RÉPUBLIQUE FRANÇAISE
Liberté Égalité Fraternité

Université de Toulouse

Doctorat de l'Université de Toulouse

préparé à Toulouse INP

Méthodes de raffinement de maillage automatique pour la simulations aux grandes échelles d'explosions de gaz.

Thèse présentée et soutenue, le 5 septembre 2024 par

Benjamin VANBERSEL

École doctorale
MEGEP - Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés

Spécialité
Dynamique des fluides

Unité de recherche
CERFACS

Thèse dirigée par
Laurent GICQUEL

Composition du jury
M. Marc BELLENOUE, Président, ISAE-ENSMA
M. Christian TENAUD, Rapporteur, Université Paris-Saclay
M. Laurent BRICTEUX, Rapporteur, Université de Mons
M. Cédric MEHL, Examinateur, IFP Energies nouvelles
Mme Laura GASTALDO, Examinatrice, IRSN
M. Laurent GICQUEL, Directeur de thèse, CERFACS

Membres invités
M. Vincent Blanchetiere, GRTgaz
M. Thomas Jaravel, CERFACS

Résumé

La demande d'énergie ne cesse d'augmenter et est en grande partie obtenue grâce à la combustion, avec des carburants d'origine fossile ou renouvelable. Ces carburants, souvent stockés dans des environnements clos, présentent un danger en cas de fuite. En effet, l'inflammation d'un nuage de gaz pré-mélangé peut entraîner une explosion, provoquant une propagation rapide d'un front de flamme et générant des surpressions dangereuses pour les personnes et les infrastructures. Pour comprendre et prévenir ces explosions, diverses expérimentations sont menées, allant des tests en laboratoire aux simulations à l'échelle industrielle. Toutefois, les conditions extrêmes de température et de pression rendent les diagnostics précis difficiles à obtenir expérimentalement.

La simulation numérique, notamment la simulation aux grandes échelles (LES) permet de compléter ces expérimentations en offrant une meilleure compréhension des phénomènes de combustion et de turbulence. La simulation LES a déjà prouvé son efficacité pour reproduire la dynamique des déflagrations et les surpressions associées dans des domaines de petite taille. Elle permet également des diagnostics précis à chaque point du domaine de calcul. Cependant, les grandes dimensions des installations industrielles posent des défis pour la résolution numérique complète des phénomènes physiques en jeu. La discrétisation homogène de tout le domaine de calcul serait trop coûteuse en termes de temps et de ressources. Ainsi, l'adaptation de maillage, particulièrement l'adaptation dynamique, est utilisée pour affiner la discrétisation dans les zones d'intérêt qui évoluent au fil du calcul. Cette technique permet de réduire la taille des maillages et les coûts de calcul en suivant les phénomènes d'intérêt prédéfinis durant leur propagation.

Les travaux de cette thèse se concentrent sur le développement et la validation d'une méthode de raffinement adaptatif de maillage (AMR) pour les simulations LES des déflagrations, basée sur des critères physiques instantanés jouant un rôle important dans

les explosions. La méthode proposée, nommée « Turbulent Flame Propagation-AMR » (TFP-AMR), reproduit la dynamique transitoire des flammes turbulentes et des structures tourbillonnaires dans l'écoulement et utilise la bibliothèque AMR non structurée kalpaTARU. Elle repose sur des critères dérivés des caractéristiques physiques des déflagrations, limitant la dépendance aux paramètres utilisateur. Un critère de sélection des vortex, issu de la théorie d'interaction flamme/vortex, et un critère spécifique d'adaptation de maillage sont développés pour garantir que les zones d'intérêt demeurent toujours dans une région de maillage raffiné tout au long du processus transitoire. La méthodologie est validée sur des cas élémentaires représentant des composantes fondamentales du problème, tels que la propagation de flamme, la propagation de vortex et l'interaction flamme-vortex.

Enfin, la méthode est appliquée à des configurations de déflagrations, d'abord dans une chambre obstruée semi-confinée, puis dans un canal obstrué entièrement confiné, avec diverses variations paramétriques concernant la géométrie de la chambre et les propriétés du mélange initial. Dans ces configurations, la déflagration peut atteindre des régimes rapides, avec des formations d'ondes de choc en amont du front de flamme. Les comparaisons entre expériences et simulations démontrent que la méthode TFP-AMR obtient des résultats précis à un coût de calcul inférieur par rapport aux simulations de référence maillages statiques, en nécessitant que peu d'ajustement de paramètres, validant ainsi la robustesse et l'efficacité de la méthode pour ce type d'application.

Abstract

The global energy demand continues to rise, and is largely met through combustion, using fossil or renewable fuels. These fuels, often stored in enclosed environments, pose a significant hazard in the event of a leak. The ignition of a premixed gas cloud can lead to an explosion, causing rapid flame front propagation and generating dangerous overpressures that threaten both human life and infrastructure integrity. To understand and prevent these explosions, various experiments are conducted, ranging from laboratory tests to industrial-scale simulations. However, extreme conditions of temperature and pressure make it challenging to obtain accurate diagnostics experimentally.

Numerical simulation, especially Large Eddy Simulation (LES), complements these experiments by providing a better understanding of combustion and turbulence phenomena at stake. LES has already proven effective in replicating the dynamics of deflagrations and the associated overpressures in small domains. It also allows for precise diagnostics at every point within the computational domain. However, the large dimensions of industrial installations raise challenges for a complete numerical resolution of the physical phenomena involved. An homogeneous discretisation of the entire computational domain would be too costly in terms of return time and computational resources. Therefore, mesh adaptation, particularly dynamic adaptation, is used to refine the discretisation in regions of interest that evolve during the calculation. This technique helps reduce mesh size and computational costs by tracking predefined phenomena of interest during their propagation.

This thesis focuses on the development and validation of an adaptive mesh refinement (AMR) method for LES simulations of deflagrations, based on instantaneous physical criteria relevant to explosions. The proposed method, called "Turbulent Flame Propagation-AMR" (TFP-AMR), reproduces the transient dynamics of turbulent flames and vortical

structures in the flow, and relies on the unstructured AMR library kalpaTARU. The method relies on criteria derived from the physical characteristics of deflagrations, minimising reliance on user-dependent parameters. In particular, a vortex selection criterion is derived from flame/vortex interaction theory. A specific mesh adaptation triggering criterion is also developed to ensure that regions of interest remain within a refined mesh zone throughout the transient propagation process.

The methodology is validated on fundamental cases representative of the essential physical bricks of the problem, such as flame propagation, vortex propagation, and flame-vortex interaction. Finally, the method is applied to deflagration configurations. A semi-confined obstructed chamber is first considered, with extensive parametric variations regarding the chamber geometry and the initial mixture properties. A fully confined obstructed channel is then considered, where deflagration can reach high-speed regimes with shock waves forming ahead of the flame front. Comparisons between experimental and simulation results demonstrate that the TFP-AMR method achieves accurate results at a lower computational cost compared to static mesh reference simulations, while requiring minimal parameter adjustments. These application cases validate the method robustness and effectiveness for such applications.

Aux trois femmes de ma vie, Suzie, Zaza et Maquille ♡.

Remerciements

Voilà la dernière partie de la thèse, celle qu'on lit en premier et qui sonne la fin d'une aventure qui a duré quatre ans. Quatre années au cours desquelles j'ai eu la chance de partager le quotidien d'un grand nombre de personnes et d'apprendre énormément à leurs côtés, aussi bien scientifiquement qu'humainement.

Tout d'abord, merci aux personnes, physiques et morales, sans qui ce sujet de thèse n'aurait pas existé. Merci aux membres du projet LEFEX, GRTGaz, Airliquide et TotalEnergies, d'avoir permis le financement de cette thèse, mais aussi par le biais de leurs représentants industriels (Vincent, Antoine et Bernard), d'avoir contribué à offrir des pistes de travail et de réflexion pour permettre d'avancer dans mes travaux.
Merci également à mes encadrants de la première heure, Olivier et Thomas, pour m'avoir fait confiance et de m'avoir laissé une grande liberté tout en assurant un suivi quasi-quotidien pour m'éviter les fausses pistes, le tout pendant ces quatre longues années. Olivier, merci pour avoir pris tout ce temps à relire ces nombreuses présentations, clairement pas toujours très claires, ainsi que pour avoir pris le temps (et avoir eu le courage) de relire les quelques lignes de code que j'ai pu ajouter dans AVBP. Thomas, merci pour avoir eu des idées brillantes qui m'ont permis de ne jamais être bloqué pendant toute cette thèse. Merci également pour avoir relu la quasi-intégralité de la thèse, plusieurs fois, dans le feu de l'action, pour me permettre de rendre un travail abouti dans les temps. Merci également à Quentin et Omar qui les ont rejoints pour vous être investis directement et m'avoir apporté beaucoup de très bonnes idées, notamment sur les présentations et publications. Un merci particulier à Laurent qui est devenu mon directeur de thèse au bout d'un an et qui a souhaité s'impliquer dans la thèse. Sans ton expérience, le discours aurait sûrement été beaucoup moins clair et ce fût toujours un vrai plaisir d'échanger avec toi sur la science autour de la mécanique des fluides en général. Je souhaite également remercier

les membres du jury qui ont accepté d'évaluer mes travaux. Notamment M. Tenaud et M. Bricteux, pour avoir relu ce manuscrit dans un timing très serré, tout en relevant des questions précises et productives, ayant permis d'améliorer la qualité du manuscrit final. Merci également aux autres rapporteurs pour s'être tous déplacés en personnes et pour les nombreuses questions intéressantes qu'ils ont pu poser. Un merci particulier à Cédric Mehl pour sa gentillesse et pour les discussions que nous avons pu avoir pendant ma thèse. Passons maintenant aux membres du CERFACS qui sont essentiels pour qu'une thèse se déroule dans les meilleures conditions. Dans un premier temps, je souhaite remercier les membres de l'équipe ADMIN ; Chantal, Marie, Michelle, Brigitte, Amandine, Philippine et Lydia. C'est un vrai luxe d'avoir une équipe de choc qui vous accueille et vous suit pendant chaque moment important de la thèse. Avoir une RH qui débarque dans votre bureau pour s'assurer que vous prenez les vacances dont vous avez besoin en dit long sur votre bienveillance. Merci également à la plus grande richesse du CERFACS à mes yeux : l'équipe CSG. Vous faites un travail incroyable et êtes de superbes personnes humainement. C'est vraiment une chance de savoir que, peu importe le problème informatique, celui-ci sera réglé dans la journée. Merci également pour les tips et formations que vous avez pu me donner pendant ces années et qui me servent beaucoup aujourd'hui. Merci aux autres seniors avec qui j'ai pu échanger au cours de ces années ; Gab, Kumar, j'ai dû beaucoup vous embêter avec mes bugs et questions sur l'AMR, mais vous m'avez toujours répondu et soutenu, surtout en cette fin de thèse. Merci aussi à Antoine Dauptain pour les formations et pour sa disponibilité pour parler "coding".
Il est maintenant temps de passer à mes ~~collègues~~, ~~camarades~~ amis de thèses. J'ai pu voir pas mal de générations de thésards venir et partir, ce qui m'a laissé la chance de rencontrer un grand nombre de personnes très différentes les unes des autres. Je vais donc procéder dans l'ordre chronologique :

— **La team stagiaire de 2020 :**

J'ai eu la chance d'arriver en septembre 2020, juste avant qu'une grande partie des stagiaires de ce millésime termine leur stage et partent vadrouiller dans la France entière (ou pas). J'ai pu vous retrouver, Clément et Jessica, connaissances d'école, puis collègue, puis amis. Merci de ne pas m'avoir taillé devant les seniors avant mon arrivée et avoir ainsi permis cette aventure. Je n'ai pas eu la chance de vraiment

découvrir les belles personnes que vous êtes avant mon arrivée au CERFACS, mais c'est maintenant chose faite. Merci à Yann, pour tes imitations de dauphin hors normes, merci Victor, merci Clément pour les discussions scientifiques, merci à Doooooooooocteur Villard (j'écris ces remerciements un peu tard) pour ta bonne humeur journalière et pour être une des personnes préférées de Suzie. Continue de travailler, la vie n'est pas toujours une ligne droite, on y retrouve des obstacles qu'il faut éviter pour avancer et arriver le plus vite possible à l'arrivée. Merci aussi Mehdi ; on a passé un bon mois tous les deux, sans les autres déjà partis. Ta culture et ton humour ont toujours mené à des discussions intéressantes, et si certaines personnes doutent de la belle personne que tu es, je les invite à lire les remerciements de cette ref [48].

— **Les meilleures générations de doctorants :**

Par la suite, j'ai pu rencontrer beaucoup de nouvelles personnes, eux aussi enrôlés volontairement (inconsciemment) dans une thèse. Merci au Docteur Mouze, fidèle représentation de Microsoft dans un labo de convertis. Bien que ton rire raisonne, il est aussi largement communicatif et tu as su devenir un élément indissociable d'une bonne journée au CERFACS. Nos discussions autour des souvenirs d'école d'ingé, comme la fois où un TGV est tombé amoureux d'une fusée, ou encore ces histoires de icherb de feu (j'en perds mon français), m'ont permis de passer de vrais bons moments et de décompresser du travail. Merci au Docteur Naess, référent scientifique sur le climat. Tu es la personnification d'Atlas, tu as porté le monde sur tes épaules (en plus de ta thèse) en apportant de l'aide à tous les docteurs dans le besoin (merci pour ces longs moments à m'expliquer VSCode). Si jamais tu cherches un code parrainage Fortuneo, sache que je serai toujours là pour toi. Merci Raphaël, futur Léon Marchand et plus grand cinéphile du labo. Ce fût toujours un plaisir de parler avec toi, mais aussi de faire ces longues parties d'échec, même si mon elo en a pris un coup. Merci P.A, d'avoir pris le relais, je suis content que tu aies (enfin) pu avoir cette thèse ! Merci Alexis, bien qu'on se soit assez peu parlé durant ces années, j'ai toujours apprécié échanger avec toi et je ne te remercierai jamais assez pour avoir prêché la bonne paroles concernant la bière, à d'autres personnes non éclairées. Vu qu'on parle du loup, merci au BHM, M. Gaipl.

