Front-tracking ou la Level-Set (Tanguy, 2004; Couderc, 2007). Ce type de simulation a par ailleurs été effectué sur des configurations simples et non dans des géométries complexes telles que le banc MERCATO. La méthode d'injection de liquide a donc été simplifiée. Les phénomènes d'atomisation primaire et secondaire étant relativement limité dans l'espace -de l'ordre de quelques milimètres (Lefebvre, 1999)-, il a donc été décidé d'injecter le liquide en aval de cette zone en prenant en compte l'entraînement d'air par le spray. La méthode d'injection a été décrite par Lavedrine (2008).

Les Tabx. 16.2 et 16.3 résument les conditions aux limites pour les variables liquides.

Paramètres	Valeurs
Vitesse débitante moyenne	20m s
Fraction volumique moyenne	$2,644.10^{-3}$
Diamètre des gouttes	60 m
Densité de gouttes	$7,89.10^{10} m^{-3}$

TAB. 16.2 - *Conditions limites pour la phase dispersée au niveau de l'atomiseur*

Paramètres	Choix / Valeurs
Injection	Entrée Dirichlet avec $_p, \vec{u}_p, T_p, n_p$ imposées $m_p = 1,0\ g\ \ s$ $T_p = 300K$
Sortie	Aucune grandeur imposée
Parois	Murs glissants (vitesse normale nulle)

TAB. 16.3 - *Conditions limites pour la phase dispersée dans le calcul diphasique évaporant.*

16.3.3 Paramètres numériques

Deux simulations sont comparées :
- la première utilise le schéma TTGC pour les deux phases liquide et gazeuse avec de la viscosité artificielle et a été réalisée par Sanjosé *et al.* (2008),
- la seconde combine le schéma Lax-Wendroff pour la phase gazeuse et FCT PSI-LWFE pour la phase liquide. Une viscosité artificielle est utilisée pour le schéma bas-ordre de manière locale.

16.4 Résultats moyens

On s'intéresse tout d'abord à comparer les résultats moyens obtenus avec les schémas A et B (cf Fig. 16.3.3) aux mesures expérimentales (LDA) de l'ONERA. La comparaison avec l'expérience n'est pas directe. En effet, les deux calculs sont monodisperses[2]. Le choix a été de privilégier naturellement le diamètre dont la classe de goutte est la plus représentative dans l'expérience. Il n'y a pas ainsi l'effet des plus grosses gouttes sur le gaz ou à l'inverse, le comportement traceur des plus petites.

La Fig. 16.5 représente des profils de vitesse liquide axiale pour différentes abscisses données par la Fig. 16.4 comparés aux mesures LDA expérimentales obtenues par Garcia-Rosa (2008)[3]. Globalement, les profils moyens de vitesse donnés par les deux schémas sont similaires dans la chambre avec une ouverture de jet différente des mesures expérimentales pour les abscisses à 26 et 56 mm. Ces différences peuvent en partie s'expliquer par l'injection monodispersée en entrée. Effectivement, ces deux dernières abscisses correspondent à la position de la zone de recirculation centrale et l'impact de la taille des gouttes est forte dans cette zone comme l'a montré Lavedrine (2008) dans une autre configuration. On note toutefois des différences entre les schémas à 0 mm avec des niveaux de vitesses différents. Avec

[2]Le diamètre d'une goutte peut varier d'une cellule à l'autre mais pas au sein du même élément.

[3]La vitesse moyennée correspond à la moyenne des vitesses de gouttes mesurées en un point, quelque soit la taille de la goutte dont le passage est enregistré.

Paramètres	**Choix / Valeurs**
Schéma de convection A	TTGC *cell-vertex*
Modèle de viscosité arti cielle (gaz)	Modèle de Colin (2000)
	$^{(2)} = 0.1,\ ^{(4)} = 0.05$
Modèle de viscosité arti cielle (liquide)	Modèle de Riber (2007)
	$_p^{(2)} = 0.1,\ _p^{(4)} = 0.05$
Schéma de convection B	LW *cell-vertex* sur le gaz
	FCT PSI-LW *éléments nis* sur le liquide
Modèle de viscosité arti cielle (gaz)	Modèle de Colin (2000)
	$^{(2)} = 0.1,\ ^{(4)} = 0.05$
Modèle de viscosité arti cielle (liquide)	Modèle de Riber (2007)
	$_p^{(2)} = 0.005,\ _p^{(4)} = 0$
Schéma de diffusion	Opérateur 2
Modèle de sous-maille (gaz)	Smagorinsky
	$C_S = 0.18$
Modèle de sous-maille (liquide)	Yoshizawa
	$C_{p,Y} = 0.116$ et $C_{p,S} = 0.16$

TAB. 16.4 - *Paramètres numériques du calcul monophasique sur la con guration A*

le schéma B, le profil imposé en entrée est retrouvé tandis qu'on note une diffusion et une ouverture différentes avec le schéma A.

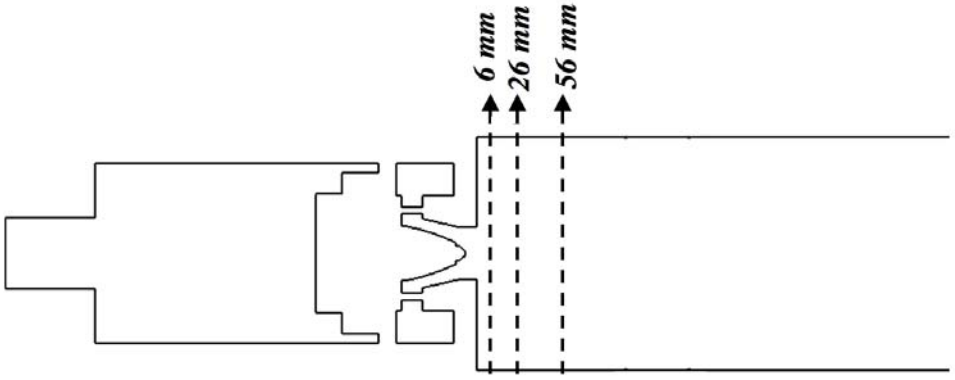


FIG. 16.4 - *Position des différentes coupes. La coupe* 0 *mm n'est pas représentée, elle correspond à l'abscisse du fond de chambre.*

La différence la plus agrante entre les deux simulations est montrée Fig. 16.6 avec la comparaison des profils de fraction volumique de liquide. Les niveaux sont sensiblement différents en particulier en entrée de chambre où le profil de $_l$ injecté est retrouvé par le schéma B tandis qu'il est fortement diffusé par le schéma A. La meilleure gestion des gradients avec la méthode FCT est ainsi soulignée par ces résultats. On note une ouverture différentes des jets entre les deux simulations qui s'expliquent par l'utilisation d'un schéma de convection différent pour la partie gazeuse (LW contre TTGC).

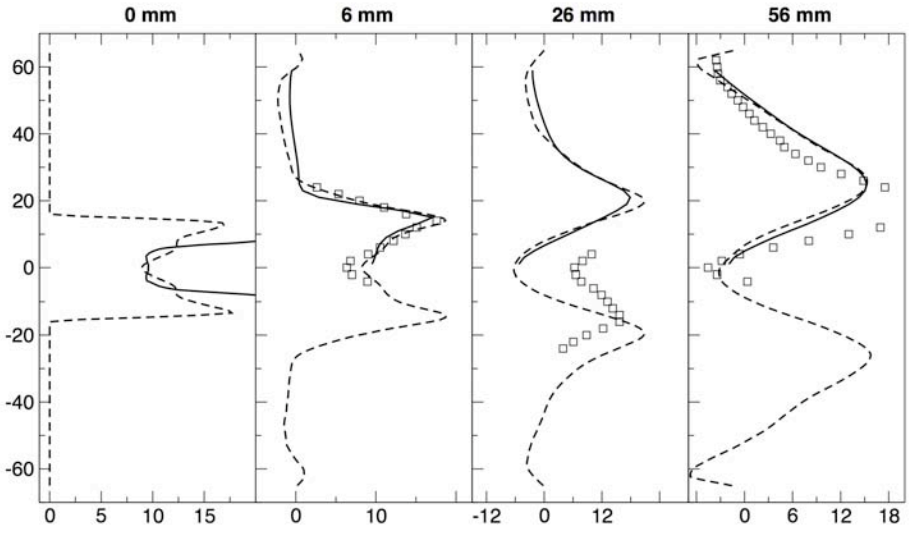


FIG. 16.5 - *Pro ls de vitesse liquide axiale [m.s^{-1}] à différentes abscisses en fonction de Y [mm]. □ : Expérience, −− : Schéma A et − : Schéma B.*

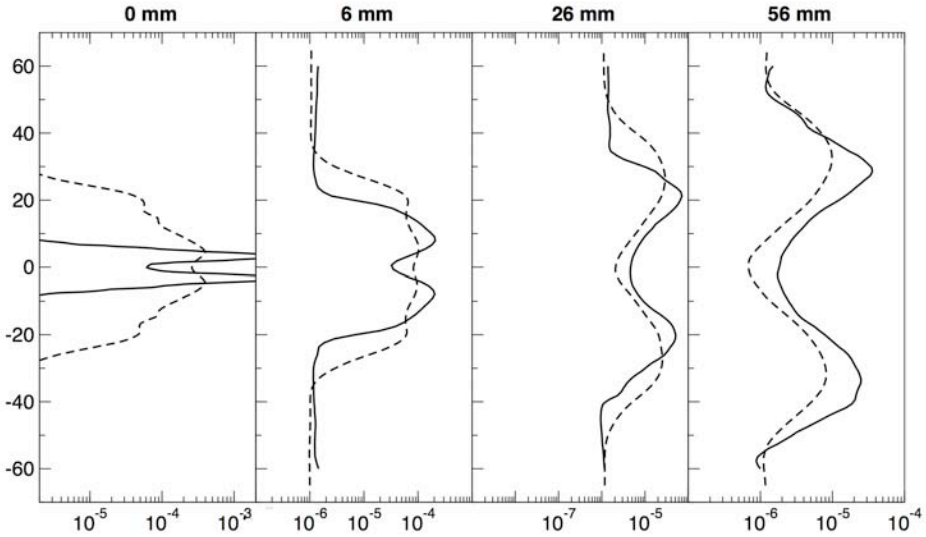


FIG. 16.6 - *Pro ls de fraction volumique de liquide à différentes abscisses. −− : Schéma A et − : Schéma B.*

Le calcul réalisé avec le schéma B (combinaison LW sur le gaz et FCT PSI-LW *éléments nis* pour la partie dispersée) n'a pas été prolongée suffisament longtemps pour obtenir une bonne convergence des déviations standards des différentes variables liquides. Celles-ci ne sont donc pas montrées. On note toutefois un niveau moyen plus faible que pour le schéma A.

16.5 Résultats instantanés

Si la section précédente n'a pas montré de différences agrantes entre les deux simulations sur les profils de vitesse axiale de liquide (Fig. 16.5), il n'en est pas de même pour la distribution instantanée de cette composante comme le montre la Fig. 16.7 pour deux instants différents. Globalement, le schéma B apparaˆt plus diffusif. En effet, il a été choisi de privilégier un limiteur sur les variables primitives ce qui amène une diffusion supplémentaire sur la quantité de mouvement du liquide. De plus, la simulation A utilise un schéma d'ordre et de précision supplémentaire par rapport au schéma Lax-Wendroff.

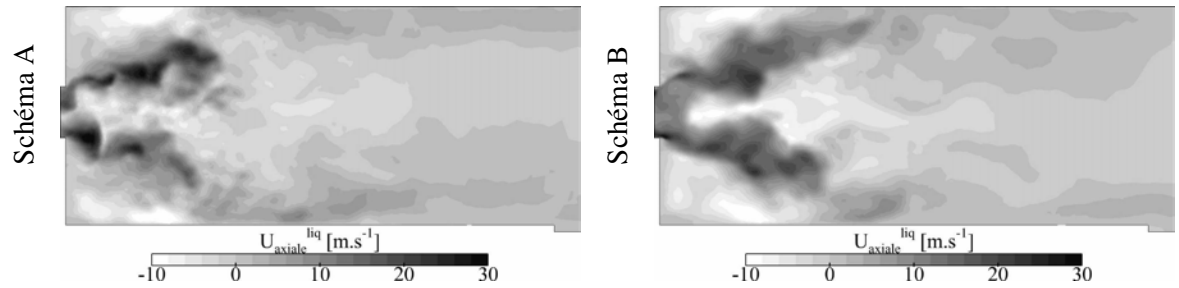


FIG. 16.7 - *Champs instantanés de vitesse de liquide axiale dans le plan médian.*

La Fig. 16.8 montre la distribution instantanée de fraction volumique de liquide pour deux instants différents pour les schémas A et B et la Fig. 16.9 la même distribution comparée aux résultats expérimentaux obtenus par tomographie. Globalement, les deux simulations montrent une accumulation préférentielle des gouttes dans les zones de faible vorticité. Des poches de gouttes sont observées le long des couches de cisaillement issues de l'injecteur (avec un impact supplémentaire du PVC, *Precessing Vortex Core*, qui n'est pas montré ici). L'impact de la zone de recirculation est également visible : les gouttes s'accumulent aux endroits de vitesse axiale négative. On note une forte diffusion de la fraction volumique dans la zone proche injecteur, probablement due à l'impact de la viscosité artificielle sur les gradients de gouttes.