Avant toi, je ne connaissais pas d'allemand, maintenant, je connais le meilleur. Tu es une superbe personne avec une personnalité géniale et un humour très similaire au mien. Je te souhaite le meilleur pour la suite de cette thèse. On se revoit vite autour d'une raclette avec Maike ! En parlant d'allemand, merci également à Patrick. Tu aurais pu devenir n°1 si tu n'avais pas essayé de me voler des choses en profitant de ton sourire ravageur. Amuse-toi bien au Japon, tu le mérites. Merci Arthur, autre compagnon d'échecs et de karaoké, aka M. muscles et grand amateur de Pic Saint-Loup. C'était un grand plaisir de partager des moments avec toi au labo et en dehors et de faire la connaissance de Marion. Merci Nath ; il fallait forcément un breton dans le labo (ils sont partout). Heureusement, on a tiré le gros lot, et je ne dis pas ça parce que tu as un chien trop mignon et une copine au top. Merci Alex (pouik), même si ta passion des crevettes et des chenilles peut sembler bizarre. J'espère que ton projet d'alchimiste qui souhaite transformer du bois en alcool qui rend aveugle aboutira. Enfin, merci à tous les autres thésards, avec qui j'ai pu parler de tout et de rien, les midis ou pendant les pauses : Rémi, Marcos, Antony, Jonathan, Victor, Élo, Carlos, Guigui, Alex, Pedro, Yecine, Hector, Laura, Jorrit, Justin et ceux que j'oublie (désolé). Petit rappel à tous, n'oubliez jamais : évitez le TGV, ne l'approchez pas, il est instable et dangereux.

— **La team explosion :**

Même si tous les Hommes naissent libres et égaux, la meilleure partie finie par travailler sur des explosions. Parmi ces personnes, j'ai eu la chance de travailler avec 4 mecs brillants, qui méritent au moins que je m'attarde un peu sur eux :

Éric, le petit dernier arrivé. Le meilleur représentant que l'Andorre aurait pu nous offrir. J'ai énormément apprécié ta présence, ton humour et ta bienveillance tout au long de ces deux dernières années. Merci d'avoir gardé notre moral au top pendant la fin de thèse. Merci pour les randos, les escapes et pour tous les moments qu'on partagera dans le futur.  Tu as perdu. Dernière chose, n'oublie jamais que The Office > Brooklyn 99.

Loïc, fier représentant du Sud-Ouest, avec l'accent et la bonne humeur qui vont avec. Toujours souriant, un gros bosseur et un très chouette mec. Je suis super heureux d'avoir pu partager tous ces moments avec toi ces dernières années. Tu

as des super valeurs, une copine au top, un petit gars bg et une grande carrière devant toi. On a eu la chance d'avoir pu se présenter nos enfants récemment et j'espère qu'on aura l'occasion de se refaire ça le plus souvent possible !

Waaaazaaaaaa le F, el derivator, Francis : quand on s'appelle Francis **A**drian **M**eziat **R**amirez, comment espérer ne pas s'entendre avec toi ? T'es un mec génial, avec des valeurs et un humour exceptionnels. Toujours là pour aider, pour parler, pour lancer la musique de Slack et me laisser prendre 30 secondes de bonheur auditif. Tu es brillant et tu as une facilité pour tout comprendre rapidement que j'admire vraiment. Si on y rajoute ton côté travailleur, on comprend vite pourquoi tout ce que tu fais fini par fonctionner. Comme je l'ai déjà dit, tu es à la racine des meilleurs travaux de cette thèse. Tu as aussi fait partie de mes meilleurs moments passés au labo et en dehors. Il y a beaucoup de choses dont je ne peux pas parler ici, mais sache que tu m'as vraiment marqué et que je n'oublierai jamais tous ces moments passés avec toi ces dernières années. Je suis pressé de trinquer à ta santé (pas à la bière, t'inquiète) dans quelques mois et d'ici là, pas de chicken street, réduis les BPP et je t'en supplie, arrête de demander aux doctorants de regarder un film sur l'aventure d'un pneu télépathe tueur qui se balade dans le désert. Merci pour tout, et merci à Valéria pour la relecture des papiers et pour avoir choyé Suzie.

Bon, il faut bien terminer par le meilleur pour la fin, l'homme aux meilleurs remerciements de thèse [64]. JJ, je t'ai déjà dit tout ce que je pensais de toi, mais je vais l'écrire noir sur blanc cette fois. J'ai eu la chance de me retrouver dans le bureau de la personne la plus cultivée que j'ai jamais connue. S'il te plaît, relève mes fautes dans les remerciements, je sais que c'est un de tes petits plaisirs cachés. Tu as représenté une grande partie de ma motivation pour venir au bureau pendant toutes ces années. Merci pour avoir suivi tous mes délires, avoir répondu à toutes mes questions scientifiques, m'avoir ouvert à tes passions pour la faune, la flore et la stout. Je ne parlerai pas des passages aux urgences, des coups de jumelles vers la surface des lacs, des bouquets de fleurs en 2D, des réveils dans votre appart du capitole, des danses sur les dunes de sables et de la fois où je me suis fait agresser aux arènes. Beaucoup de souvenirs forgés que je n'oublierai pas. Merci pour tout

ce que tu as fait pour moi et pour la personne que tu es. Je te considère comme bien plus qu'un simple ami aujourd'hui.

Voilà pour les personnes que j'ai pu rencontrer pendant cette thèse. Maintenant, je vais pouvoir passer aux personnes qui me supportent depuis (au moins) aussi longtemps. Dans un premier temps, merci à ma partenaire de voyage, de fêtes du vin, team 1996, Clo'. Tout comme ton beau-gosse de mec, tu es bien plus qu'une simple amie pour moi. Merci d'avoir supporté mon humour douteux pendant ces années, merci d'avoir pris soin de Laquille pendant tout ce temps et merci d'être venu voir ma soutenance, ça m'a vraiment touché. Vous êtes, avec JJ et Bagui, les trois plus grandes richesses du Tarn. Merci à Margaux et Clément, le couple goal. Vous avez le cœur sur la main et tous les moments passés avec vous m'ont vraiment aidé à penser à autre chose pendant ces années. Désolé encore pour la peinture, je ferai mieux la prochaine fois, c'est promis. Merci à Rems, Ana, Uno, Cosmo, Lucas (j'ai fait dans l'ordre d'apparition). Vous avez une petite famille parfaite et je suis vraiment heureux de vous avoir comme amis. Vous avez toujours été à l'écoute, apportant de bons conseils et j'ai apprécié tous les moments passés avec vous, du Spritz St-Germain à l'annonce de l'escape. Merci à Au', tata de Susu, pour m'avoir toujours encouragé et avoir pris soin de Mimille. Merci également à Mathilde, pour tous les encouragements et pour avoir permis à Camille d'être là le jour de ma soutenance. Merci à Arthur, Emma et Ulys, pour les balades, le golf et le cheval. Ça a été une vraie chance d'avoir pu vous rencontrer et j'espère pouvoir continuer à vous nourrir de crêpes ces prochaines années. Merci à Aurore, Jacob, Gabin et Marceau. Merci d'être passé nous voir à Toulouse et de nous avoir accueillis pendant les vacances. C'est vraiment agréable de pouvoir souffler un peu et de discuter avec des personnes aussi ouvertes et intelligentes que vous. Merci à Nao (ne pas lire en portugais). Tu as été là dès notre premier jour à Toulouse et tu es toujours là aujourd'hui. Merci pour les balades et pour tes mots justes. Merci à Val et Jas', mes deux amis d'enfance. Ça a été un vrai bonheur de vous avoir pour fêter la thèse et plus globalement pour tous les moments qu'on a partagés. Je suis vraiment fier de ce qu'on est devenus aujourd'hui. Merci à Bods, pour être venus nous voir à Toulouse et pour être venu pour fêter la thèse, ça m'a vraiment fait très plaisir. Merci aussi à mes amis d'école, Lolo et Eddy. C'est vraiment agréable de pouvoir échanger avec d'autres amis thésards dans différents labos.

C'est l'heure de terminer ces remerciements et quoi de mieux que de finir par la famille. Dans un premier temps, j'aimerais remercier mes beaux-parents, Émilie et Sommay (Tod pour les intimes). Cela fait maintenant un peu plus de sept ans que l'on se connait. Après m'être invité clandestinement chez vous, j'ai eu la chance de faire la connaissance de deux vraies belles personnes, une vraie seconde famille. Merci Émilie pour votre soutien sans faille. Toujours optimiste, vous avez été là à chaque moment important de ma vie ces dernières années et je vous en serai toujours reconnaissant. Merci pour m'avoir si bien accueilli, pour les vacances qu'on a pu partager et bravo pour la merveilleuse éducation que vous avez apportée à Camille. Tod, merci beaucoup pour avoir été un deuxième papa pour moi. Merci pour les moments que nous avons partagés ces dernières années. Merci de m'avoir accueilli comme un second fils. J'ai énormément de respect pour vous, suite à ce que vous avez pu vivre par le passé et la belle personne que vous êtes devenus. Merci pour tous les bons plats qui m'ont réconforté pendant toutes ces années et merci de m'avoir fait découvrir le Bò bún.

Merci également Tom, mon deuxième frère, parrain de Susu. Merci pour tous ces moments partagés, pour nous avoir aidé à emménager ici et pour m'avoir encouragé et soutenu ces dernières années.

Merci Filo pour votre gentillesse, pour nos goûters et McDo partagés et pour votre accueil dans la famille.

Merci à No et Annick, pour m'avoir permis de souffler pendant la dernière année de thèse. Merci pour votre accueil, pour tous les repas, les crêpes et surtout pour vos encouragements dans la dernière ligne droite.

Merci à mon frère. Jer', comme j'ai pu le dire le jour de ma soutenance, on n'a pas été les enfants les plus sages, mais on a su grandir et aujourd'hui, je suis très fier de ce que tu es devenu et c'est vraiment une chance d'avoir une personne sur qui compter à n'importe quel moment.

Maman, cette thèse a grande partie été faite pour te rendre fière. Tu as vécu une vie compliquée, à devoir gérer seule deux petits gars turbulents, qu'il fallait ramener dans le bon chemin. Pour cela, tu as dû faire tous les sacrifices, mais je pense que ça a été ta plus grande réussite. Tu as toujours été mon plus gros soutien et je ne te remercierai jamais assez d'avoir forgé la personne que je suis devenu. J'ai toujours été fier de toi et le resterai.

Merci pour tout. Je t'aime fort.

Suzie, merci pour tous les instants qu'on a partagés. Tu es arrivée en cours de thèse et tu m'as apporté tout l'amour nécessaire pour me pousser à me lever chaque matin, sans jamais rien attendre en retour. Merci d'amener des moments de bonheurs dans toutes mes journées.

Camille (ça fait bizarre de t'appeler comme ça), merci d'avoir répondu à ce "Salut", d'avoir pris le temps d'apprendre à me connaître, d'avoir pris le temps d'apprendre à m'aimer et MERCI d'avoir eu le courage de me supporter pendant cette thèse. Je pense que partager la vie d'un thésard, ce n'est jamais simple. Il faut apprendre à appréhender chaque jour de façon différente, à gérer les sautes d'humeur et les emplois du temps instables, les moments moins sympas et à célébrer les réussites. Tu as tout réussi et même bien au-delà. Sans exagérer, rien de tout ça n'aurait été possible sans toi. Tu es la raison qui me pousse à me dépasser, à avancer et tu mérites largement chaque mot écrit dans ce dernier paragraphe. Je garde les plus beaux souvenirs de ma vie avec toi et j'attends de vivre les prochains. Je nous souhaite le meilleur pour les 100 prochaines années et encore une fois : merci. Je t'aime.

Table des matières

Résumé

Abstract

1 Introduction **1**

1.1 Problématique des explosions en milieu confiné 1

1.2 État de l'art des études numériques d'explosions 4

1.3 Vers la simulation LES d'explosions : le projet LEFEX 7

1.4 Adaptation de maillage 9

1.4.1 Maillage adaptatif statique 10

1.4.2 Maillage adaptatif dynamique 11

1.5 Objectifs et Méthodologie 18

1.6 Organisation du manuscrit 19

2 Les écoulements réactifs **21**

2.1 Équations d'évolution des écoulements réactifs 21

2.1.1 Thermodynamique de mélange réactifs 21

2.1.2 Équations de conservation 22

2.2 Notions de combustion 27

2.2.1 Structure d'une flamme prémélangée 28

2.2.2 Notions de vitesses de flamme 30

2.2.3 Les effets de l'étirement sur la flamme 32

2.2.4 Instabilités de flammes 34

2.3 Flammes prémélangées turbulentes 34

2.3.1 Propriétés et notions de turbulence 35

2.3.2 Régimes de combustion turbulente 37
2.3.3 Définition de vitesse de flamme turbulente 40
2.4 Particularité des explosions en milieu obstrué et confiné 41
2.4.1 Phase de flamme laminaire 43
2.4.2 Phase de transition de la flamme vers le régime turbulent 44
2.5 Conclusions intermédiaires 46

3 Bases théoriques de modélisation pour la simulation aux grandes échelles d'explosions 47

3.1 Le formalisme de la simulation aux grandes échelles (LES) 47
3.1.1 Équations de Navier-Stokes filtrées 49
3.1.2 Modèles de fermeture des équations de Navier-Stokes filtrées 50
3.2 Modélisation de la combustion turbulente 52
3.2.1 Modélisation de la chimie 53
3.2.2 Modélisation TFLES 55
3.2.3 Limite de TFLES pour les déflagrations 60
3.2.4 Senseur de flamme pour l'épaississement dynamique 62
3.2.5 Épaississement dynamique 67
3.3 Le solveur AVBP 69
3.4 Spécificité du contexte d'explosion : synthèse 70

4 Développement d'une méthode AMR générique pour la LES d'explosions 73

4.1 Construction de la méthodologie Turbulent Flame Propagation AMR (TFP-AMR) 78
4.2 La libraire AMR kalpaTARU 81
4.2.1 Parallélisation de l'algorithme d'adaptation 83
4.2.2 Équilibrage de charge 84
4.2.3 Interpolation des variables 85
4.3 Développement d'un critère de raffinement pour la flamme et d'une méthode de déclenchement de remaillage 85
4.3.1 Définition du masque de flamme 86

4.3.2 Stratégie de déclenchement de l'adaptation du maillage 87
4.3.3 Dilatation du masque de métrique 89
4.3.4 Application du critère de flamme sur un cas élémentaire de flamme plane laminaire en 3-D 93
4.4 Développement d'un critère pour la détection des vortex et interaction avec une flamme 97
4.4.1 Détection des vortex dans les écoulements non réactifs 98
4.4.2 Application dans un problème d'advection de vortex en 2D 102
4.4.3 Détection et sélection des vortex dans les écoulements réactifs . . . 105
4.4.4 Application et validation sur un cas d'interaction flamme épaissie/vortex 2D 111
4.4.5 Conclusions intermédiaires 116

5 Application de la méthode AMR pour un scénario de déflagration dans une configuration à échelle réduite 119
5.1 Description de la configuration 119
5.2 Configuration numérique 122
5.3 Validation des résultats de référence sur maillage statique homogène 123
5.4 Évaluation de la méthode AMR par comparaison aux cas de référence . . . 130
5.5 Évaluation et analyse du coût de calcul 133
5.6 Sensibilité aux paramètres de la méthode AMR 137
5.6.1 Influence du nombre de cellules de dilatation du masque de métrique 137
5.6.2 Étude de l'impact du paramètre Reynolds vortex limite sur le coût de calcul et la précision 140
5.7 Conclusions intermédiaires 145

6 Application de la méthode AMR sur un cas de déflagration rapide à échelle intermédiaire 147
6.1 Description de la configuration 147
6.2 Résultats de référence et validation AMR 151
6.3 Effet du raffinement du maillage 161
6.4 Coût de calcul 164

6.5 Impact du Reynolds vortex limite sur le coût de calcul et la précision des résultats 167
6.6 Conclusions intermédiaires 170

7 Conclusions et perspectives **173**

8 Annexe : Utilisation de l'AMR dans AVBP **181**
8.1 Recommandation de procédure et de paramètres en entrée 181
8.2 Choix des critères AMR 182
8.3 Procédure automatique d'initialisation 183
8.4 Optimisation et post-traitement 185

Chapitre 1

Introduction

1.1 Problématique des explosions en milieu confiné

La consommation d'énergie ne cesse d'augmenter et une partie significative de cette énergie est obtenue à partir de la combustion [110], comme le montre la Fig. 1.1 où la contribution à la production totale d'énergie est détaillée par type de source. La majeure

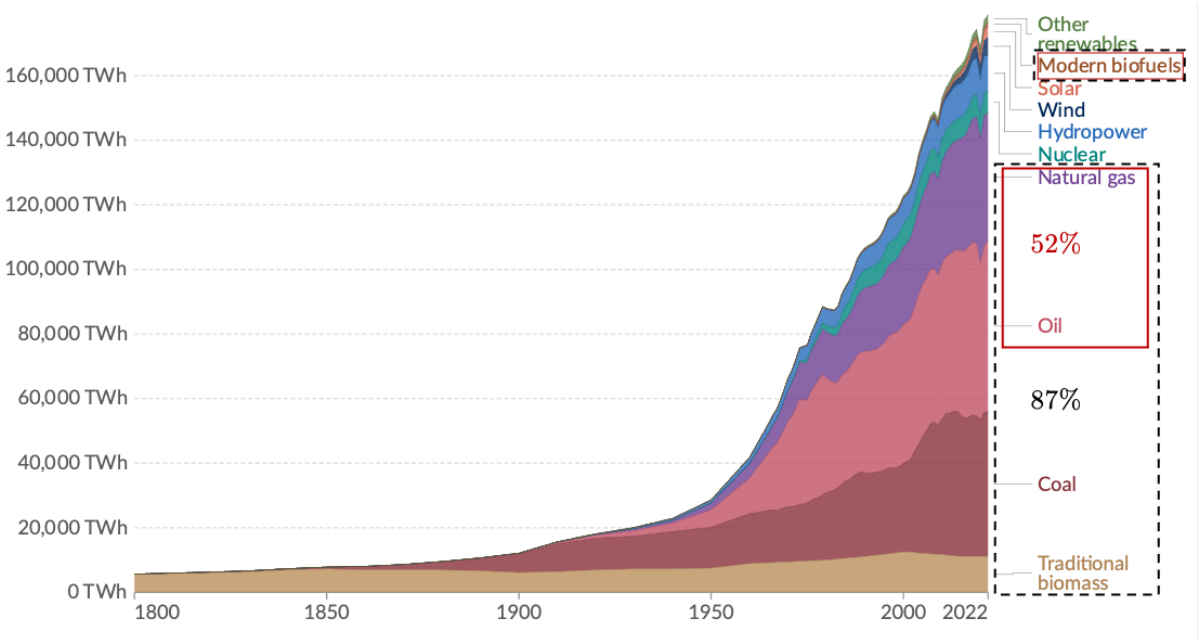


FIGURE 1.1 – Évolution de la consommation d'énergie primaire dans le monde entre 1800 et 2022. Les lignes en pointillés mettent en évidence les énergies issues d'une combustion (Biomasse, charbon, pétrole, gaz naturel et biocarburant) et les lignes en traits pleins les combustibles sous forme liquides et gazeuses (pétrole, gaz naturel et biocarburant). Adapté de [110].

partie de ces combustibles fossiles ($\approx 90\%$) est utilisée depuis un grand nombre d'années, mais l'émergence de nouveaux carburants comme vecteur énergétique (*i.e* SAFs [35], H_2 [58]) doit permettre de contribuer aux enjeux de décarbonation. La transformation, le transport, le stockage et l'utilisation de ces combustibles représentent un défi industriel du point de vue de la sécurité. De plus, l'utilisation croissante dans des nouveaux contextes de combustibles alternatifs, comme l'hydrogène, accentue ces problématiques. On retrouve

également ces problématiques pour d'autres technologies liées au stockage de l'énergie en lien avec la décarbonation, comme les batteries. En cas de défaillance, les cellules relâchent des composés carbonés et hydrogénés avec un emballement thermique qui peut conduire à des scénarios de feu ou d'explosion [25]. Le stockage de combustibles très énergétiques et très volatiles conduit à des problématiques de sécurité souvent liées à des scenarios de fuites accidentelles et des risques d'explosions. De nombreux accidents, comme ceux illustrés en Table 1.1, ont eu lieu ces dernières années. Les conséquences peuvent être très sévères et poussent les industriels vers une meilleure compréhension de ces accidents afin de mieux s'en prévenir.

Catastrophe	**Année, Pays**	**Combustible**	**Causes**	**Bilan humain**
Buncefield	2005, Royaume-Uni	Essence et diesel	Débordement lors du remplissage d'un réservoir	Pas de décès direct, plusieurs blessés
Texas City	2005, États-Unis	Hydrocarbures	Accumulation de vapeurs d'hydrocarbures près d'équipements électriques	15 morts, plus de 170 blessés
Jaipur	2009, Inde	Gaz propane	Fuite de propane dans un entrepôt	Au moins 12 morts, plus de 100 blessés
Amuay	2012, Venezuela	Gaz propane	Fuite de propane dans une raffinerie	Au moins 42 morts, des dizaines de blessés
Golfe du Mexique	2018, Atlantique	Gaz méthane	Fuite de méthane dans un puits	11 morts, 17 blessés
Séoul	2019, Corée du Sud	Gaz hdrogène	Fuite d'hydrogène d'un réservoir	2 morts, 6 blessés

TABLE 1.1 – Exemple d'accidents sévères causées par des explosions.

Anticiper la sévérité d'un scénario d'explosion nécessite toutefois une compréhension précise des mécanismes qui en sont le moteur. Dans le cas du stockage d'énergie pour des applications industrielles, les carburants sont souvent stockés dans des environnements en pression, sous forme liquide ou gazeuse. Un arbre détaillant les différents scénarios possibles lors d'une fuite de combustible est présenté en Fig. 1.2. Lorsqu'un combustible fuit dans un environnement confiné et qu'il rencontre directement une source de chaleur suffisante pour déclencher un allumage, il peut s'enflammer et, sous certaines conditions, un feu s'établit. Les feux non contrôlés, aussi appelés incendies, sont très dangereux, mais le temps caractéristique de propagation de la flamme est souvent assez long et laisse la capacité de réagir et l'inhiber. Dans le cas où l'allumage n'est pas immédiat,

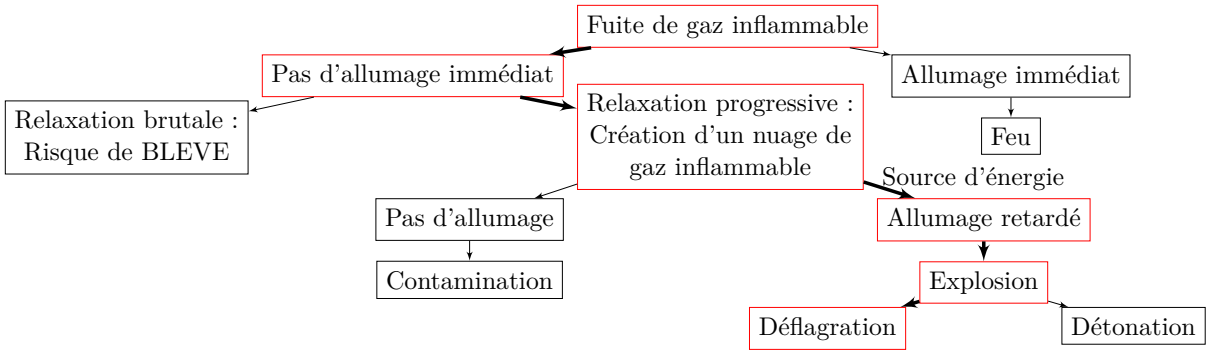


FIGURE 1.2 – Schéma résumant les différents scénarios possibles dans le cas d'une fuite de gaz.

plusieurs scénarios sont possibles. Dans le cas d'une fuite brutale, le combustible stocké sous forme liquide pressurisé (GNL, GPL) peut se vaporiser instantanément (BLEVE), générant une forte expansion des gaz, résultant en une onde de choc de forte intensité à la sévérité importante. Ce phénomène peut être évité en utilisant des soupapes de sécurité permettant d'évacuer le gaz sous pression de façon contrôlée. Dans les cas où la fuite est progressive, un nuage de gaz inflammable est formé dans l'environnement confiné en l'absence d'une source d'allumage. Le gaz se disperse alors dans le milieu confiné et provoque, en fonction de la nature du gaz, un risque d'intoxication. Au contraire, si une telle source d'allumage est présente dans ce milieu, le mélange s'enflamme et déclenche une explosion, *i.e* la formation et la propagation d'un front de flamme, qui s'accompagne souvent d'un phénomène d'accélération. Dans ce cas de figure, l'accélération de la flamme peut générer une surpression importante. Si la flamme atteint des vitesses proches de la vitesse du son, cette dernière peut transitionner vers une détonation, avec une sévérité bien plus importante à cause de l'onde de choc associée, menant très souvent à de l'ensemble des infrastructures environnantes. Pour réduire la sévérité d'une explosion, des moyens d'inhibition peuvent être déployés pour diminuer son intensité [86]. Cette technologie est difficile à mettre en œuvre. Par exemple, des évents peuvent être utilisés pour diminuer la surpression dans un domaine confiné. Cependant, ces stratégies de mitigation peuvent être complexes à mettre en œuvre ou insuffisantes dans certains scénarios, en raison du temps caractéristique d'une explosion qui est très court, souvent de l'ordre de quelques millisecondes. Quelle que soit la stratégie adoptée (*i.e* mitigation, contrôle de sévérité par des moyens actifs ou passifs), une très bonne compréhension fondamentale des phénomènes

d'explosions est nécessaire. Pour atteindre cet objectif, des configurations expérimentales ont été développées et ont permis de relever des mesures physiques et d'autres diagnostics permettant de les relier aux niveaux de surpression, dans des géométries relativement simples comme la configuration de l'INERIS [38]. D'autres configurations ont également été étudiées expérimentalement, comme les configurations de l'université de Sydney [76, 89], ou celle de l'université de Munich, GraVent [15] avec des niveaux de diagnostics plus fins. La mise en place de telles expériences est toutefois coûteuse et complexe, et ne permet pas d'obtenir un grand nombre de diagnostics physiques, bien qu'essentielles pour comprendre précisément les phénomènes physiques pilotant ces explosions. Pour améliorer la compréhension des phénomènes d'explosions, des simulations numériques peuvent être réalisées en complément de l'approche expérimentale. Elles consistent en la résolution numérique des équations représentants le comportement d'un fluide réactif, en utilisant une discrétisation spatiale d'un domaine (*i.e* un maillage) afin d'en obtenir le comportement local en tout point de l'espace et du temps. Ces simulations donnent l'accès à un très grand nombre de diagnostics. Elles restent toutefois complexes à mettre en œuvre de par l'effort de modélisation et les ressources de calcul nécessaires, notamment pour les domaines ayant un volume très important, comme dans le cas d'applications industrielles.

1.2 État de l'art des études numériques d'explosions

Différentes familles d'approches numériques sont utilisées aujourd'hui et classées selon leur complexité de modélisation et leur coût en Fig. 1.3.

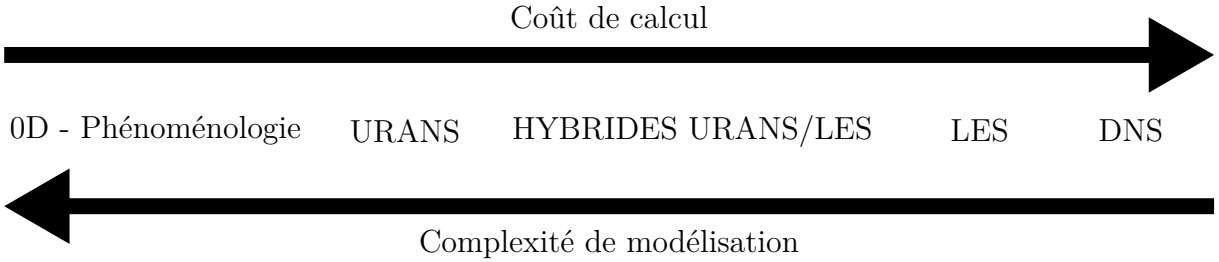


FIGURE 1.3 – Classement des méthodes de simulations numériques CFD en fonction du coût de calcul (haut) et de la complexité de modélisation (bas).

— **Simulations 0D phénoménologiques :** ces simulations sont majoritairement utilisées en industrie de par leur faible coût et leur rapidité d'exécution [23]. Les

équations qui les régissent ne dépendent d'aucune dimension spatiale (x, y, z), modélisant ainsi une grande gamme de phénomènes physiques de façon théoriques ou empiriques. Elles dérivent souvent de simulations de plus hautes fidélités et d'observations phénoménologiques issus d'expérimentations. Bien que largement utilisées pour obtenir des ordres de grandeurs conservatifs sur les variables physiques d'intérêt, ces modèles nécessitent d'être calibrées par rapport à des scénarios existants afin de fournir des estimations correctes de la sévérité du phénomène [61].