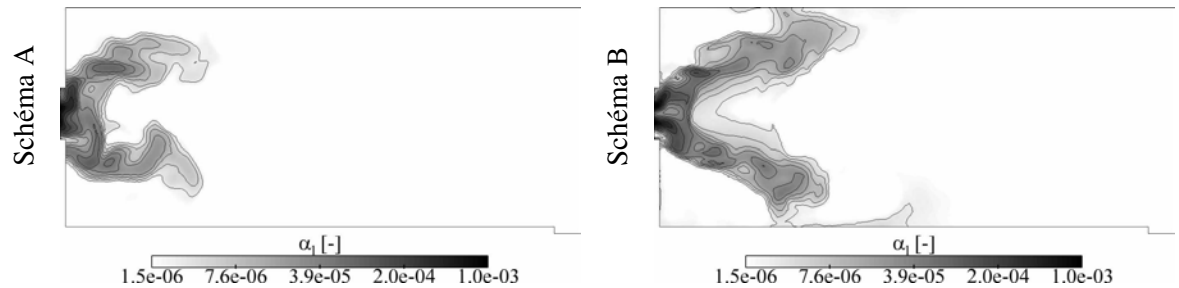


FIG. 16.8 - *Champs instantanés de fraction volumique de liquide dans le plan médian.*

Ces inhomogéné¨tés de distribution de gouttes mènent à la création de poches de vapeur de carburant (couplage par le terme d'évaporation). La figure 16.10 montre la distribution spatiale du taux d'évaporation. Celui-ci diffère fortement entre les deux simulations. Effectivement, la simulation avec le schéma B montre la présence de poche de gouttes très denses. Une fois la saturation atteinte, une proportion non-négligeable de gouttes subsiste et est convectée vers l'aval. Ainsi, les gouttelettes peuvent venir impacter sur les parois inférieure et supérieure de la chambre, phénomène observé dans l'expérience. Au contraire, dans la simulation A, on note que les gradients de fraction volumique de liquide sont plus diffusés. L'évaporation y est ainsi plus forte et les gouttes disparaissent avant d'atteindre la paroi.

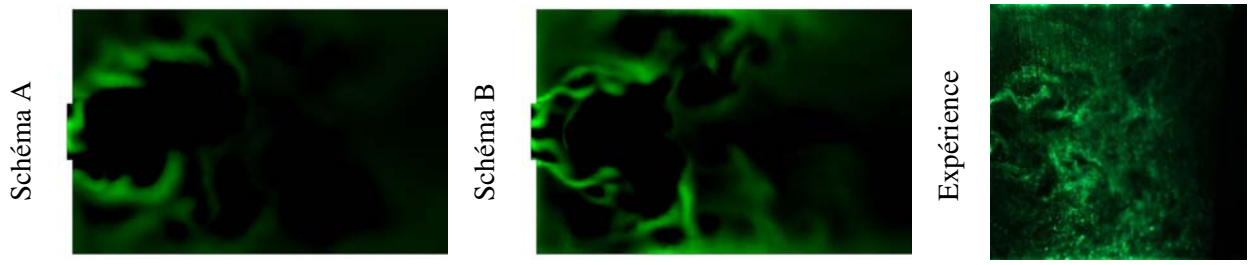


FIG. 16.9 - *Champs instantanés de densité de gouttes dans le plan médian pour des temps différents.*

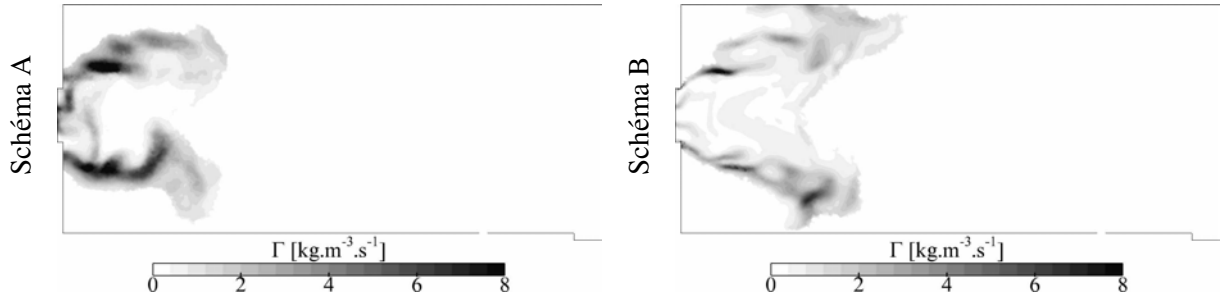


FIG. 16.10 - *Champs instantanés du taux d'évaporation dans le plan médian.*

16.6 Conclusion

Cette partie a permis d'évaluer l'impact du schéma numérique sur une configuration complexe, le banc MERCATO de l'ONERA. Différentes conclusions peuvent être tirées. Tout d'abord, en se concentrant sur une meilleure gestion des gradients de fraction volumique et de densité de goutte, il est possible d'obtenir de très bons résultats avec la méthode FCT. Cette amélioration va in uencer différents termes comme le taux d'évaporation, terme essentiel pour tout calcul réactif. Toutefois, ce choix a un impact sur la vitesse (diffusion supplémentaire liée au choix du limiteur) même si l'impact du schéma d'ordre élevé reste à définir.

Conclusion

Ce travail de recherche s'est basé sur l'étude de l'écoulement turbulent, compressible et réactif dans une configuration complexe comme le "Statoréacteur de Recherche" de l'ONERA. Il s'agissait d'une part de démontrer la capacité de la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) à reproduire les quantités moyennes et instationnaires dans une telle chambre. Le code a du être adapté pour la simulation de telles configurations. Un modèle à capture de choc efficace et peu intrusif a été introduit ainsi que la modèlisation de sous-maille du tenseur de Reynolds pour les écoulements compressibles. Un ensemble de diagnostics a permis d'apporter un nouvel éclairage aux résultats fournis par la SGE.

Le second point consistait à démontrer l'apport essentiel que cette méthode fournit pour la compréhension de l'écoulement dans le statofusée. Pour remplir cet objectif, les différents points durs ont été identifiés et isolés, en particulier l'impact des conditions aux limites, et par là-même, la gestion des réseaux de chocs dans les diffuseurs en amont de la chambre avec des schémas centrés et l'importance du schéma cinétique pour la combustion. Le nouvel éclairage apporté par la SGE a permis de mieux comprendre les phénomènes complexes instationnaires prenant naissance dans la chambre ainsi que les transferts d'énergie entre les différents modes excités dans la configuration. Le point essentiel concerne la stabilisation de la combustion dans une chambre sans accroche- amme. Les simulations ont montré que celle-ci est assurée grâce à un blocage aérodynamique qui permet de moduler le débit entrant dans la chambre. Des ammes similaires à des " ammes triples" peuvent alors remonter l'écoulement le long des quatre structures hélico¨dales de coin et même, si ce blocage le permet, entretenir la combustion dans le dôme. Ce dernier point est très important car il montre que cette zone n'est pas, pour les points de fonctionnement considérés, à l'origine de la stabilisation de la combustion au droit des manches à air.

La dernière partie a permis d'évaluer différentes stratégies numériques pour la simulation Eulérienne de la phase dispersée avec l'approche de Février & Simonin (2000). Une méthode s'est dégagée et son application à l'écoulement non-réactif évaporant dans une géométrie complexe a montré son potentiel.

Les perspectives sur ce travail sont multiples. En ce qui concerne la simulation monophasique du statofusée, l'impact du schéma cinétique est de première importance et il serait intéressant d'appliquer les dernières méthodes développées pour ce cas avec par exemple le recours à la tabulation d'une chimie complexe pour le propane. En effet, si l'évolution de la vitesse de amme laminaire est bien reproduite, il n'en est pas de même pour la température et celle-ci a une conséquence non seulement sur les niveaux de vitesse atteints après combustion mais aussi sur les modes acoustiques. Une étude plus poussée de l'interaction des différentes ondes dans le statofusée (acoustique acoustique, acoustique entropie) serait également intéressante. En particulier, une modélisation 1D pourrait être envisagée en considérant les différentes parties importantes de la chambre : les diffuseurs d'entrée, la zone de combustion et la tuyère de sortie. Finalement, l'application du schéma FCT à la simulation diphasique du "Statoréacteur de Recherche" représente l'étape suivante. La question de la polydispersion se pose alors. En effet, le

spray de liquide se positionne en amont des coudes des manches à air. Or, il a été montré qu'une partie du débit des manches est périodiquement reportée dans le dôme. La prise en compte des trajectoires des gouttes de taille différente est alors très importante. Ce constat peut toutefois être nuancé : la température dans les manches est très supérieure à la température d'évaporation du carburant et il est possible que la majorité du propane se soit évaporé avant d'atteindre le dôme. Il n'en reste pas moins que le recours à des modèles où la distribution de taille de goutte est décrite par plusieurs moments est intéressant (Fox *et al.*, 2008; Fréret *et al.*, 2008).

Bibliographie

ABGRALL, R. 2001 Toward the ultimate conservative scheme : following the quest. *J. Comput. Phys.* **167** (2), 277–315. 263

ABOUSEIF, G.E., KEKLAK, J.A. & TOONG, T.Y. 1984 Ramjet rumble : The low-frequency instability mechanism in coaxial dump combustors. *Combust. Sci. Tech.* **36** (1-2), 83–108. 18, 23

AHN, K. & YOON, Y. 2006 Characterization of side-dump combustor owfield using particle image velocimetry. *J. Comput. Phys.* **22** (3), 527–533. 129

ANGELBERGER, C., VEYNANTE, D., EGOLFOPOULOS, F. & POINSOT, T. 1998 Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed ames. In *Proc. of the Summer Program* , pp. 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 75

BARLOW, R.S., A.N., KARPETIS, J.H., FRANK & J.-Y., CHEN November 2001 Scalar profiles and no formation in laminar opposed- ow partially premixed methane/air ames. *Combustion and Flame* **127**, 2102–2118(17). 255

BARTHELEMY, A. & DUFOUR, E. 2001 Coherent ame models for premixed combustion in practical applications - a review. In *AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, 37th*. 25

BENOIT, L. & NICOUD, F. 2005 Numerical assessment of thermo-acoustic instabilities in gas turbines. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **47** (8-9), 849–855. 95

BERKOOZ, G., HOLMES, P. & LUMLEY, J.L. 1993 The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent ows. *An. Rev. Fluid Mec.* **25**, 539–575. 96

BILGER, R.W., POPE, S.B., BRAY, K.N.C., & DRISCOLL, J. M. 2005 Paradigms in turbulent combustion. *Proc. Combust. Inst.* **30**, 21–42. 72

BILGER, R. W., YIP, B., LONG, M. B. & MASRI, A. R. 1990 An atlas of qedr ame structures. *Combust. Sci. Tech.* **72** (4-6), 137–155. 25

BOILEAU, M. 2007 Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques -th/cfd/07/103. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France - Dynamique des Fluides. 41

BOILEAU, M., PASCAUD, S., RIBER, E., CUENOT, B., GICQUEL, L.Y.M., POINSOT, T. & CAZALENS, M. 2008*a* Investigation of two- uid methods for large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. *Flow, Turb. and Combustion* **80** (3), 291–321. 42, 47, 53

BOILEAU, M., STAFFELBACH, G., CUENOT, B., POINSOT, T. & BÉRAT, C. 2008*b* Les of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame* **154** (1-2), 2–22. 26, 73, 261

BOIVIN, M., SQUIRES, K. D. & SIMONIN, O. 2000 On the prediction of gas-solid ows with two-way coupling using large eddy simulation. *Phys. Fluids* **12** (8), 2080–2090. 41

BORIS, J.P. & BOOK, D.L. 1973 Flux-corrected transport. i. shasta, a uid transport algorithm that works. *J. Comput. Phys.* **38** (11), 38–69. 262

BOUDIER, G., GICQUEL, L. Y. M., POINSOT, T., BISSIÈRES, D. & BÉRAT, C. 2007 Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proc. Combust. Inst.* **31**, 3075–3082. 172

BRAY, K. N. C. & CANT, R. S. 1991 Some applications of kolmogorov's turbulence research in the field of combustion. *Proc. R. Soc. Lond. A . A.N. Kolmogorov Special Issue* **434** (1890), 217–240. 74

BROSSARD, C., GICQUEL, P., BARAT, M. & RISTORI, A. 2002 Caractérisation par vélocimétrie laser de l'écoulement dans un foyer maquette de statoréacteur. In *8ème Congrès Francophone de Vélocimétrie Laser*. ORSAY, France. 127, 129

BUTLER, T. D. & O'ROURKE, P. J. 1977 A numerical method for two-dimensional unsteady reacting ows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pp. 1503 – 1515. The Combustion Institute. 73

CANDEL, S. 1975 Acoustic conservation principles, application to plane and modal propagation in nozzles and diffusers. *J. Sound Vib.* **41**, 207–232. 23

CANDEL, S., VEYNANTE, D., LACAS, F., MAISTRET, E., DARABIHA, N. & POINSOT, T. 1990 Coherent ame model : applications and recent extensions. In *Advances in combustion modeling. Series on advances in mathematics for applied sciences* (ed. B. Ed. Larrouturou), pp. 19–64. World Scientific, Singapore. 25

CATALANO, L. A., PALMA, P. DE, NAPOLITANO, M. & PASCAZIO, G. 1995 Cell-vertex adaptative euler method for cascade ows. *AIAA Journal* **33** (12), 2299–2304. 79

CHAPMAN, S. & COWLING, T. 1970 *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, 3rd edn. Cambridge : Cambridge University Press. 43

CHARLETTE, F., VEYNANTE, D. & MENEVEAU, C. 2002 A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame* **131**, 159–180. 75

CHASSAING, P. 2000 *Turbulence en mécanique des uides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Toulouse, France : Cépaduès-éditions. 24

CHUANG, C. L., CHERNG, D. L., HSIEH, W. H., SETTLES, G. S. & KUO, K. 1989 Study of owfield structure in a simulated solid-propellant ducted rocket. In *AIAA 27thAerospace Sciences Meeting*. 21

CITRINITI, J. H. & GEORGE, W.K. 2000 Recontruction of the global velocity field in the axisymmetric mixing layer utilizing the proper orthogonal decomposition. *J. Fluid Mech.* **418**, 137–166. 96

CLARK, W.H. 1982 Experimental investigation of pressure oscillations in a side dump ramjet combustor. *Journal of Spacecraft and Rockets* **19** (1), 47–53. 18, 22, 23

COLIN, O. 2000 Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs. Phd thesis, INP Toulouse. 296

COLIN, O., DUCROS, F., VEYNANTE, D. & POINSOT, T. 2000 A thickened ame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* **12** (7), 1843–1863. 25, 74, 75, 76

COLIN, O. & RUDGYARD, M. 2000 Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.* **162** (2), 338–371. 83, 84

COOK, A. W. & CABOT, W. H. 2005 Hyperviscosity for shock-turbulence hyperviscosity for shock-turbulence interaactions. *J. Comput. Phys.* **203**, 379–385. 89, 91, 92

COUDERC, F. 2007 Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de uides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace. 294

COUSTEIX, J. 1989 *Turbulence et couche limite*. Cépaduès-éditions. 24

CROCCO, L. 1952 Aspects of combustion instability in liquid propellant rocket motors. part ii. *J. American Rocket Society* **22**, 7–16. 18

CROCCO, L. & CHENG, S. I. 1956 *Theory of combustion instability in liquid propellant rocket motors*, , vol. Agardograph No 8. Butterworths Science. 18

CRUMPTON, P. I. 1995 An efficient cell vertex method for unstructured tetrahedral grids. *Tech. Rep.* 95/19. Oxford University Computing Laboratory. 79, 87

CRUMPTON, P. I., MACKENZIE, J. A. & MORTON, K. W. 1993 Cell vertex algorithms for the compressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.* **109**, 1–15. 79, 80

CULICK, F.E.C 1977 Remarks on entropy production in the one-dimensional approximation to unsteady ow in combustion chambers. *Combust. Sci. Tech.* **15** (3-4), 93–97. 18

CULICK, F.E.C & ROGERS, T. 1983 The response of normal shocks in diffusers. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **21** (10), 1382–1390. 20

CULICK, F. E. C. 1976 Non linear behavior of acoustic waves in combustion chambers. *Astronautica Acta* **3**, 714–757. 18

CULICK, F. E. C. 1987 Combustion instabilities in liquid-fueled propulsion systems- an overview. In *AGARD 72B PEP meeting*. 18

DE CHAISEMARTIN, S. 2009 Modèles eulériens et simulation numérique de la dispersion turbulente de brouillards qui s'évaporent. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 43, 280

DECONINCK, H., SERMEUS, K. & ABGRALL, R. 2000 Status of multidimensional upwind residual distribution schemes and applications in aeronautics. In *AIAA CFD Conference*. Denver, CO. 263

DESJARDIN, P.E. & FRANKEL, S.H. 1999 Two-dimensional large eddy simulation of soot formation in the near-field of a strongly radiating nonpremixed acetylene–air turbulent jet ame. *Combust. Flame* **119** (1-2), 121–132. 255

DOMINGO, P. & VERVISCH, L. 1996 Triple ames and partially premixed combustion in autoignition of non-premixed mixtures. In *26th Symp. (Int.) on Combustion*, pp. 233–240. The Combustion Institute, Pittsburgh. 233

DOMINGO, P., VERVISCH, L., PAYET, S. & HAUGUEL, R. 2005 DNS of a premixed turbulent V-Flame and LES of a ducted ame using a FSD-PDF subgride scale closure with FPI-tabulated chemistry. *Combust. Flame* **143** (4), 566–586. 172

DONEA, J. 1984 Taylor-galerkin method for convective transport problems. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **20** (1), 101–119. 83, 90

DOWLING, A. P. 1995 The calculation of thermoacoustic oscillations. *J. Sound Vib.* **180** (4), 557–581. 111

DUCHAINE, F., MENDEZ, S., NICOUD, F., CORPRON, A., MOUREAU, V. & POINSOT, T. 2008 Conjugate heat transfer with large eddy simulation. application to gas turbine components. In *2ème Colloque INCA*. CORIA, Rouen, France. 256

ELGHOBASHI, S. & TRUESDELL, G. C. 1992 Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* **242**, 655–700. 283

ERICKSON, G.G. & OLFE, D.B. 1978 Growth and decay of perturbations at an interface in a stagnation counter ow. *J. Fluid Mech.* **84** (3), 401–410. 19

FÉVRIER, P. 2000 Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire. Phd thesis, INP Toulouse. 52

FÉVRIER, P. & SIMONIN, O. 2000 Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate ows. part 2 : Application of a two-phase second-moment transport model for prediction of turbulent gas-particle ows. In *Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flows, Lecture Series 2000-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode Saint Genese (Belgium)*. 52, 301

FÉVRIER, P., SIMONIN, O. & SQUIRES, K. 2005 Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent ows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.* **533**, 1–46. 41, 42, 43, 45

FIORINA, B., BARON, R., GICQUEL, O., THÉVENIN, D., CARPENTIER, S. & DARABIHA, N. 2003 Modelling non-adiabatic partially premixed ames using ame-prolongation of ildm. *Combust. Theory and Modelling* **7**, 449–470. 255

FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S. & DARABIHA, N. 2005 Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counter- ow ames using fpi amelet tabulation. *Combust. Flame* **140** (3), 147–160. 172

FOX, R.O., LAURENT, F. & MASSOT, M. 2008 Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework : direct quadrature method of moments and multi- uid method. *J. Comput. Phys.* **227**, 3058. 302

FRÉRET, L., LAURENT, F., DE CHAISEMARTIN, S., KAH, D., FOX, R.O., VEDULA, P., REVEILLON, J., THOMINE, O. & MASSOT, M. 2008 Turbulent combustion of polydisperse evaporating sprays with droplet crossing : Eulerian modeling and validation in the infinite knudsen limit. In *Proc. of the*

Summer Program , pp. 265–276. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 43, 302

FRY, R.S. 2004 A century of ramjet propulsion technology evolution. *J. Prop. Power* **20** (1), 27–58. 15, 16, 17

GARCIA, M. 2009 Développement et validation du formalisme euler-lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles. PhD thesis, INP Toulouse, France. 42

GARCÍA, M., SOMMERER, Y., SCHÖNFELD, T. & POINSOT, T. 2005 Evaluation of Euler/Euler and Euler/Lagrange strategies for large eddy simulations of turbulent reacting ows. In *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion*. 42

GARCIA-ROSA, N. 2008 Phénomènes d'allumage d'un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude. PhD thesis, INP Toulouse. 291, 292, 295

GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. & CABOT, W. 1991 A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* **3** (7), 1760–1765. 65

GIBBS, J.W. 1898 Fourier series. *Nature* **59** (200). 87, 261

GICQUEL, O., DARABIHA, N. & THÉVENIN, D. 2000 Laminar premixed hydrogen/air counter ow ame simulations using ame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proc. Combust. Inst.* **28**, 1901–1908. 172

GIOVANGIGLI, V. 1999 *Multicomponent Flow Modeling*. Birkhäuser. 39

GOKALP, I. 1987 An evaluation of the klimov-williams criterion ((in investigation of turbulent premixed ames)). *Combust. Flame* **67** (2), 111–119. 74

GONSALVES DOS SANTOS, R., LECANU, M., DUCRUIX, S., GICQUEL, O., IACONA, E. & VEYNANTE, D. 2008 Coupled large-eddy simulation of turbulent combustion and radiative heat transfert. *Combust. Flame* **152** (3), 387–400. 255

GREENBERG, J. B., SILVERMAN, I. & TAMBOUR, Y. 1993 On the origin of spray sectional conservation equations. *Combust. Flame* **93**, 90–96. 43

GROHENS, R. 2000 Méthode globale numérique pour la prédiction des performances en combustion des foyers de statoréacteurs. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, Toulouse, France. 24

HALL, M.G. 1984 Cell vertex multigrid solution of the Euler equations for transonic ow past aerofoils. *Tech. Rep.*. Royal Aerospace Establishment. 79

HAM, F., APTE, S. V., IACCARINO, G., WU, X., HERRMANN, M., CONSTANTINESCU, G., MAHESH, K. & MOIN, P. 2003 Unstructured LES of reacting multiphase ows in realistic gas turbine combustors. In *Annual Research Briefs* , pp. 139–160. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 172, 261

HARRJE, D. J. & REARDON, F. H. 1972 Liquid propellant rocket instability. *Tech. Rep.* Report SP-194. NASA. 18

HEDGE, U.G., REUTER, D., DANIEL, B.R. & ZIN, B.T. 1987 Flame driving of longitudinal instabilities in dump type ramjet combustors. *Combust. Sci. Tech.* **55** (4–6), 125–138. 23

HEID, G. & RISTORI, A. 2003 An optical method for local equivalence ratios measurements applied to hydraulic simulation of a ramjet combustion chamber. In *PSFVIP 4*. CHAMONIX, France. 25, 114

HEID, G. & RISTORI, A. 2005 Local fuel concentration measurements in a reserach dual ramjet combustion chamber by gas sampling analysis with carbon dioxide injection at the head end of the combustor. In *ISABE*. Munich, Allemagne. 114

HIRSCH, C. 1988 *Numerical Computation of internal and external ows*. New York : John Wiley. 83, 87, 261

HIRSCH, C. 1990 *Numerical Computation of internal and external ows : Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*, , vol. 2. New York : John Wiley & Sons. 87

HIRSCHFELDER, J. O., CURTISS, C. F. & BIRD, R. B. 1969 *Molecular theory of gases and liquids*. New York : John Wiley & Sons. 39

HSIEH, T., BOGAR, T.J. & COAKLEY, T.J. 1987 Numerical simulation and comparison with experiment for self-excitedoscillations in a diffuser ow. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **25** (7), 936–943. 20

HUANG, YING, WANG, SHANWU & YANG, VIGOR 2006 Systematic analysis of lean-premixed swirl-stabilized combustion. *AIAA Journal* **4** (44), 724–740. 96, 97

HUBBARD, G. L., DENNY, V. E. & MILLS, A. F. 1975 Droplet evaporation : effects of transient and variable properties. *Int. J. Heat and Mass Transfer* **18**, 1003–1008. 53, 57

HUBBARD, M. E. & ROE, P. L. 2000 Compact high-resolution algorithms for time-dependent advection on unstructured grids. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **33** (5), 711–736, nLnum2. 264, 270

HUMPHREY, J.W. 1986 Linear and nonlinear acoustics with nonuniform entropy in combustion chamers. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA. 23

HUSSAIN, F. & JEONG, J. 1995 On the identification of a vortex. *J. Fluid Mech.* **285**, 69–94. 126, 231

IHME, M. 2007 Pollutant formation and noise emission in turbulent non-premixed ames. PhD thesis, Stanford University. 255

IHME, M., MARSDEN, A.L. & PITSCH, H. 2008 Generation of optimal artificial neural networks using a pattern search algorithm : Application to approximation of chemical systems. *Neural Computation* **20** (2), 573–601. 172

JAMES, S., ZHU, J. & ANAND, M. 2006 Large eddy simulation as a design tool for gas turbine combustion systems. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **44**, 674–686. 172

JAMESON, A., SCHMIDT, W. & TURKEL, E. 1981 Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference* (ed. AIAA paper 81-1259). Palo Alto. 84, 87, 261

KAUFMANN, A. 2004 Vers la simulation des grandes échelles en formulation euler-euler des écoulements réactifs diphasiques. Phd thesis, INP Toulouse. 41, 42, 51, 58, 283, 285

KAUFMANN, A., MOREAU, M., SIMONIN, O. & HÉLIE, J. 2008 Comparison between lagrangian and eulerian mesoscopic modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *J. Comput. Phys.* **227** (13), 6448–6472. 261, 283, 290

KAUFMANN, A., NICOUD, F. & POINSOT, T. 2002*a* Flow forcing techniques for numerical simulation of combustion instabilities. *Combust. Flame* **131**, 371–385. 58

KAUFMANN, A., SIMONIN, O., POINSOT, T. & HÉLIE, J. 2002*b* Dynamics and dispersion in Eulerian-Eulerian DNS of two-phase ows. In *Proc. of the Summer Program* , pp. 381–392. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 283

KEE, R. J., RUPLEY, F. M. & MILLER, J. A. 1991 Chemkin-ii : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. *Tech. Rep.*. Sandia National Laboratories. 39

KNUDSEN, E. & PITSCH, H. 2009 A general amelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion. *Combust. Flame* **156** (3), 678–696. 172

KO, T.H. 2005 Three-dimensional fuel–air mixing phenomena in a side-dump combustor : A numerical study. *International Communications in Heat and Mass Transfer* **32** (10), 1360–1374. 25

KODAL, A., WATSON, K. A., ROBERTS, W. L. & LYONS, K. M. 2003 Turbulence filter and pod analysis for velocity fields in lifted ch4/air diffusion ames. *Flow Turb. and Combustion* **70**, 21–41. 96

KOLMOGOROV, A. N. 1941 The local structure of turbulence in incompressible viscous uid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR* **30**, 301. 64

KUO, K. K. 2005 *Principles of Combustion*. New York : John Wiley. 40, 53

KUZMIN, D 2009 Explicit and implicit fem-fct algorithms with ux linearization. *J. Comput. Phys.* **228** (7), 2517–2534. 262

LAMARQUE, N. 2007 Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyer d'hélicoptères. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France. 79, 80, 83, 262, 270, 291, 292, 293

LAMARQUE, N. & POINSOT, T. 2008 Boundary conditions for acoustic eigenmode computations in gas turbine combustion chambers. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **46** (9), 2282–2292. 111

LAMARQUE, N., PORTA, M., NICOUD, F. & POINSOT, T. 2009 On the stability and dissipation of wall boundary conditions for compressible ows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **Submitted**. 96

LARTIGUE, G. 2004 Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente. Phd thesis, INP Toulouse. 292

LAURENT, F. & MASSOT, M. 2001 Multi- uid modelling of laminar polydisperse spray ames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling* **5**, 537–572. 43

LAURENT, F., MASSOT, M. & VILLEDIEU, P. 2004 Eulerian multi- uid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *J. Comput. Phys.* **194** (2), 505–543. 43

LAVEDRINE, J. 2008 Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans des modèles d'injecteur de moteurs aéronautiques - th/cfd/08/47. PhD thesis, Institut Polytechnique National de Toulouse, France. 294, 295

LAX, P. D. & WENDROFF, B. 1960 Systems of conservation laws. *Commun. Pure Appl. Math.* **13**, 217–237. 83

LEFEBVRE, A. H. 1999 *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis. 16, 294