— **Simulations RANS :** les simulations RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) permettent de résoudre les équations de Navier-Stokes avec une moyenne d'ensemble, en utilisant la décomposition de Reynolds. Dans un contexte d'écoulement statistiquement stationnaire, la moyenne d'ensemble peut être vue comme une moyenne temporelle et l'approche permet d'obtenir un bon compromis entre le coût du calcul et sa précision. Cette approche donne cependant un poids important à la modélisation des termes liés aux fluctuations turbulentes qui sont complètement modélisés. Dans le contexte instationnaire d'une explosion, cette approche ne permet pas, par construction, de rendre compte de l'évolution temporelle des phénomènes physiques en jeu. Des méthodes URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes) sont développées pour ce contexte [106], visant à reproduire la moyenne des réalisations et permettent ainsi de reproduire les phénomènes transitoires. Cette méthode est basée sur l'hypothèse d'une séparation d'échelles entre la turbulence et le temps caractéristique de l'évolution de la moyenne d'ensemble. Cette méthode, qui permet de prendre compte du caractère instationnaire des explosions, présente un coût de calcul acceptable de par la résolution modérée de maillage nécessaire. C'est pourquoi elle est largement utilisée par les industriels pour prédire ces phénomènes. De nombreux codes ont montré de bons résultats avec un formalisme URANS (FLACS [6], REAGAS [120], EXSIM [63]). Ces codes comportent souvent des sous-modèles qui sont calibrés en s'appuyant sur des résultats de larges campagnes expérimentales, qui en font des standards dans l'industrie. Cependant, la complexité de modélisation de la flamme et de la turbulence empêche le développement d'un modèle universel qui permettrait de prédire dans toutes les situations les mécanismes physiques pilotant les explosions, ce qui questionne la

précision de ces codes pour des nouvelles applications.

— **Simulations aux grandes échelles (Large Eddy Simulation, LES) :** cette approche consiste à résoudre les plus grandes échelles turbulentes de l'écoulement. Cela réduit ainsi fortement les difficultés de modélisation, qui porte sur les petites échelles de l'écoulement qui ont un caractère plus universel. Contrairement à l'approche RANS, un filtrage spatial est appliqué et sépare les grandes échelles, résolues sur le maillage, des petites échelles modélisées. L'échelle de coupure du filtre doit être assez petite pour s'assurer de la résolution d'une partie conséquente du spectre d'énergie cinétique turbulente [105]. C'est pourquoi l'approche LES nécessite un maillage beaucoup plus fin que pour l'approche URANS, ce qui se traduit par des coûts de calcul très élevés. En effet, la taille du filtre est proportionnelle à la taille des mailles. Ces coûts restreignent aujourd'hui l'application de ce formalisme à des configurations de faibles ou moyens volumes ($\approx$ 100 L) et ne permettent pas de s'affranchir des simulations URANS et 0D pour des cas de plus grandes échelles ou dans des contextes d'études paramétriques avec un grand nombre de scénarios à simuler. Son principe et sa mise en œuvre sont détaillés en Section 3.1.

— **Simulations DNS :** les Simulations Numériques Directes (DNS) ne nécessitent pas de modélisation de la turbulence ou de traitement particulier appliqué aux équations de Navier-Stokes. Elles reposent sur une résolution directe par un schéma numérique de haute précision de ces équations. Cela requiert un maillage extrêmement fin pour s'assurer de capturer toutes les échelles de turbulence et de flamme. Leur utilisation est donc restreinte à des géométries simples de dimensions très petites. Elles ne sont pas utilisées dans des contextes industriels et ne le seront pas à court et moyen termes, même en s'appuyant sur une augmentation de la capacité de calcul. Elles permettent cependant une compréhension avancée des phénomènes physiques survenant à très fines échelles et sont donc souvent utilisées, en complément de données expérimentales, pour construire et valider les modèles développés pour les autres approches.

Une illustration du comportement des différentes approches pour la prédiction de l'évolution temporelle de la vitesse dans le sillage d'un cylindre est présentée en Fig. 1.4.

— L'approche RANS donne uniquement accès à une prédiction de la valeur moyenne et des écarts-types de ce champ de vitesse quand l'approche URANS fournie l'évolution temporelle liée aux grandes structures cohérentes de l'écoulement.

— l'approche LES permet de capter une partie des fluctuations instationnaires de vitesses des grandes échelles jusqu'aux échelles de l'ordre la taille de maille locale.

— l'approche DNS donne accès à l'intégralité des variations de vitesses à toutes les échelles.

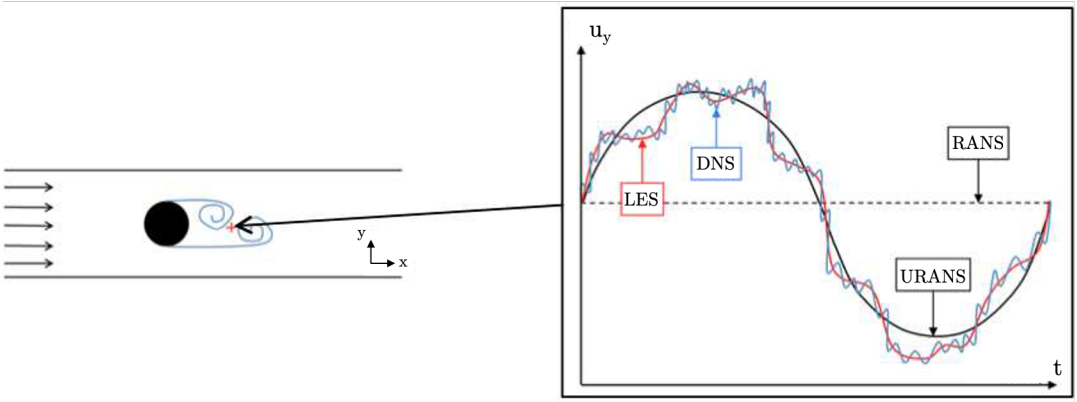


FIGURE 1.4 – Schéma des évolutions temporelles de la vitesse dans le sillage d'un cylindre pour les approches RANS, URANS, LES et DNS. Adapté de [107].

1.3 Vers la simulation LES d'explosions : le projet LEFEX

Les simulations LES de déflagrations sont aujourd'hui réalisables à des grands nombres de Reynolds grâce à l'augmentation continue de la puissance de calcul [124, 126]. Pour de tels phénomènes réactifs et instationnaires, cette approche offre de plus un compromis intéressant entre les méthodes URANS et DNS en termes de précision et de coût de calcul et permet d'aller explorer des cas limites où les modèles URANS sont mis en défaut. Cependant, l'utilisation de LES de qualité satisfaisante dans le cadre d'applications industrielles complexes et de grandes échelles reste coûteuse pour deux raisons principales :

— **La taille des maillages :** les phénomènes physiques qui jouent un rôle essentiel lors d'une déflagration, comme la structure de flamme, ont une taille caractéristique très faible (< 1 mm). Pour résoudre précisément leur comportement physique,

une discrétisation très fine est nécessaire. Dans des configurations industrielles, les géométries ont toutefois des tailles caractéristiques bien plus importantes (> 10 m). Même si les phénomènes physiques d'intérêt, comme la flamme et la turbulence, peuvent s'appuyer sur un modèle de sous-maille pour être modélisés à petite échelle, il faut toujours s'assurer d'avoir une résolution suffisante, qui va dépendre d'autres contraintes. Par exemple, dans un environnement obstrué, les échelles géométriques peuvent couvrir une large gamme. Il faut alors s'assurer d'avoir une résolution minimale suffisante pour décrire correctement le processus d'interaction entre la flamme et l'obstacle. Ce type de disparité d'échelle accroît significativement le coût de calcul.

— **La nature propagative des explosions :** face à la problématique de taille des maillages, une des solutions pourrait être de ne pas mailler le domaine de façon homogène afin de réduire le nombre total d'éléments de tels maillages. Des approches d'adaptation de maillage statique ont spécifiquement été développées pour ne mailler finement que les zones dans lesquelles les phénomènes physiques d'intérêt se produisent. Ces approches seront présentées dans la Section 1.4.1. Cependant, les grandeurs physiques caractéristiques des explosions comme la flamme sont, par nature, transitoires et se propagent dans une grande partie du domaine. L'application de ces méthodes ne répond donc pas à l'objectif initial puisque le maillage est statique et n'évolue ni en temps, ni en espace, contrairement à la physique d'intérêt.

Bien que les simulations LES aient montrés de très bons résultats sur les configurations de petites échelles [124, 126], il n'est pas garanti qu'elles seront toujours aussi fidèles à de plus grandes échelles géométriques, où les caractéristiques de l'écoulement, comme les structures turbulentes, vont varier alors que les caractéristiques de flamme laminaire resteront, elles, constantes, accentuant le poids des modèles de sous-maille dans la prédiction du résultat. C'est pourquoi le passage à une échelle supérieure en simulation nécessite l'introduction de nouvelles méthodes pour améliorer le temps de retour de ce type de simulations. Le projet LEFEX (Large-Eddy simulation For EXplosions), impliquant le CERFACS et plusieurs partenaires industriels (TotalEnergies, Air Liquide et GRTGaz), a été spécifiquement conçu pour répondre à ces enjeux. Plusieurs travaux

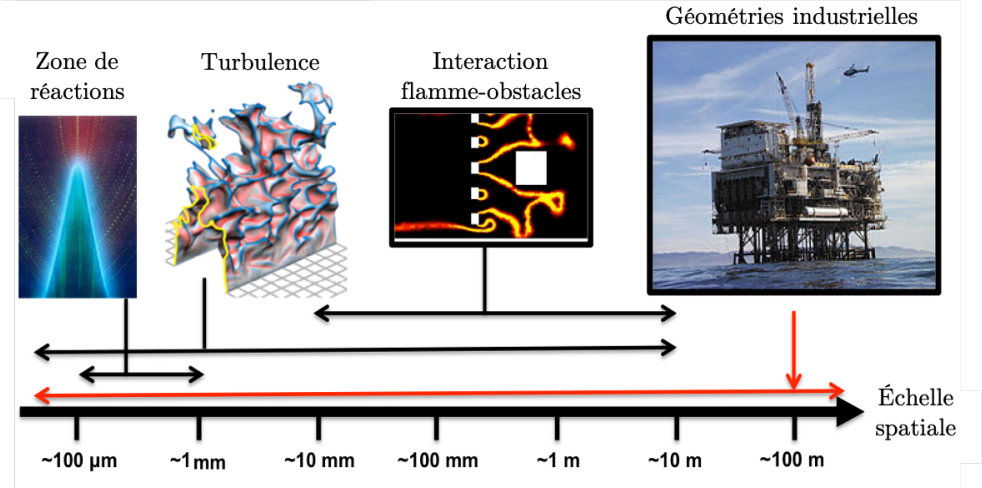


FIGURE 1.5 – Tailles caractéristiques des différentes échelles à prendre en compte lors des simulations CFD d'explosions. Adapté de [108].

de thèses contribuent à ce projet LEFEX, parmi lesquels : la compréhension et la modélisation des phénomènes d'explosion pour des mélanges hydrogène-air pauvre (thèse de Jean-Jacques Hok), le développement de l'Adaptative Mesh Refinement (AMR) pour réduire substantiellement le coût informatique d'une LES d'explosion (thèse de Soumyo Sengupta et avec une poursuite dans cette thèse) ; l'utilisation du Deep Learning pour la modélisation de la combustion turbulente (thèse de Victor Xing) ; et l'application des méthodes LES à des configurations d'explosion à très grande échelle (industrielle) (thèse de Francis Adrian Meziat Ramirez).

Pour ce qui concerne le périmètre de cette thèse, l'utilisation de l'adaptation de maillage dynamique ou AMR (pour Adaptive Mesh Refinement) est un levier essentiel pour réduire le coût de calcul. L'objectif de ces approches est, de façon similaire à l'adaptation de maillage statique, de mailler finement les zones où les grandeurs d'intérêt sont détectées, afin de garantir la précision du calcul à un coût réduit. Le caractère dynamique de la méthode permet une mise à jour régulière durant la simulation afin de suivre l'évolution transitoire des phénomènes en espace et en temps.

1.4 Adaptation de maillage

Comme rappelé dans la Section 1.2, les simulations LES nécessitent des maillages suffisamment fins et sont très coûteuses. C'est pourquoi leur utilisation est principalement

cantonnée aux simulations de configurations de petite taille. Pour des simulations de géométries de plus grande échelle, mailler finement un volume très important devient prohibitif. Une stratégie pour réduire la taille des maillages est de déraffiner les zones sans impact significatif sur la physique en s'appuyant sur la définition de quantités d'intérêt ou de critères de précision numérique. Il faut alors définir ces quantités d'intérêt ainsi qu'un critère de raffinement ou de qualité qui permet de définir la résolution locale du maillage. Il existe alors plusieurs types d'adaptation de maillage, dont les deux grandes familles sont la SMR (pour Static Mesh Refinement) ou l'AMR.

1.4.1 Maillage adaptatif statique

Cette approche est largement utilisée pour des contextes stationnaires tels que les chocs en aérodynamique [11, 36]. Les forts gradients, propres aux ondes de chocs, nécessitent en effet un maillage très fin dans ces zones, mais cette résolution n'est pas nécessaire dans le reste de l'écoulement comme illustré en Fig. 1.6.

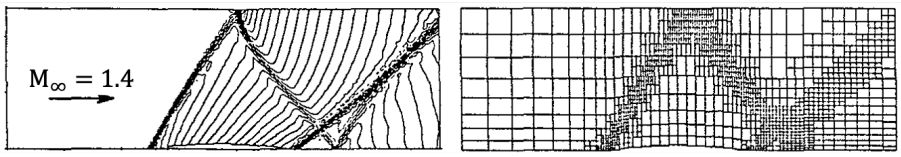


FIGURE 1.6 – Visualisation de l'adaptation de maillage pour un cas d'étude de choc. (a) : contour de nombre de Mach. (b) : maillage adapté. Adapté de [36].

Ces méthodes se basent sur des critères de convergence d'une ou plusieurs quantités et permettent d'obtenir un maillage optimal, qui permet de réaliser une simulation précise à moindre coût. Elles ont d'abord été utilisées dans des simulations RANS, de par la nature stationnaire du formalisme qui est propice à ce genre d'approche, ainsi que pour la possibilité d'utiliser des méthodes adjointes pour évaluer la sensibilité de la solution et ainsi détecter les zones à raffiner de façon systématique. Dans le cas de simulation LES ou DNS, l'approche est plus difficile à mettre en place. En effet, les simulations LES dépendent, par construction, du temps et réaliser un maillage unique qui permet de résoudre les phénomènes physiques d'intérêt à différents instants devient très complexe, puisque le caractère statistique du formalisme LES est à prendre en compte. Il faut donc

trouver des approches statistiques basées sur certaines quantités qui pourraient améliorer la prédiction de l'écoulement moyen. Des critères ont été proposés, basés par exemple sur la théorie de la Méthode Variationnelle multi-échelles (VMS) [5] ou sur le taux d'énergie cinétique turbulente totale résolue [9], permettent de pallier ce problème. Au-delà de la problématique d'identification des zones à raffiner, l'algorithme d'adaptation de maillage statique est similaire entre les approches RANS et LES. Dans un premier temps et sur un maillage grossier, les zones où se trouvent les quantités d'intérêt (QoI) stationnaires sont estimées. Une fois ces zones détectées, une d'adaptation est déclenchée et le maillage est adapté. Cette première boucle d'adaptation est ensuite effectuée sur la base du nouveau maillage, jusqu'à satisfaire les critères de convergence définis a priori. Le processus est illustré en Fig. 1.7 pour le cas d'un écoulement non réactif au travers d'un diaphragme. Une fois ce maillage optimal obtenu, la simulation est lancée sur celui-ci, avec un nombre d'éléments beaucoup plus faible que son équivalent homogène. Ces méthodes ont été utilisées dans des contextes de simulations LES [9, 39, 71] et ont montré de très bons résultats. Si les critères de convergence sont bien choisis, cet outil permet de retrouver très précisément les résultats d'une même simulation effectuée sur un maillage homogène pour un coût moindre.

1.4.2 Maillage adaptatif dynamique

Dans le cas de simulation de phénomènes transitoires, comme les explosions, l'approche SMR n'est pas adaptée. En effet, les quantités d'intérêts qui jouent un rôle dans la physique de l'écoulement réactif évoluent dans l'espace et le temps. Pour pallier ce problème, il faut adapter le maillage dynamiquement au cours de la simulation. Ainsi, les zones maillées finement évoluent avec les grandeurs d'intérêt au cours du temps. Plusieurs méthodes sont envisageables dans ce cadre. Cependant, de façon générale, cela nécessite qu'à chaque étape d'adaptation, les variables de l'état courant sont interpolées sur le nouveau maillage et la simulation se poursuit.

Ces méthodes sont de plus en plus utilisées, dans de nombreux domaines de la mécanique des fluides, comme la simulation de sillage d'éoliennes [132] (Fig. 1.8), de tsunamis [104] (Fig. 1.9), d'atomisation [67] (Fig. 1.10), de déflagration [127](Fig. 1.10) ou de détonation [92] (Fig. 1.12) de par leur grand potentiel de réduction de coût de calcul. Dans la Fig. 1.8,

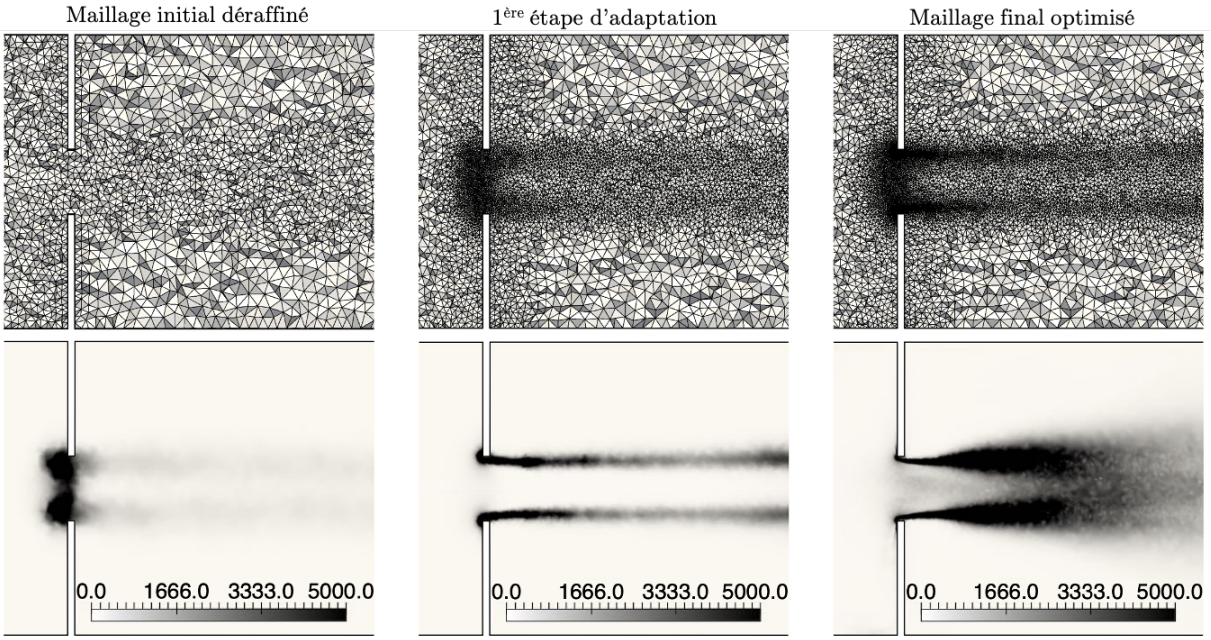


FIGURE 1.7 – Étapes d'adaptation du maillage pour un écoulement non réactif à travers un diaphragme en utilisant le critère LIKE [39]. Évolution du maillage (haut) et de la dissipation d'énergie cinétique moyenne (bas) en W/m^3. Le maillage initial grossier (gauche) composé de 0.7 M de cellules, le maillage intermédiaire à la première étape composé de 1.6 M de cellules et le maillage optimal en sortie composé de 2.8 M de cellules. Adapté de [39].

le maillage est composé de tétraèdres et utilise une approche non structurée. Les zones d'intérêt sont détectées à l'aide d'un critère basé sur la vorticité, une grandeur physique instantanée. Ce dernier prend une formulation adimensionnelle, mais nécessite un seuil arbitraire. C'est également les cas des Figs. 1.10 et 1.12, où les critères utilisés sont respectivement basés sur l'interface goutte/air et sur la variable de progrès, et où les maillages utilisés sont non structurés et composés de tétraèdres. Au contraire, le cas présenté en Fig. 1.9 utilise un critère basé sur une estimation d'erreur numérique et où le maillage est non structuré et composé d'hexaèdres. Enfin, le cas présenté en Fig. 1.12 utilise un critère basé sur la densité et le maillage utilisé est structuré. Il existe donc un grand nombre de paradigmes d'utilisation de l'AMR pour des phénomènes transitoires et il faut alors décider au cas par cas de la méthode la plus adaptée.

Une composante essentielle d'un algorithme AMR est la capacité de modifier un maillage à la volée. Il existe deux grandes familles de topologies de maillage :

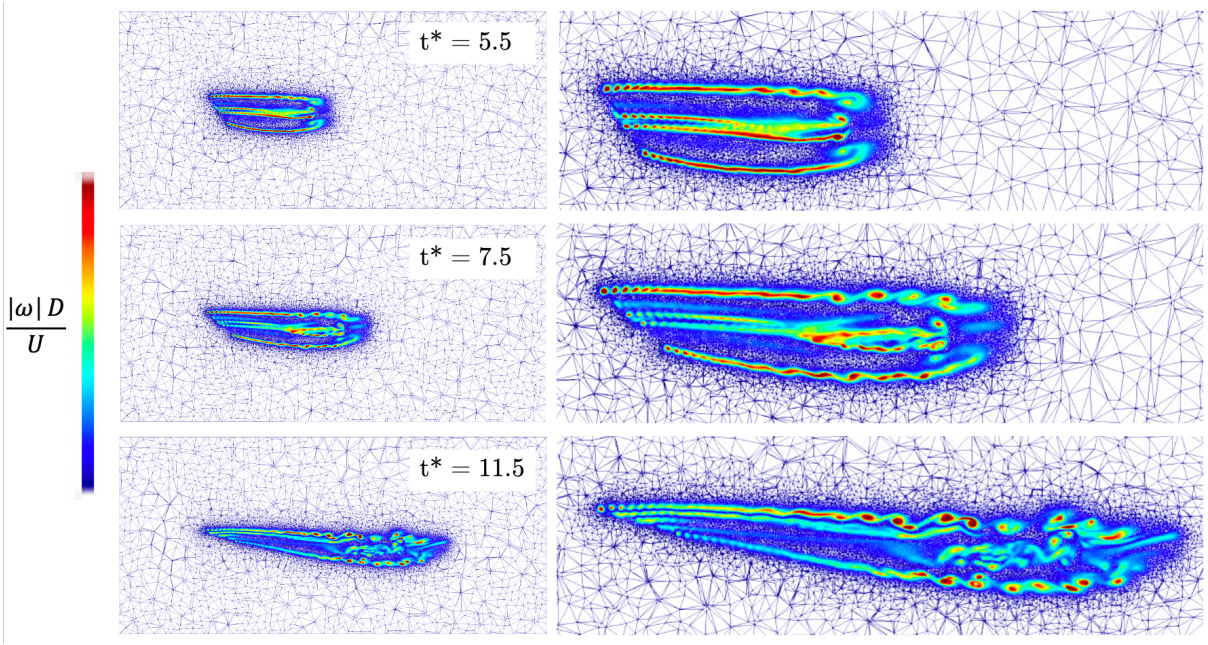


FIGURE 1.8 – Exemple d'AMR pour l'étude du sillage d'un rotor. Visualisation des contours de vorticité à plusieurs temps physiques. Des grandeurs physiques instantanées sont utilisées ici pour cibler les zones où la vorticité est générée. Adapté de [132].

— **Maillage structuré :** ce type de maillage a plusieurs avantages. Il permet notamment de faciliter l'implémentation et l'utilisation de l'AMR grâce à sa structure hiérarchique, notamment dans le cas de structures de données cartésiennes en octree. Cette topologie du maillage permet un raffinement/déraffinement direct du maillage, et simplifie les opérations d'interpolation et de redistribution de charge. Cependant, l'approche est non conforme sur les frontières, ce qui réduit la précision au niveau des conditions aux limites. De plus, elle nécessite des traitements numériques spécifiques pour gérer les transitions aux interfaces avec des tailles de mailles différentes. Un grand nombre d'études ont déjà validé l'utilisation de l'AMR et son efficacité, sur des géométries relativement simples [11, 12, 77, 92], comme illustré en Fig. 1.12.

— **Maillage non structuré :** contrairement à l'approche précédente, un maillage non structuré permet de reproduire très précisément les géométries complexes en utilisant des approches de maillages conformes (body-fitted) et d'appliquer des tailles de mailles très différentes [47], avec une forte flexibilité sur la taille de maille locale. Néanmoins, utiliser l'AMR sur ce type de maillage s'avère plus difficile à mettre

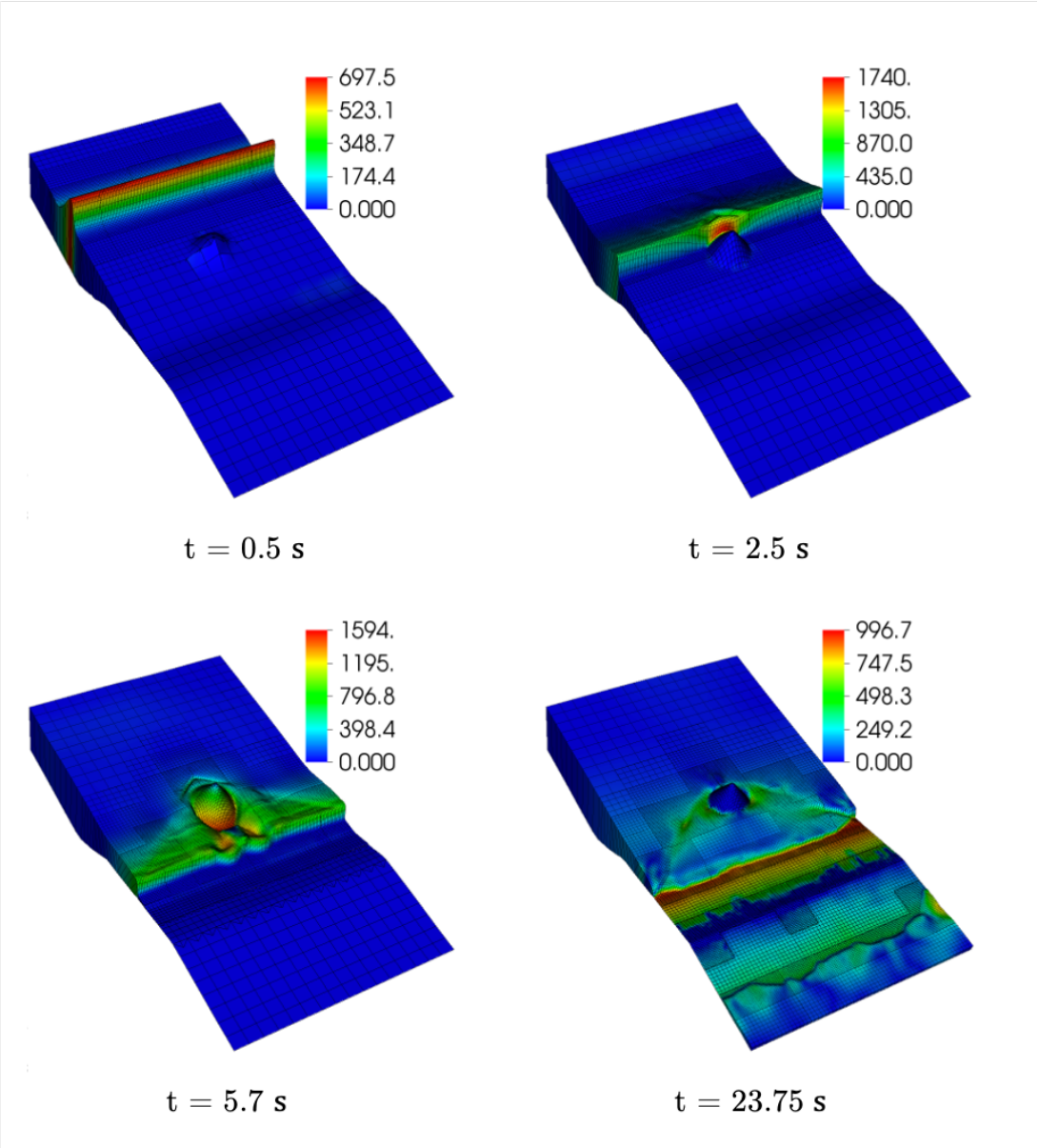


FIGURE 1.9 – Exemple d'AMR pour l'étude de la propagation d'un tsunami. Visualisation du champ d'énergie cinétique. Le critère d'adaptation de maillage est basé sur la variation de densité numérique d'entropie, un indicateur d'erreur qui augmente dans les zones de forts gradients. Adapté de [104].