LÉGIER, J.-PH., POINSOT, T. & VEYNANTE, D. 2000 Dynamically thickened ame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the Summer Program* , pp. 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 73, 76, 122, 172

LELE, S. 1992 Compact finite difference schemes with spectral like resolution. *J. Comput. Phys.* **103**, 16–42. 283

LESIEUR, M. 1997 Recent approaches in large-eddy simulations of turbulence. In *New tools in turbulence modelling* (ed. O. Métais & J. Ferziger), pp. 1 – 28. Les Editions de Physique - Springer Verlag. 65

LEYKO, M., NICOUD, F., MOREAU, S. & POINSOT, T. 2008 Numerical and analytical investigation of the indirect combustion noise in a nozzle. In *Proceedings of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA AMES, Stanford University, USA. 19

LINAN, A. & WILLIAMS, F. A. 1993 *Fundamental aspects of combustion*. Oxford University Press. 122

LIOU, T. M. & HWANG, Y. H. 1989 Calculation of owfields in side-inlet ramjet combustors with an algebraic reynolds stress model. *J. Propulsion* **5** (6), 686–691. 25, 125, 129

LOHNER, R., MORGAN, K., PERAIRE, J. & VAHDATI, M. 1987 Finite element ux-corrected transport (fem-fct) for the euler and navier-stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **7** (10), 1093–1109. 262

LU, L., REN, Z., RAMAN, V., POPE, S. B. & PITSCH, H. 2004 LES/FDF/ISAT computations of turbulent ames. In *Proc. of the Summer Program* , pp. 283–294. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 172

MAAS, U. & POPE, S. B. 1992 Simplifying chemical kinetics : intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame* **88**, 239–264. 171

MACKENZIE, J. A. 1991 Cell vertex finite volume methods for the solution of the compressible navier-stokes equations. Phd thesis, Oxford University Computing Laboratory. 79

MAHESH, K., CONSTANTINESCU, G., APTE, S., IACCARINO, G., HAM, F. & MOIN, P. 2002 Progress toward large-eddy simulation of turbulent reacting and non-reacting ows in complex geometries. In *Annual Research Briefs* , pp. 115–142. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 42

MARBLE, F. E. & CANDEL, S. 1977 Acoustic disturbances from gas nonuniformities convected through a nozzle. *J. Sound Vib.* **55**, 225–243. 96, 111

MASHAYEK, F. & PANDYA, R. 2003 Analytical description of particle/droplet-laden turbulent ows. *Prog. Energy Comb. Sci.* **29**, 329–378. 42

MENON, S. & JOU, W.H. 1990 Large-eddy simulations of combustion instability in an axisymmetric ramjet combustor. In *Aerospace Sciences Meeting, 28th*. 25

MEZINE, M., RICCHIUTO, M., ABGRALL, R. & DECONINCK, H. 2003 Monotone and stable residual distribution schemes on prismatic space-time elements for unsteady conservation laws. In *Lectures Series 2003-05* (ed. Von Karman Instute for Fluid Dynamics), , vol. 2003-05. Von Karman Instute for Fluid Dynamics. 265

MIAU, J.J., SUN, D.J. & YAO, L.S. 1989 Streamwise vortices generated by impinging ows in a confined duct. *Experiments in Fluids* **7** (7), 497–500. 19, 20

MIR, A. 1981 Modélisation de chambre de combustion. PhD thesis, Université Paul Sabatier, Toulouse, France. 24

MOIN, P. & APTE, S. V. 2006 Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **44** (4), 698–708. 172

MOIN, P. & KIM, J. 1982 Numerical investigation of turbulent channel ow. *J. Fluid Mech.* **118**, 341–377. 64

MONTAZEL, X., SAMANIEGO, J.-M., LACAS, F., POINSOT, T. & CANDEL, S. 1992 Turbulent combustion modelling in a side dump ramjet combustor. In *AIAA/SAE/ASME/ASEE 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit* (ed. Paper 92-3599). Nashville, TN : AIAA. 21, 25

MOREAU, J. 2003 Interaction entre un jet et un tourbillon compresse. Phd thesis, INP Toulouse. 41

MOREAU, M. 2006 Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique. Phd thesis, INP Toulouse. 71, 283

MOREAU, M., BÉDAT, B. & SIMONIN, O. 2005 A priori testing of subgrid stress models for euler-euler two-phase LES from euler-lagrange simulations of gas-particle turbulent ow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas. 58, 71

MORTON, K.W. 1988 Finite Volume and Finite Element Methods for the Steady Euler Equations of Gas Dynamics. In *The Mathematics of Finite Elements and Applications VI : MAFELAP 1987*, pp. 353–378. J.R. Whiteman. 79, 80

MORTON, K. W., STYNES, M. & SÜLI, E. 1997 Analysis of a cell-vertex finite volume method for convection-diffusion problems. *Math. Comp.* **66** (220), 1389–1406. 80

MOSSA, J.-B. 2005 Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs - th/cfd/05/74. Phd thesis, INP Toulouse. 43, 49

NI, R.-H. 1982 A multiple grid scheme for solving the Euler equations. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **20**, 1565–1571. 79

NICOUD, F., BAGGETT, J., MOIN, P. & CABOT, W. 1999 New approximate boundary conditions for les. part 1 : Finding the answer via an optimal control strategy. In *APS/DFD meeting*, *Bull. Amer. Phys. Soc.*, vol. 44. New York. 65

NICOUD, F., BENOIT, L. & SENSIAU, C. 2007 Acoustic modes in combustors with complex impedances and multidimensional active ames. *AIAA Journal* **45**, 426–441. 95

NICOUD, F. & POINSOT, T. 2005 Thermoacoustic instabilities : should the rayleigh criterion be extended to include entropy changes ? *Combust. Flame* **142**, 153–159. 18

NICOUD, F. & WIECZOREK, K. 2009 About the zero mach number assumption in the calculation of thermoacoustic instabilities. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics* **Submitted**. 96

NOSSEIR, N.S. & HO, C.M. 1982 Dynamics of an impinging jet. part 2. the noise generation. *J. Fluid Mech.* **116**, 379–391. 19

NOSSEIR, N., PELED, U. & HILDBREAND, G. 1987 Pressure field generated by jet-on-jet impingement. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **25** (10), 1312–1317. 19

NOSSEIR, N. S. & BEHAR, S. 1986 Characteristics of jet impingement in a side-dump combustor. *AIAA Journal* pp. 1752–1757. 19, 20, 21, 125

NOTTIN, C. 2000 Large eddy simulation of combustion instabilities. Phd thesis, Ecole Centrale Paris. 95

OH, J.Y., HSIEH, S.Y. & YANG, V. 2005 Interactions between shock and acoustic waves in a supersonic inlet diffuser. *J. Prop. Power* **21** (3), 486–495. 20

VAN OIJEN, J. A., LAMMERS, F. A. & DE GOEY, L. P. H. 2001 Modeling of premixed laminar ames using amelet generated manifolds. *Combust. Sci. Tech.* **127**, 2124–2134. 172

PAISLEY, M.F. 1986 Finite Volume Methods for the Steady Euler Equations. PhD thesis, Oxford University Computing Laboratory. 79

PANDYA, R. & MASHAYEK, F. 2002 Two- uid large-eddy simulation approach for particle-laden turbulent ows. *Int. J. Heat and Mass Transfer* **45**, 4753–4759. 42

PASSOT, T. & POUQUET, A. 1987 Numerical simulation of compressible homogeneous ows in the turbulent regime. *J. Fluid Mech.* **181**, 441–466. 284

PETERS, N. 1986 Laminar amelet concepts in turbulent combustion. In *21st Symp. (Int.) on Combustion*, pp. 1231–1250. The Combustion Institute, Pittsburgh. 74

PETERS, N. 2000 *Turbulent combustion*. Cambridge University Press. 25, 172

PETERS, N. & ROGG, B. 1993 *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Springer Verlag. 122, 171

PITSCH, H. 2006 Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.* **38**, 453–482. 72

PITSCH, H., DESJARDINS, O., BALARAC, G. & IHME, M. 2008 Large-eddy simulation of turbulent reacting ows. *Prog. Aerospace Sci.* **44**, 466–478. 255

POINSOT, T. & LELE, S. 1992 Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous ows. *J. Comput. Phys.* **101** (1), 104–129. 120, 294

POINSOT, T. & VEYNANTE, D. 2005 *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition. 38, 62, 75, 76, 98

POPE, S. B. 2000 *Turbulent ows*. Cambridge University Press. 24

POWELL, A. 1960 Aerodynamic noise and the plane boundary. *J. Acous. Soc. Am.* **32** (8), 982–990. 19

PRIÈRE, C., GICQUEL, L. Y. M., KAUFMANN, A., KREBS, W. & POINSOT, T. 2004 Les of mixing enhancement : LES predictions of mixing enhancement for jets in cross- ows. *J. Turbulence* **5**, 1–30. 261

RADESPIEL, R. 1989 A cell-vertex multigrid method for the navier-stokes equations. *Tech. Rep.* NASA Technical Memorandum 101557. NASA. 79

RAJA SINGH THANGADURAI, G., SUBASH CHANDRAN, B.S., BABU, V. & SUNDARARJAN, T. 2004*a* Numerical investigations of the intake ow characteristics for a ramjet engine with and without heat addition in the combustor. *Defence Science Journal* **54** (1). 25

RAJA SINGH THANGADURAI, G., SUBHASH CHANDRAN, B.S., BABU, V. & SUNDARARAJAN, T. 2004*b* Numerical investigation on effect of inlet dump angle on ramjet combustor performance. In *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 25

RAYLEIGH, L. 1870 On the theory of resonance. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **161**, 77–118. 18

REICHSTADT, S., BERTIER, N., RISTORI, A. & BRUEL, P. 2007 Towards les of mixing processes inside a research ramjet combustor. In *ISABE*, p. 1188. 17, 25, 114, 116, 173, 213, 221, 225, 236, 255

RÉVEILLON, J. & VERVISCH, L. 2005 Analysis of weakly turbulent diluted-spray ames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.* **537**, 317–347. 234

RIBER, E. 2007 Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents. Phd thesis, INP Toulouse. 43, 45, 57, 283, 296

RIBER, E., GARCÍA., M., MOUREAU, V., PITSCH, H., SIMONIN, O. & POINSOT, T. 2006 Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting ows. In *Proc. of the Summer Program* , pp. 197–211. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 41, 43, 261

RIBER, E., MOREAU, M., SIMONIN, O. & CUENOT, B. 2005 Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas ows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. Merseburg, Germany. 49, 71, 72

RIBER, E., MOUREAU, V., GARCIA, M., POINSOT, T. & SIMONIN, O. 2009 Evaluation of numerical strategies for large eddy simulation of particulate two-phase recirculating ows. *J. Comput. Phys.* **228** (2), 539–564. 42, 261

RIBERT, G., GICQUEL, O., DARABIHA, N. & VEYNANTE, D. 2006 Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed ames. *Combust. Flame* **146** (4), 649–664. 172

RICCHIUTO, M., CSIK, A. & DECONINCK, H. 2005 Residual distribution for general time-dependant conservation laws. *J. Comput. Phys.* **209**, 249–289. 263

RISTORI, A., HEID, G., BROSSARD, C. & BRESSON, A. 2003 Characterization of the reacting two-phase ow inside a research ramjet combustor. In *International Conference on Liquid Atomisation and Spray Systems - ICLASS'03*. 261

RISTORI, A., HEID, G., BROSSARD, C. & REICHSTADT, S. 2005 Detailed characterization of the reacting one-phase and two-phase ow inside a research ramjet combustor. In *XVIIth Symposium ISABE*. Munich, Germany. 114, 133

RISTORI, A., HEID, G., COCHET, A. & LAVERGNE, G. 1999 Experimental and numerical study of turbulent ow inside a dual inlet research ducted rocket combustor. In *XIVth Symposium ISABE*. Florence, Italy. 22, 114, 225, 240

ROE, P. L. 1982 Fluctuations and signals - a framework for numerical evolution problems. In *Numerical methods for uid dynamics, Proc. Conf. Reading/U.K*, pp. 219–257. 263

ROE, P. L. 1987 Error estimates for cell-vertex solutions of the compressible euler equations. *Tech. Rep.* ICASE Report No.87-6. NASA Langley Research Center. 79, 80

ROGERS, D. E. & MARBLE, F. E. 1956 A mechanism for high frequency oscillations in ramjet combustors and afterburners. *Jet Propulsion* **26**, 456–462. 18

ROGERS, T. 1980 Ramjet inlet/combustor pulsations study. *Tech. Rep.* NWC TP 6053. Naval Weapon Center, China Lake, USA. 18

RUDGYARD, M. 1993*a* Cell vertex methods for steady inviscid ow. In *Lectures Series 1993-04* (ed. Von Karman Instute for Fluid Dynamics), , vol. 1993-04. Von Karman Instute for Fluid Dynamics. 79, 80

RUDGYARD, M. 1993*b* Multidimensional wave decompositions for the euler equations. In *Lectures Series 1993-04* (ed. Von Karman Instute for Fluid Dynamics), , vol. 1993-04. Von Karman Instute for Fluid Dynamics. 79, 80, 263

RUDGYARD, M. 1995 Integrated preprocessing tools for unstructured parallel cfd applications. *Tech. Rep.* TR/CFD/95/08. CERFACS. 79

RUDGYARD, M., SCHOENFELD, T., STRUIJS, R., AUDEMAR, G. & LEYLAND, P. 1995 A modular approach for computational uid dynamics. *Tech. Rep.* TR/CFD/95/07. CERFACS. 79

RUDGYARD, M. A. 1990 Cell vertex methods for compressible gas ows. Phd thesis, Oxford University Computing Laboratory. 79, 264

RUTZ, R.L. 1981 Modeling of ramjet combustors using simple reactor theory. In *SAE/ASME 17th Joint Propulsion Conference* (ed. AIAA-1981-1429). 24

SAGAUT, P. 1998*a* *Introduction à la simulation des grandes échelles*, mathématiques & applications edn. Springer. 65

SAGAUT, P. 1998*b* *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Berlin : Springer. 61

SAMANIEGO, J.-M., YIP, B., POINSOT, T. & CANDEL, S. 1993 Low-frequency combustion instability mechanism in a side-dump combustor. *Combust. Flame* **94** (4), 363–381. 21

SANJOSÉ, M., LEDERLIN, T., GICQUEL, L., CUENOT, B., PITSCH, H., GARCÌA-ROSA, N., LECOURT, R. & POINSOT, T. 2008 LES of two-phase reacting ows. In *Proc of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 261, 270, 291, 295

SCHILLER, L. & NAUMAN, A. 1935 A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung* **77**, 318–320. 52

SCHMITT, P., POINSOT, T. J., SCHUERMANS, B. & GEIGLE, K. 2007 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**, 17–46. 255

SCHÖNFELD, T. & RUDGYARD, M. 1999 Steady and unsteady ows simulations using the hybrid ow solver avbp. *AIAA Journal* **37** (11), 1378–1385. 79

SELLE, L., LARTIGUE, G., POINSOT, T., KOCH, R., SCHILDMACHER, K.-U., KREBS, W., PRADE, B., KAUFMANN, P. & VEYNANTE, D. 2004 Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame* **137** (4), 489–505. 261

SENSIAU, C. 2008 Simulations numériques des instabilités thermoacoustiques dans les chambres de combustion aéronautiques. PhD thesis, Université de Montpellier II, IMMM. 95, 217

SIDILKOVER, D. & ROE, P.L. 1995 Unification of Some Advection Schemes in Two Dimensions. *Tech. Rep.* ICASE No.95-10. NASA, nLnum2. 267

SIMONIN, O. 1996*a* Combustion and turbulence in two phase ows. Lecture Series 1996-02. Von Karman Institute fo Fluid Dynamics. 42, 58, 283

SIMONIN, O. 1996*b* Combustion and turbulence in two phase ows. Lecture Series 1996-02. von Karman Institute for Fluid Dynamics, eRbib. 261

SIMONIN, O., FEVRIER, P. & LAVIEVILLE, J. 2002 On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent ow : from continuous field to particulate chaos. *J. Turbulence* **3**. 43, 57

SINGER, M. A. & POPE, S. B. 2004*a* Exploiting isat to solve the equations of reacting ow. *Combust. Theory and Modelling* **8** (2), 361 – 383. 172

SINGER, M. A. & POPE, S. B. 2004*b* Exploiting isat to solve the reaction–diffusion equation. *Combust. Theory Modelling* **8**, 361–383. 172

SIRIGNANO, W. A. 1999 *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press. 49

SIRIGNANO, W. A. 2005 Volume averaging for the analysis of turbulent spray ows. *Int. J. Multiphase Flow* **31** (6), 675–705. 42

SIROVICH, L 1987 Turbulence and the dynamics of coherent structures, part 1 : Coherent structures. *Quarterly of Applied Mathematics* **45**, 561–571. 96

SJOBLOM, B. 1989 Full-scale liquid fuel ramjet combustor tests. In *IXth Symposium ISABE*. 20, 21

SMAGORINSKY, J. 1963 General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.* **91**, 99–164. 65, 71

SPALDING, D. B. 1953*a* The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion*, pp. 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh. 53

SPALDING, D. B. 1953*b* Experiments on the burning and extinction of liquid fuel spheres. *Fuel* **32**, 169–185. 53

SPALDING, D. B. 1976 Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pp. 1657–1663. The Combustion Institute. 72

STAFFELBACH, G., GICQUEL, L.Y.M., BOUDIER, G. & POINSOT, T. 2009 Large Eddy Simulation of self excited azimuthal modes in annular combustors. *Proc. of the Combustion Institute, Pittsburgh - USA* **32** (In press). 26, 79

STAFFELBACH, G., GICQUEL, L. & POINSOT, T. 2006 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* (ed. Springer), , vol. 56, pp. 326–336. 26

STRUIJS, R. 1994 A multi-dimensional upwind discretization method fot the euler equations on unstructured grids. Phd thesis, Technical University of Delft. 264, 265, 267

STULL, D. R. & PROPHET, H. 1971 Janaf thermochemical tables, 2nd edition. *Tech. Rep.* NSRDS-NBS 37. US National Bureau of Standards. 36

SÜLI, E. 1989 Finite volume methods on distorted meshes : stability, accuracy, adaptativity. *Tech. Rep.* NA89/6. Oxford University Computing Laboratory. 80

SWANSON, R.C. & RADESPIEL, R. 1991 Cell Centered and Cell Vertex Multigrid Schemes for the Navier-Stokes. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **29**, 697–703. 79, 80

TANGUY, S. 2004 Développement d'une méthode de suive d'interface. Applications aux écoulements diphasiques. PhD thesis, Faculté des sciences de l'Université de Rouen. 294

TENNEKES, H. & LUMLEY, J. L. 1972 *A rst course in turbulence*. Cambridge : M.I.T. Press. 24

TESSÉ, L., DUPOIRIEUX, F., ZAMUNER, B. & TAINE, J. 2002 Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward monte carlo methods and a correlated-k approach. *Int. J. Heat and Mass Transfer* **45**, 2797–2814. 255

TSIEN, H. S. 1952 The transfer functions of rocket nozzles. *J. American Rocket Society* **22** (May-June), 139–143. 111

TURPIN, G. 2001 Simulation numérique de statoréacteurs. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie. Paris VI. 24, 25

VERSAEVEL, P. 1996 Combustion laminaire diphasique : Etude théorique et expérimentale. Phd thesis, Ecole Centrale Paris. 57

VEYNANTE, D., FIORINA, B., DOMINGO, P. & VERVISCH, L. 2008 Using self-similar properties of turbulent premixed ames to downsize chemical tables in high-performance numerical simulations. *Combust. Theory and Modelling* **12** (6), 1055–1088. 172

VEYNANTE, D. & VERVISCH, L. 2002 Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.* **28**, 193 – 266. 72

VEYNANTE, D., VERVISCH, L., POINSOT, T., LIÑÁN, A. & RUETSCH, G. 1994 Triple ame structure and diffusion ame stabilization. In *Proc. of the Summer Program* , pp. 55–73. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 233, 234

VON NEUMANN, J. & RICHTMEYER, R. D. 1950 A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys.* **21**, 231. 87, 89

VREMAN, A.W., ALBRECHT, B.A., VAN OIJEN, J., DE GOEY, P. & BASTIAANS, R. 2008 Premixed and non-premixed generated manifolds in large-eddy simulation of sandia ame d and f. *Combust. Flame* **153** (1), 394–416. 172

WANG, L.-P. & MAXEY, M. R. 1993 Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* **256**, 27–68. 52

VAN DER WEIDE, E. 1998 Compressible Flow Simulation on Unstructured Grids using Multi-dimensional Upwind Schemes. PhD thesis, Technical University of Delft, nLnum2. 265, 266

WILCOX, D.C. 1993 *Turbulence modeling for CFD*. La Canada, CA : DCW Industries, Inc. 24

WILLIAMS, F. A. 1985 *Combustion theory*. Menlo Park, CA : Benjamin Cummings. 73, 172

YEN, R.H. & TZU-HSIANG, K. 1993 Effects of side-inlet angle in a 3d side-dump combustor. *J. Prop. Power* **9** (5). 25

YOSHIZAWA, A. 1986 Statistical theory for compressible turbulent shear ows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids* **29** (7), 2152–2164. 71

YOSHIZAWA, A. & HORIUTI, K. 1985 A statistically-derived subgrid-scale kinetic energy model for the large-eddy simulation of turbulent ows. *J. Phys. Soc. Japan* **54** (8), 2834–2839. 65

YU, K. H., TROUVÉ, A. & DAILY, J. W. 1991 Low-frequency pressure oscillations in a model ramjet combustor. *J. Fluid Mech.* **232**, 47–72. 23

ZALESAK, S.T. 1979 Fully multidimensional ux-corrected transport algorithms for uids. *J. Comput. Phys.* **31** (3), 335–362. 262, 270

Appendix

Annexe A

Adaptation des schémas *RDS* au formalisme Eulérien

La détermination des vecteurs propres à gauche et à droite est difficile avec les variables conservatives. Il est plus aisé de passer par les variables primitives définies par :

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \rho \\ u_p \\ v_p \\ w_p \\ p \\ h_p \\ d_{00} \\ n_p \end{pmatrix}$$

La relation entre les variables primitives et conservatives est obtenue par la transformation suivante :

$$\partial \mathbf{U} = \underline{\mathbf{M}} \partial \mathbf{V} \tag{A.1}$$

avec :

$$\underline{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u_p & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_p & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w_p & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}u_p^2 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ h_p & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.2}$$

Et :

$$\underline{\mathbf{M}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u_p}{\rho_p \rho_p} & \frac{1}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{v_p}{\rho_p \rho_p} & 0 & \frac{1}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{w_p}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{p}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{h_p}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.3}$$

L'Eq. 13.15 peut s'exprimer avec les variables primitives :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \vec{\mathscr{A}}_{\mathbf{V}}(\mathbf{V}) \cdot \vec{\nabla} \mathbf{V} = \mathbf{0} \tag{A.4}$$

La matrice jacobiennes des variables primitives s'écrivent :

$$\underline{\mathbf{A}}_{\mathbf{V}} = \underline{\mathbf{M}}^{-1}\, \underline{\mathbf{A}}\, \underline{\mathbf{M}} \quad , \quad \underline{\mathbf{B}}_{\mathbf{V}} = \underline{\mathbf{M}}^{-1}\, \underline{\mathbf{B}}\, \underline{\mathbf{M}} \qquad \text{et} \quad \underline{\mathbf{C}}_{\mathbf{V}} = \underline{\mathbf{M}}^{-1}\, \underline{\mathbf{C}}\, \underline{\mathbf{M}} \tag{A.5}$$

Ce qui donne :

$$\underline{\mathbf{A}}_{\mathbf{V}} = \begin{pmatrix} u_p & \rho_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3}\frac{\rho_p}{\rho_p \rho_p} & u_p & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3}\rho_p & 0 & 0 & u_p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_p & 0 & 0 \\ 0 & d_{00} & 0 & 0 & 0 & 0 & u_p & 0 \\ 0 & n_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_p \end{pmatrix}$$

$$\underline{\mathbf{B}}_{\mathbf{V}} = \begin{pmatrix} v_p & 0 & \rho_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3}\frac{\rho_p}{\rho_p \rho_p} & 0 & v_p & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}\rho_p & 0 & v_p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{00} & 0 & 0 & 0 & v_p & 0 \\ 0 & 0 & n_p & 0 & 0 & 0 & 0 & v_p \end{pmatrix}$$

$$\underline{\mathbf{C}}_{\mathbf{V}} = \begin{pmatrix} w_p & 0 & 0 & \rho_p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3}\frac{\rho_p}{\rho_p \rho_p} & 0 & 0 & w_p & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}\rho_p & w_p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{00} & 0 & 0 & w_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n_p & 0 & 0 & 0 & w_p \end{pmatrix} \tag{A.6}$$

Le système est hyperbolique et les vecteurs propres à droite s'écrivent :

$$\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{V}} = (\mathbf{r}_{V_n}^{(1)}, \ldots, \mathbf{r}_{V_n}^{(8)}) = \begin{pmatrix} {}_{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & {}_{p\ \ p} & 0 & 0 & {}_{p\ \ p} \\ n_x c_p & 0 & 0 & 0 & 0 & n_y & n_z & -n_x c_p \\ n_y c_p & 0 & 0 & 0 & 0 & -n_x & 0 & -n_y c_p \\ n_z c_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -n_x & -n_z c_p \\ \frac{3}{5}c_p^2 & 0 & 0 & 0 & -\frac{9}{10}c_p^2 & 0 & 0 & \frac{3}{5}c_p^2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_{00} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{00} \\ n_p & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n_p \end{pmatrix} \tag{A.7}$$

Et les vecteurs propres à gauche correspondants :

$$\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{V}} = \begin{pmatrix} \mathbf{l}_{V_n}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{l}_{V_n}^{(8)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{10\ {}_{p\ \ p}} & \frac{n_x}{2c_p} & \frac{n_y}{2c_p} & \frac{n_z}{2c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{3n_p}{5\ {}_{l\ \ l}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{2n_p}{3c_p^2} & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{3d_{00}}{5\ {}_{l\ \ l}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{2d_{00}}{3c_p^2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{5\ {}_{l\ \ l}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_y & -\frac{n_x^2+n_z^2}{n_x} & \frac{n_z n_y}{n_x} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_z & \frac{n_z n_y}{n_x} & -\frac{n_x^2+n_y^2}{n_x} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{10\ {}_{p\ \ p}} & -\frac{n_x}{2c_p} & -\frac{n_y}{2c_p} & -\frac{n_z}{2c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.8}$$

Pour obtenir les vecteurs propres de la matrice $\mathbf{K}$, la transformation (A.1) est utilisée :

$$\mathbf{R}_{\mathbf{U}} = \mathbf{M}\mathbf{R}_{\mathbf{V}} \quad \text{and} \quad \mathbf{L}_{\mathbf{U}} = \mathbf{L}_{\mathbf{V}}\mathbf{M}^{-1}$$

ce qui donne :

$$\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_x}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_y}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_z}{c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2n_p}{3c_p^2} & 0 & 0 & {}_{p\ \ p} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2d_{00}}{3c_p^2} & 0 & {}_{p\ \ p} & 0 \\ -h_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{v-n_y\vec{u}\cdot\vec{n}}{n_x} & n_y & -\frac{n_x^2+n_z^2}{n_x} & \frac{n_y n_z}{n_x} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{w-n_z\vec{u}\cdot\vec{n}}{n_x} & n_z & \frac{n_y n_z}{n_x} & -\frac{n_x^2+n_y^2}{n_x} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{2c_p} & -\frac{n_x}{2c_p} & -\frac{n_y}{2c_p} & -\frac{n_z}{2c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.9}$$

et :

$$\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ u + c_p\, n_x & 0 & 0 & 0 & u & n_y & n_z & u - c_p\, n_x \\ v + c_p\, n_y & 0 & 0 & 0 & v & -n_x & 0 & v - c_p\, n_y \\ w + c_p\, n_z & 0 & 0 & 0 & w & 0 & -n_x & w - c_p\, n_z \\ \frac{2}{3}c_p^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}c_p^2 \\ h_p & 0 & 0 & 1 & h & 0 & 0 & h_p \\ \frac{d_{00}}{p\ \ p} & 0 & \frac{1}{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{d_{00}}{p\ \ p} \\ \frac{n_p}{p\ \ p} & \frac{1}{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{n_p}{p\ \ p} \end{pmatrix} \tag{A.10}$$