en œuvre et à manipuler d'un point de vue de la structure de données, de par de la structure non hiérarchique et le manque d'informations sur la connectivité entre les nœuds au-delà des premiers voisins qui rendent difficile la réalisation d'opérations non locales. Ainsi, ce type de maillage requiert un algorithme spécifique d'adaptation avec un coût important. Les interpolations réalisées à chaque adaptation sont également plus onéreuses et peuvent dégrader la qualité de la solution. L'utilisation

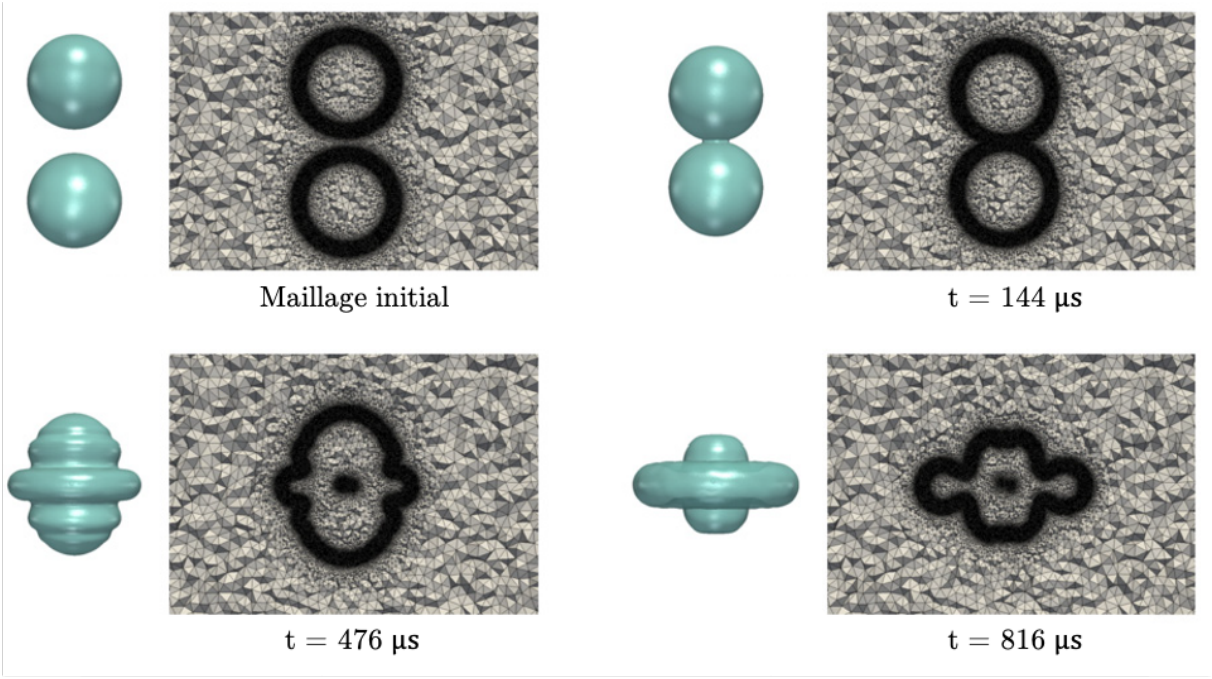


FIGURE 1.10 – Exemple d'AMR pour la simulation de collision de gouttes. Visualisation de l'isocontour de l'interface liquide-gas. L'AMR utilise ici l'interface qui sépare la goutte de l'air pour cibler les zones d'intérêt. Adapté de [67].

de l'AMR sur ce type de maillage a néanmoins été validée et a prouvé son efficacité sur différents types de géométries complexes, comme illustré en Figs. 1.8, 1.10, et 1.11.

Enfin, les approches AMR peuvent également être classées en fonction du type de critère utilisé pour déterminer les zones où le raffinement de maillage doit être appliqué :

— **Basée sur une évaluation de l'erreur numérique :** La taille de maille peut être choisie pour satisfaire des critères de convergence basés sur des estimations d'erreur physiques ou numériques (Fig. 1.9). De nombreuses approches AMR reposent sur des critères d'erreur [5, 7, 54, 109, 129]. Le contexte spécifique de la LES ajoute également une difficulté à la définition de telles erreurs. Tout d'abord, ces erreurs doivent prendre en compte la taille du filtre LES, qui est directement liée à la taille locale de la maille. Toosi et Larsson [119] notent que, comme la LES est, par définition, sous-résolue, une convergence basée sur une estimation d'erreur ponctuelle (dans l'espace et le temps) conduirait à une convergence du maillage adapté vers un maillage DNS. Pour les cas non réactifs, ils proposent de prendre

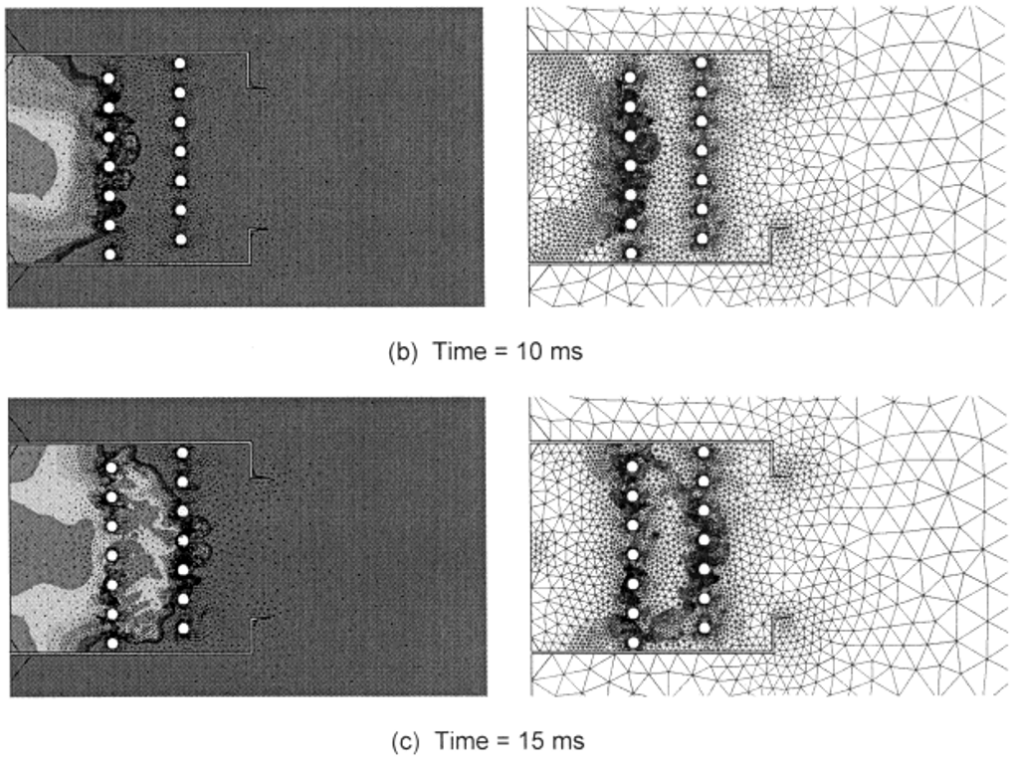


FIGURE 1.11 – Exemple d'AMR pour la propagation d'une déflagration dans un canal obstrué. Visualisation d'isocontour de variable de progrès (gauche) et du maillage adapté (droite) à différents instants. L'AMR utilise ici des critères basés sur des grandeurs physiques instantanées et utilise un maillage non structuré. Adapté de [127].

en compte la fermeture de sous-maille dans la définition de l'erreur, ce qui permet d'obtenir une convergence en restant dans un régime LES. Pour les cas réactifs, l'effet de la taille de filtre (également liée la taille de maille) de combustion et du modèle sous-maille de combustion devrait également être pris en compte, ce qui serait une tâche complexe en raison de la forte non-linéarité du système réactif.

- **Basée sur des grandeurs physiques instantanées** : une approche plus empirique et pragmatique consiste à identifier les caractéristiques importantes de la physique reproduite dans la simulation, comme illustré en Fig. 1.8, 1.11 et 1.12, pour lesquelles une grande précision est requise. Une approche similaire est adoptée dans le contexte fortement transitoire des LES d'explosions. Les QoI construites à partir de connaissances *a priori* de la physique sont utilisées pour définir les zones où une résolution fine du maillage est nécessaire. Dans les cas des explosions, on cible notamment la flamme et les structures tourbillonnaires

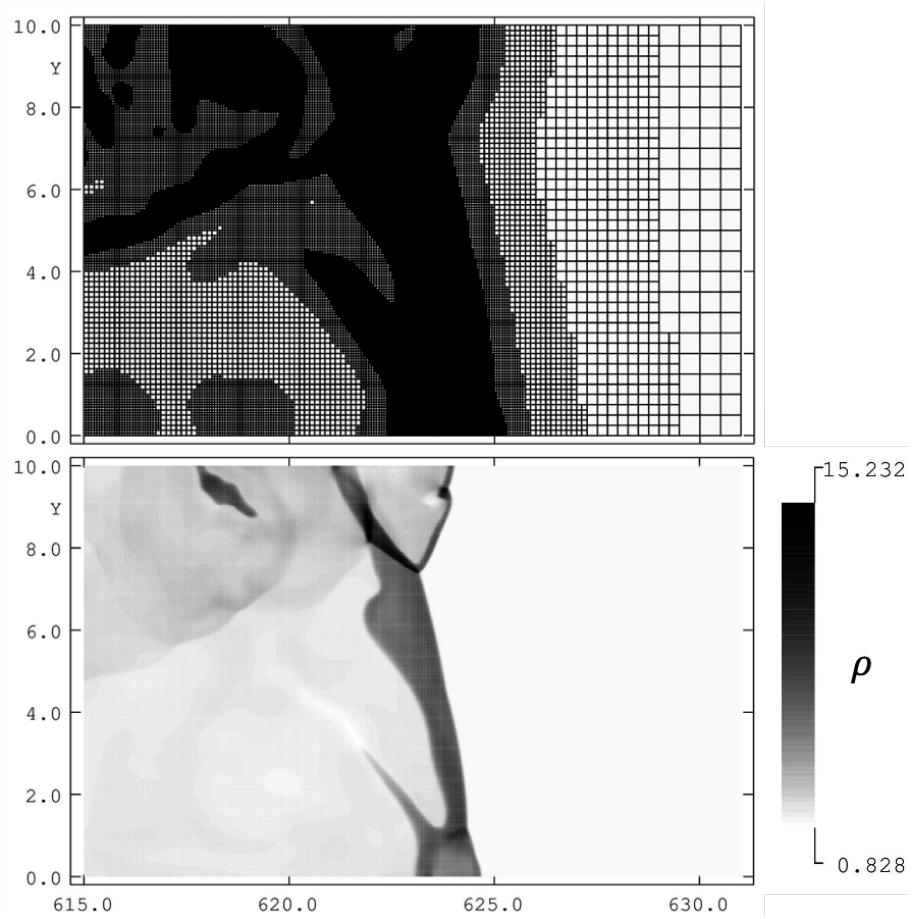


FIGURE 1.12 – Exemple d'AMR pour la propagation d'une détonation. Visualisation du champ de densité. L'AMR utilise ici des critères basés sur des grandeurs physiques instantanées et utilise un maillage structuré. Adapté de [92].

résolues. Dans ce paradigme, la résolution cible du maillage, dans les régions où se trouvent les physiques d'intérêt, reste un paramètre défini par l'utilisateur car il n'est pas contrôlé par un critère de convergence. Il peut être choisi, par exemple, en fonction des critères de résolution LES, du niveau de résolution de flamme ou de turbulence et de critères géométriques, ou, d'un point de vue plus pratique, en fonction du coût de calcul global.

La plupart des codes utilisant de l'adaptation de maillage dynamique ont des approches spécifiques à leur contexte d'application et il n'existe pas de consensus sur l'approche optimale à utiliser. Une approche basée sur des critères physiques dépend du type de simulations et des configurations étudiées. Cependant, le caractère générique d'une approche, consistant à développer une méthode unique n'ayant pas ou peu de paramètres

à modifier entre des configurations différentes dans un périmètre donné (ex : explosion, jet, détonation), est reconnue comme un point important pour obtenir une méthode robuste. Construire ce type d'approche dans un contexte d'explosion est l'un des principaux objectifs des travaux de ce manuscrit, comme décrit dans la section suivante.

1.5 Objectifs et Méthodologie

Le but des travaux présentés dans ce manuscrit est de développer une méthodologie d'adaptation de maillage dynamique, basée sur des critères physiques instantanés, permettant de diminuer le coût de calcul total des simulations LES, tout en assurant une bonne résolution des phénomènes d'intérêt responsables de l'accélération de flamme lors d'une explosion. La méthode est construite avec l'objectif d'être générique, pour permettre son application sans calibration par l'utilisateur sur un grand nombre de cas différents. Pour cela, il faut identifier les phénomènes d'intérêts qui sont responsables des mécanismes d'accélération de flamme dans des configurations industrielles, et ce à chaque instant afin de suivre leur évolution et d'adapter le maillage de façon dynamique. Il faut également établir des critères de déclenchement des adaptations de maillage qui permettent de maximiser les gains en coûts de calcul, en déclenchant l'adaptation de maillage de façon optimale. Enfin, des validations sur des cas tests canoniques sont effectuées pour chaque développement. Elles consistent à comparer les résultats et les coûts obtenus pour une simulation dite de référence, réalisée sur un maillage raffiné et homogène, à une simulation utilisant l'AMR et ciblant la même résolution que le maillage homogène dans les zones où les phénomènes d'intérêt sont détectés. Suite à ces cas élémentaires, des simulations sur des configurations complexes de plus grandes échelles permettent de valider la méthode et de quantifier le gain en termes de coût de calcul global, pour des simulations d'explosion en laboratoire qui s'approche des volumes fluides rencontrés dans des configurations industrielles.