La matrice des vecteurs propres $\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}}$ devient singulière si $n_x = 0$. Afin d'éviter ce problème, on choisit de réécrire trois sets de vecteurs propres où soit n_x soit n_y soit n_z apparaˆt au dénominateur. Il suffit par la suite pour chaque noeud de choisir le set de vecteurs propres adéquats (*i.e.* celui où la composante de la normale ayant la plus grande norme apparaˆt au dénominateur). On obtient alors :

$$\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U},\mathbf{n_y}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_x}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_y}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_z}{c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2n_p}{3c_p^2} & 0 & 0 & \frac{}{p\ \ p} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2d_{00}}{3c_p^2} & 0 & \frac{}{p\ \ p} & 0 \\ -h_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u - n_x\vec{u}\cdot\vec{n}}{n_y} & \frac{n_y^2+n_z^2}{n_y} & -n_x & -\frac{n_x n_z}{n_y} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{w - n_z\vec{u}\cdot\vec{n}}{n_x} & \frac{n_x n_z}{n_y} & n_z & -\frac{n_x^2+n_y^2}{n_y} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{2c_p} & -\frac{n_x}{2c_p} & -\frac{n_y}{2c_p} & -\frac{n_z}{2c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.11}$$

Et :

$$\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U},\mathbf{n_y}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ u + c_p\, n_x & 0 & 0 & 0 & u & n_y & 0 & u - c_p\, n_x \\ v + c_p\, n_y & 0 & 0 & 0 & v & -n_x & n_z & v - c_p\, n_y \\ w + c_p\, n_z & 0 & 0 & 0 & w & 0 & -n_y & w - c_p\, n_z \\ \frac{2}{3}c_p^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}c_p^2 \\ h_p & 0 & 0 & 1 & h & 0 & 0 & h_p \\ \frac{d_{00}}{p\ \ p} & 0 & \frac{1}{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{d_{00}}{p\ \ p} \\ \frac{n_p}{p\ \ p} & \frac{1}{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{n_p}{p\ \ p} \end{pmatrix} \tag{A.12}$$

$$\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U},\mathbf{n_z}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_x}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_y}{c_p} & \frac{1}{2}\frac{n_z}{c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2n_p}{3c_p^2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2d_{00}}{3c_p^2} & 0 & & 0 \\ -h_p & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u-n_x\vec{u}\cdot\vec{n}}{n_y} & \frac{n_y^2+n_z^2}{n_y} & -n_x & -\frac{n_x n_z}{n_y} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{w-n_z\vec{u}\cdot\vec{n}}{n_x} & \frac{n_x n_z}{n_y} & n_z & -\frac{n_x^2+n_y^2}{n_y} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\vec{u}\cdot\vec{n}}{2c_p} & -\frac{n_x}{2c_p} & -\frac{n_y}{2c_p} & -\frac{n_z}{2c_p} & \frac{1}{3c_p^2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.13}$$

Et :

$$\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U},\mathbf{n_z}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ u+c_p\,n_x & 0 & 0 & 0 & u & n_y & 0 & u-c_p\,n_x \\ v+c_p\,n_y & 0 & 0 & 0 & v & -n_x & n_z & v-c_p\,n_y \\ w+c_p\,n_z & 0 & 0 & 0 & w & 0 & -n_y & w-c_p\,n_z \\ \frac{2}{3}c_p^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}c_p^2 \\ h_p & 0 & 0 & 1 & h & 0 & 0 & h_p \\ \frac{d_{00}}{p\ \ p} & 0 & \frac{1}{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{d_{00}}{p\ \ p} \\ \frac{n_p}{p\ \ p} & \frac{1}{p\ \ p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{n_p}{p\ \ p} \end{pmatrix} \tag{A.14}$$

Annexe B

Article soumis aux Compte-rendus de mécanique

L'article suivant a été soumis aux Compte-Rendus de Mécanique de l'Académie des Sciences. Il décrit la comparaison de deux simulations aux Grandes Echelles du cas monophasique à richesse 0.75 avec deux codes de calcul, AVBP et CEDRE, le code de l'ONERA. Il a été réalisé dans le cadre d'une collaboration avec l'ONERA et en particulier Nicolas Bertier et Sébastien reichstadt.

Comparison of numerical methods and combustion models for LES of a ramjet configuration

A. Roux [a], S. Reichtadt [b], N .Bertier [b], L.Y.M. Gicquel [a], F. Vuillot [b] and T. Poinsot [a,c].

[a] *CERFACS, 52 avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France*
[b] *ONERA, BP 72, 29 avenue de la division Lecelerc, 92322 Châtillon Cedex, France*
[c] *IMFT, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France*

Received *****; accepted after revision +++++

Presented by

Abstract

Ramjets are very sensitive to instabilities and their numerical predictions can only be addressed adequately by Large Eddy Simulation (LES). With this technique, solvers can be implicit or explicit and handle structured, unstructured or hybrid meshes... Turbulence and combustion models are other sources of differences. The impact of these options is here investigated for the ONERA ramjet burner. To do so, two LES codes developped by ONERA and CERFACS compute one stable operating condition. The computational domain encompasses all three nozzles: two at the air inlets, one at the exit and the fuel alimentation box. Preliminary LES results of the two codes underline the overall robustness of LES. Mean flow features at the various critical sections are reasonably well predicted by both codes. Disagreement mainly appear in the chamber where combustion positions differ pointing to the importance of the combustion and subgrid mixing models. The two LES produce different energy containing motions. With CEDRE, a low frequency dominates while AVBP produces different ranges of low frequencies that can be linked with acoustic modes of the configuration. *To cite this article : A. Roux et al., C. R. Mecanique (2009).*

Résumé

Comparaison de méthodes numériques et de modèles de combustion appliquée à la SGE d'un statofusée. La Simulation aux Grandes Echelles (SGE) est bien adaptée la simulation des statofusées, configurations très sensibles aux instabilités thermoacoustiques. Dans cet article, l'impact de différents paramètres sont étudiés à travers la simulation d'un statofusée étudié expérimentalement par l'ONERA : méthodes numériques, modèles de combustion... Pour ce faire, deux codes SGE développés respectivement par l'ONERA et le CERFACS sont utilisés pour calculer un point de fonctionnement stable. Les résultats préliminaires de ces deux codes soulignent la robustesse des deux SGE. Les caractéristiques moyennes de l'écoulement dans les différentes sections critiques sont raisonnablement bien prévues par les deux codes. Les désaccords apparaissent principalement dans la chambre de combustion où la position des zones réactives diffèrent ce qui souligne l'importance des modèles utilisés. Pour le point de fonctionnement simulé, les deux SGE produisent des contenus énergétiques différents. Avec CEDRE, une basse fréquence domine le spectre tandis qu'AVBP montre toute une gammes de basses fréquences qui peut être liée aux modes acoustiques de la configuration. *Pour citer cet article : A. Roux et al., C. R. Mecanique (2009).*

Key words: Ramjet ; Acoustic ; Combustion ; TFLES ; TPaSR ; numerical methods
Mots-clés : Statofusée ; Acoustique ; Combustion ; TFLES ; TPaSR ; Méthodes numériques

1. Introduction

Recent numerical progresses in Large Eddy Simulation (LES) [1,2,3,4] and developpement of powerful parallel computer (www.top500.org) have allowed simulations of more complexe geometries such as gas turbines [5,6]. The different phenomenon appearing in these configurations such as thermo-acoustic coupling or ignition are well-adressed with the unsteady form of LES.

LES of ramjet has however received less attention although in the early 90's, massive effort coming from the military allowed new designs for such devices. If these configurations are simple in their geometry when no flame holder is used, physical complex phenomen make them hard to simulate : flame stabilization is very complex and strongly influenced by flow structures, wall heat fluxes are high because the flame develops in the vicinity of shear layers near combustor's structure... Two main type of instabilities [7,8,9] can appear in such combustors and essentially due to interactions between combustion, acoustic and turbulence that can lead to non desired operating conditions of the chamber or its destruction. The first type of instability appears at low frequency and is linked with pressure oscillations in the whole device which can alterate air breathing and imperfect combustion. The second instability, at higher frequencies and called "screech", is linked with transverse acoustic activity. Surprisingly, this kind of oscillation appears for good and stable combustion but can lead to the destruction of wall thermic protections.

In 1995, the French National Aerospace Lab ONERA has launched a program named "Research ramjet" to explore the physical phenomena present in such kind of geometry. It also aims at validating numerical codes thanks to extended experimental data. Two experiments are conducted : a first one aims at describing mixing inside the main chamber as well as the main flow structures for the non-reacting flow of the experimental ramjet. This experiment is of first interest because of the strong variation of equivalent ratio in the "dome zone", the downstream zone of the main chamber placed before the air inlet. It has been shown that predicting mixing was hardly possible with Reynolds Average Numerical Simulation (RANS) whereas Large Eddy Simulation method (LES) gives good agreement with the experiment [10,11,12,13]. A second experiment explores reacting flows inside a dump combustor with two opposed lateral air inlet curved at 45°.

This paper describes the use of two LES codes with different numerical methods (from convection scheme to type of integration and combustion model). It is shown that even if the codes are very different, they both show good agreement with the experimental data, underlying the robustness and maturity of this advanced numerical approach.

Email address: anthony.roux@cerfacs.fr (A. Roux).

2. Numerical Tools for Large-Eddy Simulation

The two codes are designed to simulate reactive flows in industrial devices. Nevertheless, they differ in their scopes of application. AVBP is an academic LES tool with main focus on aeronautic or automobile combustion chambers and is largely distributed. CEDRE is primarily a research and industrial RANS tool with main focus on the general field of energetics and propulsion, ranging the full spectrum of aeronautic and aerospace applications (including conception activities for several industrial partners). Its distribution is controlled.They both solve the complete multi-component reactive compressible Navier-Stokes system under conservative formulation, with a finite volume approach on unstructured meshes. They were designed to run on parallel computers and exhibit good scalability properties. Except for the turbulent and combustion modelings, detailed thereafter, the two codes share similar models: perfect gas equation of state, real gas capabilities, heat capacities depending on temperature, heat and diffusion fluxes closed by a basic gradient formulation. However, historically, difference between the two codes lead to complementary characteristics:

– AVBP was conceived directly for LES and the emphasis was put on the accuracy of numerical schemes which is of third order in space and time thanks to the TTGC scheme for convective flux. Moreover, the fact that this scheme is centered allows to remain accurate for high wavenumbers (i.e short wavelengths). The temporal integration is carried out using an explicit scheme. The mesh can be structured, composed of tetrahedrons, or hybrid (tetrahedrons and prisms), and degrees of freedom are located at the cell's nodes (cell-vertex formulation).
– CEDRE was first intended for RANS approaches, then for LES. Being able to have the same code for both approaches rationalizes developments (sharing of code architecture and IHM) and allows to initialize the calculations easily with a RANS solution and above all, to move towards hybrid approaches such as Delayed Detached Eddy Simulation (DDES). The code accepts generalized unstructured meshes (made of general polyhedra) including structured, hybrid and imbedded cartesian grids. Degrees of freedom are located at the center of cells (cell centered). The numerical method is based on a MUSCL (Monotonic Upstream Scheme for Conservations Laws) approach, with Roe-type upwind fluxes. The method is usually second order accurate (third order on uniform mesh) and upwind schemes can easily take into account discontinuities, such as shocks, which allows the code to be used on a wide range of Mach numbers from almost incompressible (using low Mach preconditioning) up to hypersonic. Time integration can be explicit or implicit and proposes an adaptative local time stepping. These numerical properties can be used to run the code in a very robust setting which ease the convergence of complex cases. The implicit time integration allows a large flexibility in the choice of time steps which is virtually not limited by stability conditions while requiring vigilance to stay accurate on most of representative phenomenons. However, when used, implicit approaches significantly reduce the cost of computation.

3. Description of the experimental facility

The dump combustor is depicted on Fig. 1. It is composed of two air inlets beginning with a shocked nozzle. They open into the main combustion chamber with a 100x100 mm^2 rectangular cross section. Burning fuel, gaseous propane, is injected in the head end through the intermediary of a pre-injection chamber by two $11mm$ diameter fuel circular inlets. The combustion chamber is 1261 mm long and opens into a chocked nozzle which has a minimum section of 55,8x100 mm^2.

This configuration has been accurately studied by ONERA [14,15,16,17,18,12]. Particle Doppler Anemometer (PDA), Laser Doppler Velocimetry (LDV) and Particle Imagery Velocity (PIV) measurements provide experimental data for mean and oscillating velocities. Combustion is quantified thanks to Particle Laser

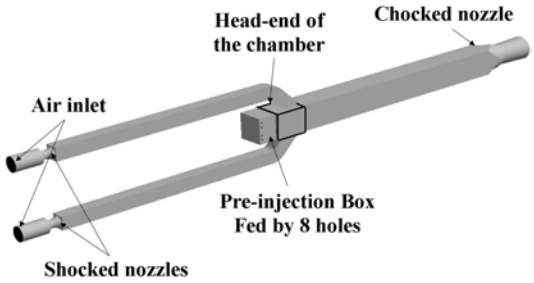


Figure 1. Computational domain and boundary conditions

Induced Fluorescence (PLIF) based on OH or CH emission. High speed camera (up to a resolution of $2000Hz$) gives a view of the flame and microphones characterize pressure oscillations whithin the ramjet.

Several flight conditions have been experimentally evaluated : inlet temperature and mass flow rate change from 520K, 2.9 kg/s to 750 K, 0.9 kg.s^{-1}. A range of equivalent ratios, ϕ (from 0.35 to 1.0), has been investigated. The following work focuses on a high altitude regime with a mass flow rate of 0.9 kg.s^{-1} and an inlet total temperature of 750 K for a global equivalent ratio of 0,75. The associated Reynolds number, based on the inlet duct, is $Re = 3.3$ x 10^5.

4. Numerical parameters

4.1. *Computational domain and boundary conditions*

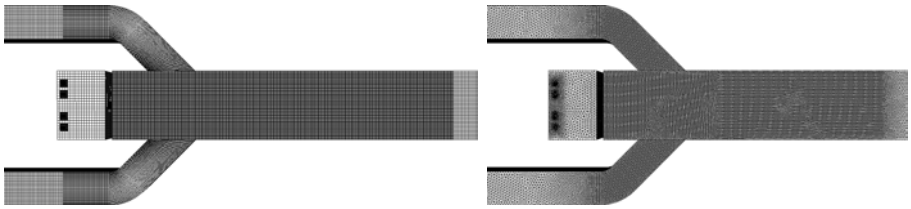
The boundary conditions used in the LES are summarized Table. 1. Inclusion of nozzle at both inlets and outlet leads to proper definition of acoustic motions inside the ramjet. Walls are adiabatic. This last point can be discussed since water cooling is applied during the experiment as flames develop in the vicinity of the walls. However, it is not the aim of this study. As strong velocities are found in the three nozzles, they are taken as slip walls to avoid steep gradients.

Name	CEDRE	AVBP	Imposed Quantities
Air Inlet	Subsonic inlet	Nonreflecting inlet	$\dot{Q}_{air} = 0.9\, kg.s^{-1}$, $T_i = 750\, K$
Fuel Inlet	Subsonic inlet	Non reflecting inlet	$\dot{Q}_{C_3H_8} = 0.044\, kg.s^{-1}$, $T_s = 350\, K$
Outlet	Supersonic outlet	Supersonic outlet	-
Nozzle's walls	Slip adiabatic	Slip adiabatic	-
Other walls	No-slip adiabatic	No-slip adiabatic	-

Table 1
Boundary conditions in the LES simulations.

Mesh used for LES are displayed on Fig.2. The grid used by CEDRE is composed of 3,400,000 hexahedra (around 3,500,000 points) and the AVBP one gathers around 4,500,000 tetrahedra. In the head-end of the combustor, the average edge's size is of 1.6 mm for AVBP and 1 mm for Cedre.

Finally, numerical parameters for each simulation are summarized Table. 2. The subgrid model for turbulence is the classical Smagorinsky closure [19,20] for the both codes. Different combustion models are used and are described in the following section.



a) b)

Figure 2. Comparison of meshes : a) CEDRE, b) AVBP

Type	CEDRE	AVBP
Spatial Integration	MUSCL(2nd-3rd order)	TTGC - 3rd Order
Time Integration	Gear (2nd order implicit)	TTGC - 3rd Order (explicit)
Combustion Model	TPaSR	TFLES
Time Step	4×10^{-6}	2.6×10^{-7}

Table 2
Summary of the numerical method used

4.2. *Combustion model: AVBP*

To handle flame/turbulence interactions in AVBP [21], the Dynamically Thickened Flame model (DTFLES) is used [22]. This model thickens the flame front by a factor F so that it is resolved on the LES grid. To properly reproduce the effect of the subgrid scale interaction between turbulence and chemistry, the so-called efficiency function, E [23] is introduced to recover the turbulent flame speed. The DTFLES model has been applied successfully to several configurations (premixed and partially premixed) and more details can be found in [24,25,13,21].

Gaseous propane (C_3H_8) is injected through the two holes at the beginning of the head end of the chamber.

The AVBP simulation uses a global one-step irreversible chemical scheme taking into account five species: $C_3H_8 + 5\,O_2 \longrightarrow 3\,CO_2 + 4\,H_2$. The rate of heat release for this reaction reads:

$$q = f\left(\phi\right) A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}}\right)^{0.856} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.503} exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \tag{1}$$

with a pre-exponential factor A=3.2916.10^{10} cm^3.mol^{-1}.s^{-1} and an activation energy E$_a$=31,126 cal.mol^{-1}. $f\left(\phi\right)$ allows to correctly predict laminar flame speed for an extended range of equivalence ratio. It reads:

$$f\left(\phi\right) = \frac{1}{2}\left(1 + tanh\left(\frac{0,8-\phi}{1,5}\right)\right) + \frac{2,11}{4}\left(1 + tanh\left(\frac{\phi - 0,11}{0,2}\right)\right)\left(1 + tanh\left(\frac{1,355-\phi}{0,24}\right)\right) \tag{2}$$

Figure 3 shows the comparison between detailed chemistry given by Peters [26] and this simplified one-step scheme for a given range of equivalent ratio. Laminar flame speed is well predicted whereas the adiabatic flame temperature is over-estimated with an error of around 7% at $\phi = 1$.

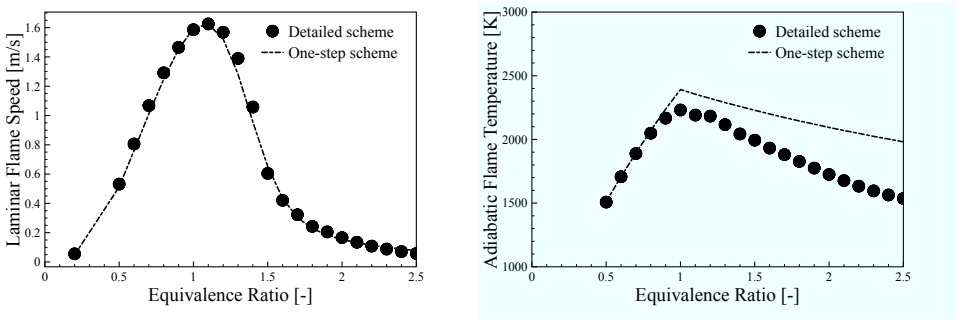


Figure 3. Laminar flame speed (left) and adiabatic flame temperature (right) for the reference and simplified chemistry scheme (AVBP) and as functions of the equivalence ratio

4.3. *Combustion model: Cedre*

In the Transported Partially Stired Reactor approach (TPaSR), one assume that there is no flame front left (high Damkoler). At subgrid scale, pockets of reactants are mixed with a characteristic time linked to turbulence before they burn. This model is thus built on two steps :

– First, a mixing step beetwen reactants based on Eddy Dissipation Concept (EDC) model is devised:

$$C_3H_8 + O_2 \longrightarrow C_3H_8^* + O_2^*$$

and where the "mixed" species denoted by * own the same thermodynamic properties as their initial "un-activated" counter parts. This first step corresponds to a reaction that doesn't produce any heat release.

– Second, a kinetic step involving the "activated" reactants. In this study, a two-step reaction including CO dissociation is used [27]:

$$C_3H_8^* + O_2^* \longrightarrow CO_2 + H_2O$$
$$CO + 0.5\, O_2^* \longleftrightarrow CO_2$$

5. Results

5.1. *Mean flow topology*

Figure 4 depicts the main average structures of the flow inside the combustion chamber as obtained with AVBP. The impingement of the two jets defines two different zones: the "dome zone" in the head-end of the combustor where stands a strong recirculation zone and the zone upstream the air intake. The two crushing jets coalesce into a velocity sheet inside the main ramjet duct. Note also that the two high speed jets are deflected at impact toward the walls creating four corner vortices through which fuel flows from the head-end to the downstream duct.

Figure 5 shows the axial and vertical components of the velocity in the symmetry plane of the combustor (see Fig. 6) and compared to experimental data. Flow predictions and measurements whitin the head-end are similar except for the reattachment point of the two jets. Indeed, quantities of interest differ in the air intakes: the bulk velocity is different. Detachment (where the air intakes curve) appears to have a stronger effect in the AVBP simulation. Finally, flow topology upstream the "dome zone" differs in the two simulations. AVBP predicts a quick opening of the coalesced jet sheet as shown by the experiment

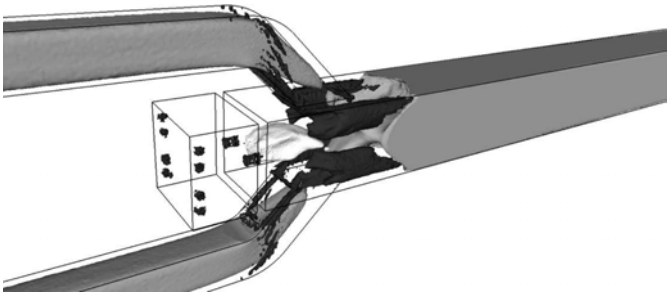


Figure 4. Visualization of the main mean flow structures: "dome" recirculation zone (u=-0.1 U_{bulk}) white iso-surface, axial velocity so-surface at U_{bulk} in gray and Q-criterion iso-surface in black. Avbp results. U_{bulk} stands for the bulk velocity in the air intake

when Cedre shows a more moderate acceleration of the flow in this region. This behaviour is emphasized in Fig. 6 where the evolution of the axial velocity along the symmetry axis of the ramjet is shown. Note that the magnitude of the velocity vector in the head-end of the chamber is over-estimated by both codes. As for the upper part of the combustor, AVBP reproduces the shape of the evolution of the axial velocity contrarily to CEDRE.

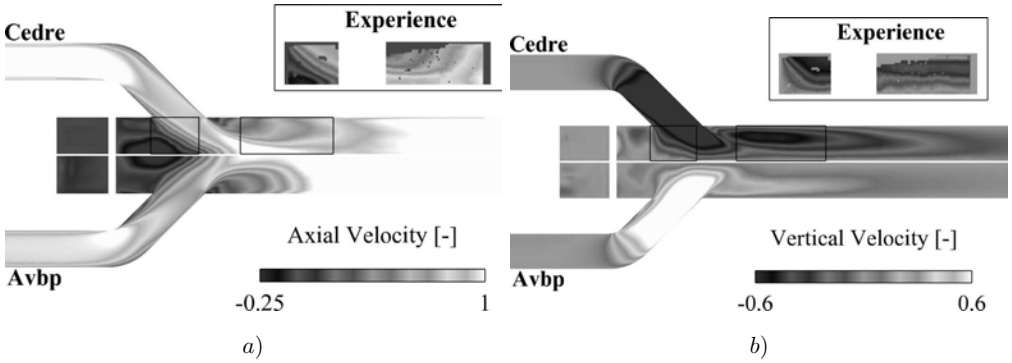
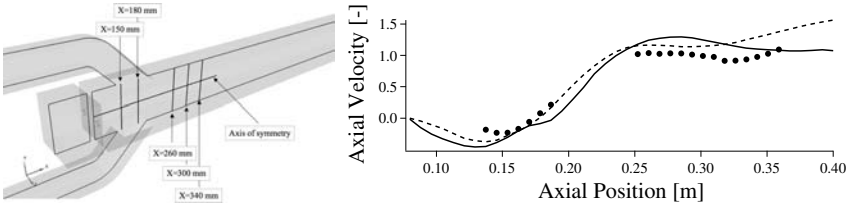


Figure 5. Comparison of axial (a) and vertical (b) component of the velocity vector

Figure 7 show profiles of axial and vertical components of the velocity along the Y-axis as shown in Fig. 6. The AVBP simulation shows better results in the head-end of the chamber whereas CEDRE simulation yields good estimates of the axial velocity far upstream the jet-on-jet impingement. The vertical component of velocity differs only when the jet sheet opens upstream the air inlet. Taken as a whole, comparison against the experiment shows that the two LES codes yield good results in decent agreement with measurements at least for the mean quantities.

Figure 8 shows the mean temperature field as obtained with the two codes. The main dissemblance comes from the head-end of the combustor where reacting zones are identified in the CEDRE simulation and not in the AVBP one. The AVBP result is in concordance with experimental PLIF data that do not show OH emission in this zone.



a) *b*)

Figure 6. Position of the profiles (a) and axial velocity evolution along the symmetry axis (b). •: Experiment; - -: AVBP; −: CEDRE. Values are non-dimensionalized by the bulk velocity in the air intake

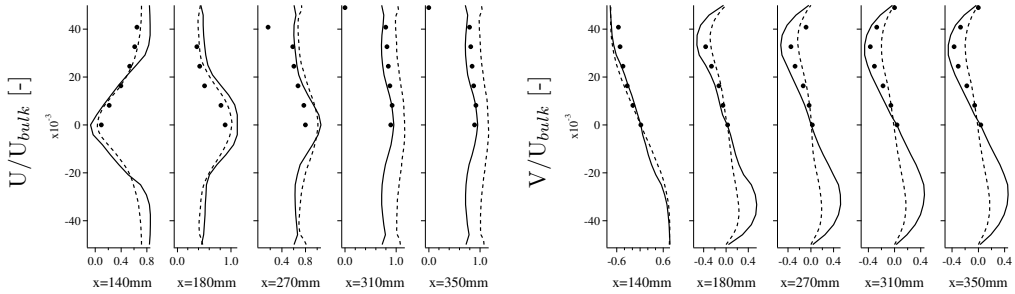
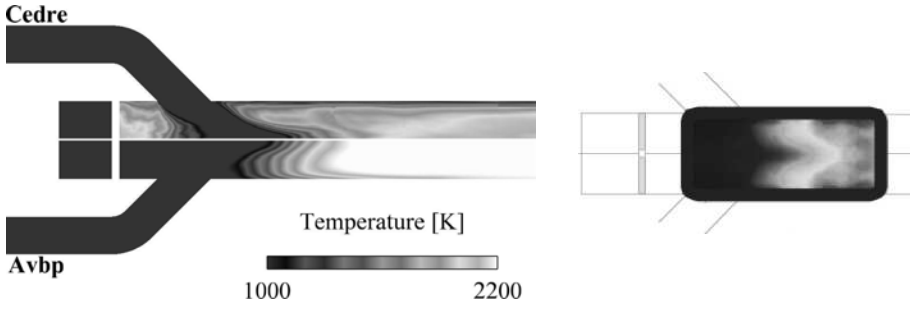


Figure 7. Axial (left) and vertical (right) component of velocity vector along the Y-axis (length in m). •: Experiment; - -: AVBP; −: CEDRE. Values are non-dimensionalized by the bulk velocity U_{bulk} in the air intake



a) *b*)

Figure 8. Comparison of (a) the mean temperature field in the Z=0 mm plane and (b) the mean reacting zone from the experiment

5.2. *Instantaneous results*

To begin the analysis of the unsteady motion in the ramjet, Fourier Transforms (FT) of the pressure signal (obtained for a probe placed 100 mm and 300 mm upstream the two air inlets) are displayed Fig 10. The duration of the signal for the two simulations is 56 ms yielding a frequency resolution of 18 Hz. Different peaks are visible in the experiment (see Table 3): around 120 Hz (Mode 1); 240 Hz (Mode

2) identified as a harmonic of the first frequency; a larger one between 300 and 360 Hz (Mode 3) and the last one at 950 Hz (Mode 4). CEDRE predictions exhibit one dominating frequency near Mode 1. Signals coming from the AVBP simulation is more disturbed and shows oscillations near the frequencies found experimentally.