1.6 Organisation du manuscrit

Dans un premier temps, les équations régissant le comportement d'un fluide réactif, laminaire puis turbulent, sont rappelées en Chapitre 2 afin de définir les équations à résoudre numériquement. Un rappel des différents mécanismes d'accélération de flamme est également proposé afin de permettre une meilleure compréhension des phénomènes pilotant les explosions.
L'approche LES est ensuite décrite et les modèles nécessaires, utilisés dans ces travaux, sont introduits en Chapitre 3.
Par la suite, l'approche AMR retenue pour les simulations LES d'explosion et son développement sont décrits dans le Chapitre 4. Plusieurs cas de validations sont proposés afin de valider de façon incrémentale la méthode. Dans un premier temps, un rappel des différentes approches AMR, utilisées pour des simulations LES d'explosions, est présenté. La librairie d'adaptation de maillage kalpaTaru, développé au CERFACS, dans le cadre des travaux de thèse de Sengupta [112] est également présentée. La stratégie de couplage entre l'adaptation de maillage et la simulation LES est également décrite. La définition d'une méthode permettant d'identifier les zones d'intérêt à raffiner, dans ce contexte LES explosion constitue un point central des travaux de cette thèse. Elle se concentre sur la reproduction des phénomènes de flamme et d'interaction flamme turbulence, pour lesquels deux critères dédiés sont construits puis évaluer sur des cas de propagation de flamme, de vortex, puis d'interaction flamme-vortex, en liant les paramètres des critères à littérature disponible pour les phénomènes d'interaction flamme-vortex. La méthode AMR et ses critères de déclenchement sont ensuite évalués sur deux géométries complexes 3-D en Chapitres 5 et 6 afin de valider leur fonctionnement sur ce type de configurations et pour permettre une quantification plus précise des gains de temps possibles dans des approches industrielles.
La première étude porte sur les configurations de Masri [89]. À noter qu'à l'occasion de ces démonstrations, trois configurations différentes sont utilisées afin d'évaluer le caractère générique de l'approche proposée en comparant les résultats à ceux obtenus sur des maillages statiques homogènes équivalents.
Afin de valider la méthode sur une géométrie différente et de plus grand volume (155 fois

supérieur), la configuration GraVent BR300Sh30 [15] est simulée. Cette étude permet à la fois d'évaluer la capacité de l'approche à généraliser à d'autres cas, mais également de montrer l'intérêt de la méthode sur ce type de géométrie avec un grand rapport d'aspect avec une plus forte disparité d'échelle. Pour finir, une conclusion sur le fonctionnement et la robustesse de la méthode est présentée, et une ouverture sur les perspectives de travaux pour l'améliorer et l'optimiser est proposée.

Les travaux de cette thèse ont donné lieu à plusieurs communications dans des conférences en 2023, lors de l'European Combustion Meeting (ECM), à la Journée de la Combustion Turbulente (JCT) ainsi qu'à l'International Conference on Hydrogen Safety (ICHS). Cette dernière conférence a permis la publication d'un article dans ses proceedings [121]. Le développement de la méthode, décrite dans le chapitre 4 a également mené à la publication d'un article en 2024 dans le journal Flow, Turbulence and Combustion [122].

Chapitre 2

Les écoulements réactifs

2.1 Équations d'évolution des écoulements réactifs

La physique d'un écoulement réactif et sa modélisation se font à l'aide de plusieurs équations de conservation à multiples inconnues. La suite s'attèle à décrire ces équations et sera une base pour la modélisation et la simulation.

2.1.1 Thermodynamique de mélange réactifs

Si l'on considère une espèce k intervenant dans un mélange multiespèces, on peut définir :

— sa fraction massique et molaire en Eq. (2.1) :

$$Y_k = m_k/m \quad \text{et} \quad X_k = n_k/n, \tag{2.1}$$

avec m_k la masse de l'espèce k et n_k son nombre de moles ;

— sa masse molaire en Eq. (2.2) :

$$W_k = m_k/n_k, \tag{2.2}$$

— sa masse volumique en Eq. (2.3) :

$$\rho_k = \rho Y_k, \tag{2.3}$$

avec ρ la masse volumique du mélange ;

— sa masse molaire moyenne :

Dans un mélange, la somme des fractions massiques et celle des fractions mo-

laires doivent être égales à 1 (Eq. (2.4)) :

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k = \sum_{k=1}^{N} X_k = 1, \tag{2.4}$$

la masse molaire moyenne du mélange, M, est alors définie en Eq. (2.5) :

$$M = 1/\sum_{k=1}^{N} Y_k/W_k, \tag{2.5}$$

— sa capacité calorifique à pression constante C_{p_k},

— son enthalpie massique (Eq. (2.6)) :

$$h_k = h_{s,k} + \Delta h^0_{f,k}, \tag{2.6}$$

avec $h_{s,k}$ l'enthalpie sensible de l'espèce et $\Delta h^0_{f,k}$ son enthalpie massique de formation.

Afin de fermer le système, une loi d'état est introduite. Dans notre cas, la pression totale, *i.e* la somme des pressions partielles, sera évaluée à l'aide de la loi des gaz parfaits établie en Eq. (2.7) :

$$P = \sum_{k=1}^{N} p_k = \sum_{k=1}^{N} \rho_k \frac{R}{W_k} T \tag{2.7}$$

où T est la température du mélange et $R = 8.314\ J/mol/K$ est la constante universelle des gaz parfaits. Ayant défini les caractères thermodynamiques d'un mélange multiespèces réactif, ce système évolue en temps et en espace suivant les lois de conservations introduites ci-dessous.

2.1.2 Équations de conservation

Les équations de Navier-Stokes généralisées régissent le comportement d'un fluide réactif et découlent des principes de conservation, de masse, de quantité de mouvement,

d'énergie et d'espèces. Dans le cas d'un mélange multiespèces, elles peuvent être écrites sous les formes décrites en Eq. (2.8), (2.9), (2.10) et (2.11) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho u_j u_i = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad \text{pour i} = 1, 2, 3, \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i E = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_i\left(p\delta_{ij} - \tau_{ij}\right) + q_j\right) + \dot{\omega}_T, \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho u_j Y_k = -\frac{\partial}{\partial x_j} J_{j,k} + \dot{\omega}_k \quad \text{pour k} = 1,\ \text{N}, \tag{2.11}$$

N représente le nombre d'espèces du mélange considéré. Les termes à gauche des équations représentent les termes instationnaires et convectifs de la densité ρ, de la vitesse u et de l'énergie totale E, correspondant à la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique. Les termes à droite représentent le terme visqueux τ, le terme de pression P, le terme de flux d'énergie q, le terme de flux d'espèces J et les termes sources d'espèces et d'énergie, $\dot{\omega}_k$ et $\dot{\omega}_T$. Afin de fermer ce système d'équations, plusieurs termes doivent être modélisés. Ces derniers sont de deux natures : les termes d'effets diffusifs et les termes sources de réaction.

Les termes diffusifs sont les suivants :

— **Tenseur des contraintes visqueuses** τ_{ij} ;

Le tenseur des contraintes visqueuses est défini par la loi de Newton en Eq. (2.12),

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j}\right) - \frac{2}{3}\mu\delta_{ij}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right), \tag{2.12}$$

où μ est la viscosité dynamique du mélange et δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

— **Flux de chaleur** q_i :

Le flux de chaleur (Eq. (2.13)) est composé des termes de diffusion de chaleur et de diffusion de l'enthalpie des espèces :

$$q_i = -\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} h_{s,k} J_{i,k}, \tag{2.13}$$

où λ est le coefficient de diffusion thermique. Le premier terme correspond à la diffusion directe de la chaleur et est exprimé par la loi de Fourier. Le second terme correspond lui au flux de chaleur causé par la diffusion des espèces et est donc spécifique des écoulements multiespèces.

— **Flux diffusif d'espèces** $J_{k,i}$:

Afin de calculer le flux diffusif d'espèces, la vitesse de diffusion des espèces $V_{k,i}$ est calculée à l'aide de la loi de Hirschefelder-Curtis [62] (Eq. (2.14)) :

$$Y_k V_{k,i} = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.14}$$

On notera que les effets de gradients de pression ou de température, aussi appelés effets Soret [50], sur la diffusion des espèces sont négligés. Cependant, la loi de conservation de la masse n'est pas forcément respectée dans l'Eq. (2.14) pour les mélanges de plus de deux espèces. Ainsi, il faut ajouter une vitesse de correction permettant d'assurer la conservation de la masse dans ces cas. On peut alors exprimer le flux diffusif d'espèces, défini par l'Eq. (2.15) :

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_{k,i}^c \right) \tag{2.15}$$

où D_k représente le coefficient de diffusion de l'espèce k et où $V_{k,i}^c$ représente la vitesse de correction pour la diffusion des espèces, définie en Eq. (2.16) [102] :

$$V_{i,k}^c = \sum_k D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{2.16}$$

Pour ce qui est de la chimie :

— **Termes sources chimiques** :

Dans un mélange composé de n_{spec} espèces qui réagissent par le biais de n_{reac} réactions, on peut définir le taux de réaction massique par l'Eq. (2.17) :

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{j=1}^{n_{\text{reac}}} (\nu''_{kj} - \nu'_{kj}) \mathcal{Q}_j \quad \text{pour} \quad k = 1, n_{\text{spec}} \tag{2.17}$$

où $\dot{\omega}_k$ décrit le taux de production de l'espèce k créé par les réactions chimiques. Si ce terme est négatif, on parle alors de destruction de l'espèce k. ν'_{kj} et ν''_{kj} représentent respectivement les coefficients stœchiométriques molaires des réactifs et des produits de l'espèce k dans la réaction j. $\mathcal{Q}_j$ correspond au taux d'avancement de la réaction j et est défini par l'expression Eq. (2.18) :

$$\mathcal{Q}_j = K_{fj} \prod_{k=1}^{n_{\text{spec}}} [X_k]^{n'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^{n_{\text{spec}}} [X_k]^{n''_{kj}}, \tag{2.18}$$

où n'_{kj} et n''_{kj} représentent respectivement les ordres direct et indirect de l'espèce k pour la réaction j. K_{fj} et K_{rj} représentent respectivement les constantes de réaction dans le sens direct et indirect. Ces deux dernières quantités peuvent être reliées en introduisant la constante d'équilibre K^j_{eq} (Eq. (2.19)), de sorte que :

$$K_{rj} = K_{fj}/K^j_{eq} \tag{2.19}$$

Avec,

$$K^j_{eq} = \left(\frac{p_0}{RT}\right)^{\Sigma_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S^0_j}{R} - \frac{\Delta H^0_j}{RT}\right) \quad \text{et} \quad K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{Ea_j}{RT}\right),$$

Ici, K_{fj} est obtenue à l'aide d'une loi d'Arrhenius. ΔS^0_j et ΔH^0_j sont respectivement les variations d'enthalpie et d'entropie pendant la réaction j. Ils sont définis par les Eqs. (2.20) et (2.21) :

$$\Delta H^0_j = h(T) - h(0) = \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj} W_k \left(h_{s,k}(T) + \Delta h^0_{f,k}\right) \tag{2.20}$$

$$\Delta S^0_j = \Sigma_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T), \tag{2.21}$$

où s_k est l'entropie de l'espèce k.

À partir du taux de réaction massique, on peut remonter à la chaleur relâchée lors de la combustion avec l'Eq. (2.22) :

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{n_{\text{spec}}} \Delta h^0_{f,k} \dot{\omega}_k, \tag{2.22}$$

Ayant détaillé les modèles diffusifs utilisés, diverses propriétés restent à spécifier. Ces dernières suivent des lois fermant des propriétés de transports. Pour évaluer ces propriétés, plusieurs approches simplifiées sont utilisées :

— La viscosité dynamique μ peut être évaluée à partir d'une loi de puissance (Eq. (2.23)) afin de prendre en compte sa dépendance à la variation de température [116] :

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^b, \tag{2.23}$$

où b dépend des propriétés du mélange et varie entre 0.5 et 1.

— Le nombre de Schmidt (Sc), qui compare la diffusivité de quantité de mouvement à la diffusivité massique pour chacune des espèces k, est usuellement considéré constant et exprimé par l'Eq. (2.24) :

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k}, \tag{2.24}$$

— De même, le nombre de Prandtl (Pr), qui compare la diffusion de la quantité de mouvement à la conduction thermique, est considéré comme constant de façon à obtenir l'Eq. (2.25) :

$$\mathrm{Pr} = \frac{\mu C_p}{\lambda}, \tag{2.25}$$

Ainsi, on peut obtenir les coefficients de diffusion (D_k) de chaque espèce :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho S_{c_k}}, \tag{2.26}$$

et les nombres de Lewis Lek (Eq. (2.27)) afin d'accéder aux caractéristiques de notre mélange :

$$Le_k = \frac{D_{\mathrm{th}}}{D_k} = \frac{S_{c_k}}{Pr}, \tag{2.27}$$

On note qu'ici, la diffusivité thermique du mélange (D_{th}) est obtenue par

l'Eq. (2.28) :

$$D_{\text{th}} = \frac{\lambda}{\rho C_p}, \tag{2.28}$$

Il est important de souligner que, pour grandement simplifier la modélisation chimique, certains modèles de combustion utilisent une approche de nombre de Lewis unitaire ($Le = 1$). Cette approche est cependant déconseillée lorsque l'on considère des mélanges où la diffusion moléculaire est très différente de la diffusion thermique, comme dans certains cas traités dans ce manuscrit, comme dans les chapitres 5 et 6.

2.2 Notions de combustion

Afin de correctement modéliser la combustion d'un mélange et de façon similaire à la section précédente, il est important d'introduire les équations qui réagissent les phénomènes d'oxydo-réduction et de définir des paramètres de mesures pour les caractéristiques des flammes laminaires et turbulentes.