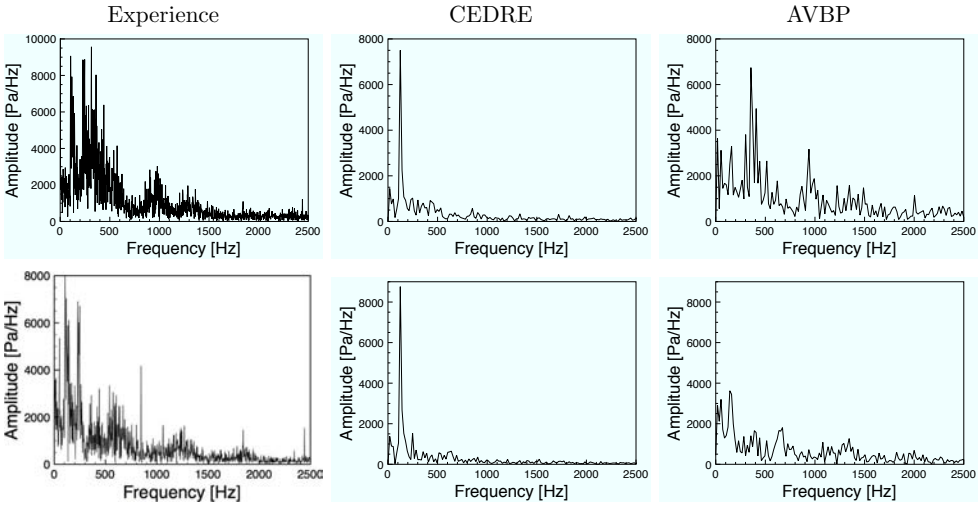


Figure 9. Fourier transform of the pressure signal 100 mm (top) and 300 mm (bottom) upstream the air inlet.

Mode	Frequency	Exp.	CEDRE	AVBP
1	120 Hz	Yes	Yes	Yes
2	240 Hz	Yes	Yes	Yes
3	300-360 Hz	Yes	No	Yes
4	950 Hz	Yes	No	Yes

Table 3
Main frequencies detected in the LES simulations compared to the experimental data

The difference between the two simulations can be explained by the different shape of the temperature distribution inside the combustor. Figure 10 shows spectral maps of the pressure signal extracted from the simulation using AVBP. For such maps, all the points of the configuration are treated based on LES snapshots. The associated frequency resolution is 11 Hz. Mode 3 appears to be a 3/4 wave of the two air intakes and has an influence in the main combustion chamber (mainly in the downstream zone). Mode 4 seems also to have an acoustic nature and concerns the whole geometry. Mode 1 is different from the two latter and its nature is for the moment unclear. Absence of the two identified acoustic modes in the simulation using CEDRE can been explained: the temperature field issued by the hot gazes in the head-end modifies the sound speed in this zone and impacts directly the acoustic mode potentially present in the ramjet.

The main frequency (Mode 3) appearing in the simulation using AVBP leads to a flow blockage (velocity nodes or pressure antinodes) in the end of the air inlet and the dome zone. Pressure fluctuations modulate the mass flow rate inside the head-end of the combustor as depicted by Fig. 11. Two snapshots, displayed

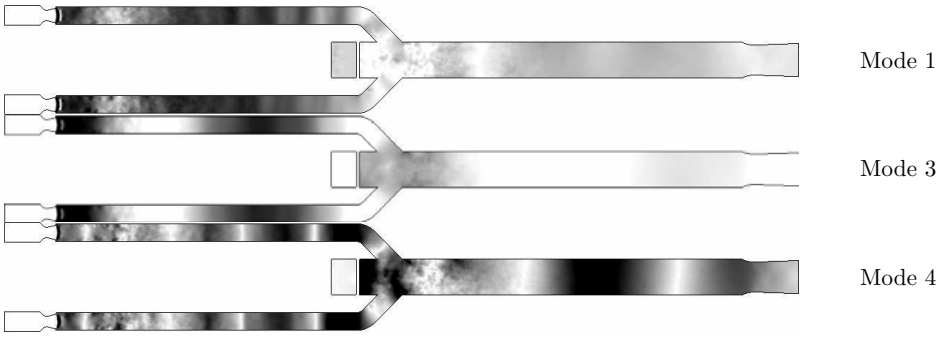


Figure 10. Spectral maps of the pressure signal extracted for each point of the configuration : $|A_{FFT}^{freq} cos\left(\Phi_{FFT}^{freq}\right)|$ (AVBP results).

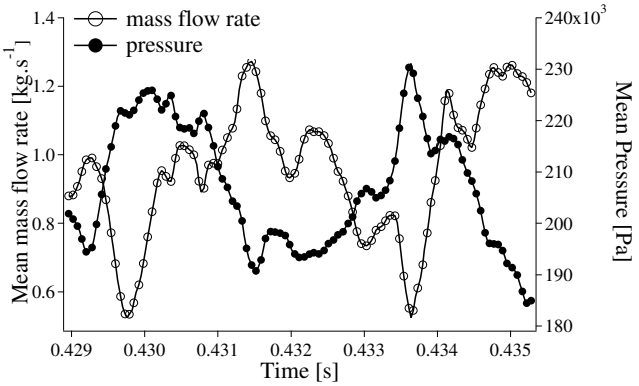
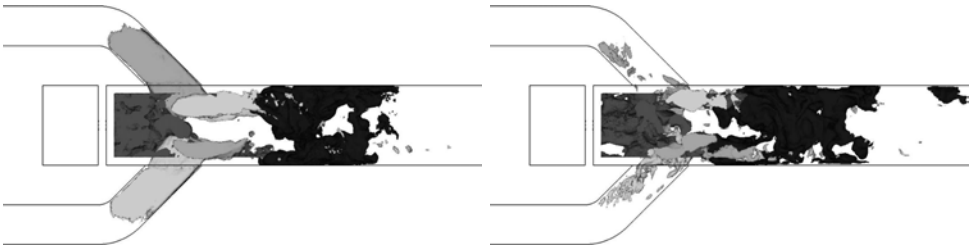


Figure 11. Evolution of mass flow rate and pressure in a plane in the main chamber at the exit of the air inlets. Two periods of mode 3 are displayed.

on Fig. 12, taken within half a period of Mode 3 stress the impact of the pressure oscillation on combustion. The flow blockage has for primary effect to influence the impingement of the two air jets as well as the modulation of the four corner vortices. The fuel alimentation of the upstream dome zone is thus strongly influenced. The left picture emphasizes this phenomenon when the flow blockage disappears: part of the flame is anchored at the interface between the latter coherent structures and the recirculation zone created by the flow blockage. When the velocity is maximum, the dome is free from fresh air. Strong recirculations are created in this area but as the equivalent ratio is too high, combustion is damped. When the flow blockage appears, recirculation zones are released upstream, both in the central part of the combustion chamber and along the corner vortices feeding the flame with fuel. Different combustion regimes are identified. First and as packets of fuel are released upstream, they ignite thanks to diffusion flames at the outskirt part. The topology of the flame along the vortices is different: triple flames are identified allowing a higher turbulent flame velocity.

Flames in the "Research Ramjet" are thus stabilized mainly by the corner vortices. However, modulation of mass flow rate gives a horizontal movement to the flame which is compensated by the packets released at the end of the flow blockage.



a) b)

Figure 12. Instantaneous fields : iso-volume of non-dimensionnalized vertical component of velocity (0.9 in white and -0.9 in light gray), iso-volume of zero axial component of velocity in dark gray and iso-volume of reaction rate at 10^3 $J.mol^{-1}.s^{-1}$ in dark. These views are taken whithin half a period of mode 3.

6. Conclusion

Two Large-Eddy Simulations were performed to simulate the reacting flow field in a ramjet-like combustor. Although the two codes are very differernt numerically, both predictions are in good agreement with the experiment for the mean velocity field. Major differences between the two predictions come from the chemistry and combustion models. Dynamically Thickened Flame for Large-Eddy Simulation model and a chemistry able to simulate the evolution of laminar flame speed for an extended range of equivalent ratios show good agreement with experimental data for the mean reacting zone and the evolution of the axial velocity whithin the dum combustor. The Transported Partially Stired Reactor approach model with chemical scheme of Westbrook&Dryer allowing combustion for high equivalent ratio predicts reacting zones in the head-end of the chamber. These differences strongly impact the energy contained motions of both simulations. For CEDRE, only one frequency arises while four modes co-exist with AVBP. Detailed analyses of AVBP predictions point to acoustics as a driving mechanism in determining the stability of the burner.

Acknowledgements

This research for the simulation with AVBP used resources of the Argonne Leadership Computing Facility at Argonne National Laboratory, which is supported by the Office of Science of the U.S. Department of Energy under contract DE-AC02-06CH11357. Support of the french Délégation Générale pour l'Armement (DGA) is gratefully acknowledged.

References

[1] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.

[2] K. Mahesh, G. Constantinescu, S. Apte, G. Iaccarino, F. Ham, and P. Moin. Progress towards large-eddy simulation of turbulent reacting and non-reacting flows in complex geometries. In *Annual Research Briefs*, pages 115–142. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002. ref lolo.

[3] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for incompressible flows*. Scientific computation series. Springer-Verlag, 2000.

[4] S.B. Pope, Z. Ren, L. Lu, V. Raman, and H. Pitsch. Les/pdf/isat computations of turbulent flames. In *Proc. of the Summer Program*, volume in press, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2004.

[5] M. Boileau, S. Pascaud, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, and T.J. Poinsot. Large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. *Accepted modif. to Flow Turb. and Combustion* , 2007.

[6] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinsot, D. Bissières, and C. Bérat. Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proc. of the Combustion Institute*, 31:3075–3082, 2007.

[7] B. Sjöblom. Full-scale liquid fuel ramjet combustor tests. In *IXth ISABE*, volume 7027, pages 273–281, 1989.

[8] J. M. Samaniego. *Etude des instabilités de combustion dans les statoréacteurs.* PhD thesis, EM2C, 1992.

[9] D.E. Rogers and F.E. Marble. A mechanism for high frequency oscillations in ramjet combustors and afterburners. *Jet Propulsion*, 26:456–462, 1956.

[10] L.Y.M. Gicquel, Y. Sommerer, B. Cuenot, and T. Poinsot. Les and acoustic analysis of turbulent reacting flows: Application to a 3D oscillatory ramjet combustor. In *ASME*, volume Paper AIAA-2006-151, RENO, USA, 2006.

[11] S. Reichstadt. *Etude du mélange et de la combustion monophasique dans un statoréacteur de recherche.* PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour, December, 2007.

[12] Sebastien Reichstadt, Nicolas Bertier, Arnaud Ristori, and Pascal Bruel. Towards les of mixing processes inside a research ramjet combustor. In *ISABE*, page 1188, 2007.

[13] A. Roux, L.Y.M. Gicquel, Y. Sommerer, and T. Poinsot. Large eddy simulation of mean and oscillating flow in side-dump ramjet combustor. *Combust. Flame* , 152(1-2):154–176, 2008.

[14] G. Heid and A. Ristori. An optical method for local equivalence ratios measurements applied to hydraulic simulation of a ramjet combustion chamber. In *PSFVIP 4*, CHAMONIX, France, June 3-5 2003.

[15] G. Heid and A. Ristori. Local fuel concentration measurements in a reserach dual ramjet combustion chamber by gas sampling analysis with carbon dioxide injection at the head end of the combustor. In *ISABE*, Munich, Allemagne, 4-9 septembre 2005.

[16] C. Brossard, P. Gicquel, M. Barat, and A. Ristori. Caractérisation par vélocimétrie laser de l'écoulement dans un foyer maquette de statoréacteur. In *8ème Congrès Francophone de Vélocimétrie Laser*, ORSAY, France, 17-20 septembre 2002.

[17] A. Ristori, G. Heid, A. Cochet, and G. Lavergne. Experimental and numerical study of turbulent flow inside a dual inlet research ducted rocket combustor. In *XIVth Symposium ISABE*, Florence, Italy, 1999.

[18] A. Ristori, G. Heid, C. Brossard, and S. Reichstadt. Detailed characterization of the reacting one-phase and two-phase flow inside a research ramjet combustor. In *XVIIth Symposium ISABE*, Munich, Germany, September 4-9 2005.

[19] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. i: The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3):99–165, 1963.

[20] M. Germano. Turbulence: the filtering approach. *J. Fluid Mech.* , 238:325–336, 1992.

[21] N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptères.* Phd thesis, INP Toulouse, 2007.

[22] J.-Ph. Légier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000*, pages 157–168, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000.

[23] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* , 12(7):1843–1863, 2000.

[24] C. Martin, L. Benoit, Y. Sommerer, F. Nicoud, and T. Poinsot. Les and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal* , 44(4):741–750, 2006.

[25] P. Schmitt, T.J. Poinsot, B. Schuermans, and K. Geigle. 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.* , 570:17–46, 2007.

[26] N. Peters and B. Rogg. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems.* Lecture Notes in Physics. Springer Verlag, Heidelberg, 1993.

[27] C. Westbrook and F. Dryer. Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Tech.* , 27:31–43, 1981.