Pour qu'un carburant s'enflamme, ce dernier a besoin d'établir une réaction d'oxydo-réduction en se mélangeant avec un oxydant. Il faut donc se placer dans des conditions précises de température (T_0), de pression (P_0) et de mélange (ϕ) initiales. L'expression globale de la réaction complète entre carburant et oxydant, *i.e* quand tout le carburant et l'oxydant se transforment en produits, est présentée en Eq. (2.29) :

$$\nu'_{\text{F}}\text{F} + \nu'_{\text{O}}\text{O} \rightarrow \text{Produits}, \tag{2.29}$$

où F représente le combustible et O l'oxydant ; ν'_{F} et ν'_{O} représentent respectivement leur coefficient stœchiométrique.
On parle d'un mélange aux conditions stœchiométriques quand la composition du mélange respecte l'Eq. (2.30) :

$$\left(\frac{Y_{\text{F}}}{Y_{\text{F}}}\right)_{\text{st}} = \frac{\nu'_{\text{O}} W_{\text{O}}}{\nu'_{\text{F}} W_{\text{F}}} = \text{s}, \tag{2.30}$$

où s correspond au rapport stœchiométrique. Sur ce principe, la notion de richesse ϕ est exprimée par l'Eq. (2.31) :

$$\phi = s\frac{Y_\mathrm{F}}{Y_\mathrm{O}} = \left(\frac{Y_\mathrm{F}}{Y_\mathrm{O}}\right) / \left(\frac{Y_\mathrm{F}}{Y_\mathrm{O}}\right)_\mathrm{st} \tag{2.31}$$

Dans le cas où $\phi < 1$, on parle de mélange pauvre puisque l'oxydant est en excès dans le mélange. Au contraire, dans le cas où $\phi > 1$, on parle de mélange riche ou de carburant en excès. Dans le cadre précis des explosions, seules les flammes prémélangées sont d'intérêt. La suite de cette section se focalise donc sur ce type de flammes (en opposition aux flammes de diffusion). Leurs principes de base sont donc détaillés ci-après : d'abord en détaillant la structure d'une flamme, puis en caractérisant sa vitesse ainsi que les effets s'y appliquant dans certains cas particuliers.

2.2.1 Structure d'une flamme prémélangée

Pour modéliser la structure d'une flamme prémélangée, il est possible de se ramener à des cas unidimensionnels pour simplifier les expressions des équations présentées dans la Section 2.1.2. Cette approche est très largement utilisée et permet de décrire la flamme comme une onde se propageant à une vitesse constante s_L^0, des gaz brulés ($_\mathrm{BG}$) vers les gaz frais ($_\mathrm{UG}$). La flamme est alors constituée de plusieurs zones schématisées en Fig. 2.1 :

- **La zone de préchauffage :** les réactifs sont préchauffés par diffusion, le flux thermique émanant directement de la zone de réaction.
- **La zone de réaction :** cette zone a une épaisseur δ_r très petite devant l'épaisseur de la zone de préchauffage et est le lieu où l'essentiel du dégagement de chaleur est réalisé, les réactifs se transformant en produits.
- **La zone de post-flamme :** la température est relaxée vers sa valeur adiabatique T_BG.

L'épaisseur de flamme peut alors être estimée. Plusieurs définitions existent :

- **L'épaisseur diffusive δ :**

  Elle est obtenue à partir de Eq. (2.34), et aboutie à l'Eq. (2.32) :

$$\delta \approx \frac{D_\mathrm{th}}{s_\mathrm{L}^0} \approx \sqrt{\frac{D_\mathrm{th}}{A_\mathrm{f}}}, \tag{2.32}$$

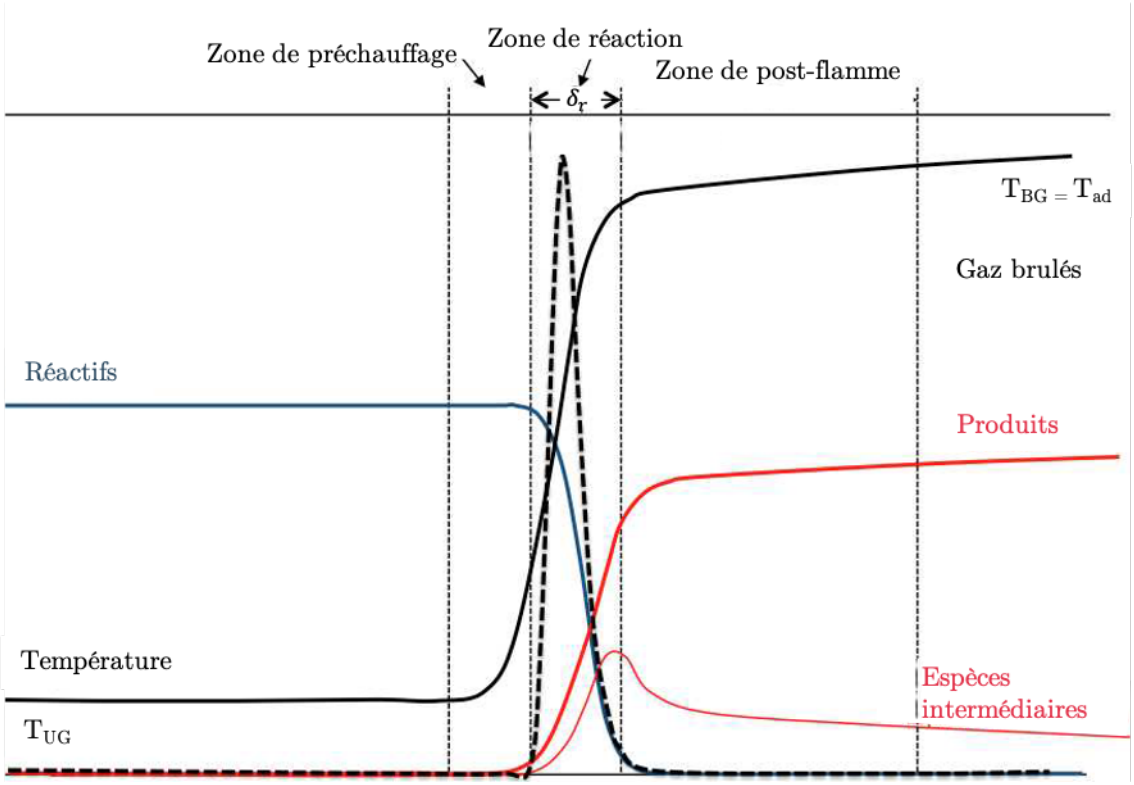


FIGURE 2.1 – Représentation schématique de la structure d'une flamme prémélangée. La concentration des produits et espèces intermédiaires est représentée en rouge et celle des réactifs est représentée en bleu. Adapté de [107].

Cette formulation est peu précise et ne donne qu'une idée grossière de l'épaisseur de la flamme. Elle peut toutefois être utile pour estimer la résolution du maillage avant calcul.

— **L'épaisseur thermique** δ_L^0 : cette dernière nécessite la connaissance du profil de température au travers de la flamme et s'exprime selon l'Eq. (2.33) :

$$\delta_L^0 = \frac{T_{BG} - T_{UG}}{\max\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)}, \tag{2.33}$$

— **L'épaisseur réactive** δ_r : cette épaisseur est une mesure de la distance couverte par le taux de réaction et est plus fine que δ_L^0. Elle est donc plus restrictive en termes de résolution de maillage.

Pour l'essentiel de ce manuscrit, c'est l'épaisseur de flamme thermique δ_L^0 qui sera utilisée pour caractériser l'épaisseur des flammes considérées et les contraintes associées en termes de résolution.

2.2.2 Notions de vitesses de flamme

Il est important de réaliser qu'il existe plusieurs définitions caractérisant la vitesse à laquelle une flamme laminaire se propage. En fonction du référentiel choisi, la flamme peut se propager à différentes vitesses et leurs définitions sont alors dissemblables.
Une première approche simplifiée se base sur la théorie des flammes laminaires planes [130]. On peut alors définir la vitesse d'un front de flamme laminaire plan relative aux gaz frais juste devant le front, elle est notée s_{L}^0 (Eq. (2.34)) est donnée par l'expression suivante :

$$s_{\mathrm{L}}^0 \approx \sqrt{D_{\mathrm{th}}\dot{\omega}_F}, \tag{2.34}$$

qui relie la diffusivité thermique du mélange, D_{th} et le terme source chimique du carburant $\dot{\omega}_F$ et traduit clairement l'équilibre réaction-diffusion constitutif de la structure de ces flammes.

Pour une description plus complète de la vitesse de propagation de front de flamme quelconque, il est important de définir une variable d'avancement, notée c, allant de 0 du côté des gaz frais, à 1 du côté des gaz brûlés. Celle-ci peut être respectivement basée sur la température ou la fraction massique d'espèce (Eq. (2.35)) :

$$c = \frac{T - T_{\mathrm{UG}}}{T_{\mathrm{BG}} - T_{\mathrm{UG}}} \quad \text{ou} \quad c = \frac{Y_{\mathrm{F}} - Y_{\mathrm{F}}^{\mathrm{UG}}}{Y_{\mathrm{F}}^{\mathrm{BG}} - Y_{\mathrm{F}}^{UB}}, \tag{2.35}$$

On peut alors définir localement la notion de normale à un front de flamme identifiée par une valeur fixée de c , notée $\vec{n}$ (Eq. (2.36)) :

$$\vec{n} = -\frac{\nabla c}{|\nabla c|} \tag{2.36}$$

À l'aide de ces relations, il est possible de distinguer différentes vitesses de flamme, pour une valeur de c donnée [102] :

— **Vitesse absolue** s_a **:** la vitesse du front de flamme par rapport à un référentiel

fixe, qui s'exprime avec l'Eq. (2.37) :

$$s_a = \vec{w}.\vec{n} = \frac{1}{|\nabla c|}\frac{\partial c}{\partial t}, \tag{2.37}$$

où $\vec{w}$ correspond à la vitesse de déplacement d'un point du front de flamme.

— **Vitesse de déplacement** s_d **:** la vitesse du front de flamme relative aux gaz réactifs devant lui. Elle est donc définie par l'Eq. (2.38) :

$$s_d = (\vec{w} - \vec{u})\,.\vec{n} = s_a - \vec{u}.\vec{n}, \tag{2.38}$$

— **Vitesse de consommation** s_c **:** la vitesse à laquelle les réactifs sont consommés par la flamme. Elle est donc uniquement basée sur les taux de réaction du fuel et est obtenue par l'Eq. (2.39) :

$$s_c = -\frac{1}{\rho_{\mathrm{UG}} Y_{\mathrm{F}}^{\mathrm{UG}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_{\mathrm{F}} \cdot dn, \tag{2.39}$$

La figure Fig. 2.2 montre les différentes définitions des grandeurs utilisées pour définir les vitesses de flamme absolue (s_a) et de déplacement (s_d). Il est évident que la notion de

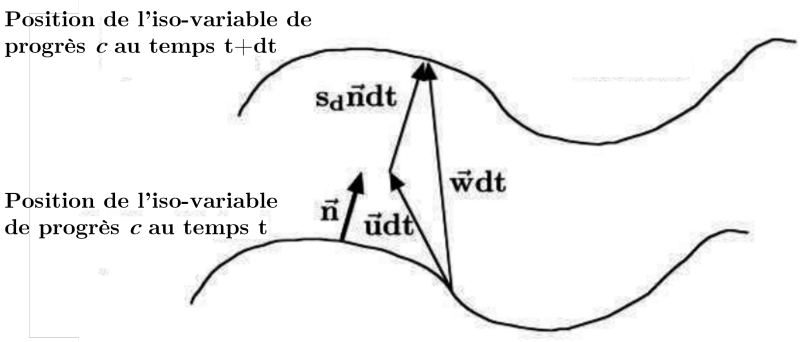


FIGURE 2.2 – Illustrations des vitesses de flammes pour une propagation d'un front de flamme. Adapté de [102]

vitesse pour un front réactif est complexe et revêt plusieurs interprétations en fonctions des définitions choisies.

2.2.3 Les effets de l'étirement sur la flamme

En effet, dans le cas d'une propagation de flamme dans un écoulement non-uniforme, cette dernière subit des effets de cisaillement et de courbure. Ces effets affectent les caractéristiques de flamme et peuvent être liés à l'étirement, noté κ, défini par l'Eq. (2.40) [91] :

$$\kappa = \frac{1}{A}\frac{dA}{dt}, \tag{2.40}$$

où A est la surface de la flamme étudiée. Dans le cas général d'une flamme étirée, il est difficile de prévoir ses caractéristiques. Sous certaines hypothèses, il est possible de définir les vitesses de déplacement (s_d) et de consommation (s_c) en fonction de l'étirement κ et de la vitesse de flamme laminaire s_{L}^0. Typiquement, l'analyse asymptotique aboutie à l'Eq. (2.41) pour des faibles niveaux d'étirement [18, 29] :

$$\frac{s_d}{s_{\mathrm{L}}^0} = 1 - \mathcal{L}_a^d\frac{\kappa}{s_{\mathrm{L}}^0} \quad \text{et} \quad \frac{s_c}{s_{\mathrm{L}}^0} = 1 - \mathcal{L}_a^c\frac{\kappa}{s_{\mathrm{L}}^0}, \tag{2.41}$$

où $\mathcal{L}_a^d$ et $\mathcal{L}_a^c$ sont les longueurs de Markstein pour les vitesses de déplacement et de consommation. Elles possèdent plusieurs formulations dans la littérature, mais dans le cas de mélanges pauvres, elles peuvent être obtenues par les Eqs (2.42) et (2.43) [31] :

$$\mathcal{L}_a^d = \frac{T_{\mathrm{BG}}}{T_{\mathrm{BG}}-T_{\mathrm{UG}}}\ln\left(\frac{T_{\mathrm{BG}}}{T_{\mathrm{UG}}}\right) + \delta\frac{1}{2}\beta(Le_{\mathrm{F}}-1)\frac{T_{\mathrm{BG}}}{T_{\mathrm{BG}}-T_{\mathrm{UG}}}\int_0^{\frac{T_{\mathrm{BG}}}{T_{\mathrm{BG}}-T_{\mathrm{UG}}}}\frac{\ln(1+x)}{x}dx, \tag{2.42}$$

$$\mathcal{L}_a^c = \delta\frac{1}{2}\beta(Le_{\mathrm{F}}-1)\frac{T_{\mathrm{BG}}}{T_{\mathrm{BG}}-T_{\mathrm{UG}}}\int_0^{\frac{T_{\mathrm{BG}}}{T_{\mathrm{BG}}-T_{\mathrm{UG}}}}\frac{\ln(1+x)}{x}dx \tag{2.43}$$

Dans ces expressions, δ est l'épaisseur diffusive de la flamme définie en Eq. (2.32).
Grâce à ces expressions, le nombre de Lewis du carburant apparaît comme jouant un rôle très important. On distingue alors trois cas :

— $Le_{\mathrm{F}} < 1$ **:** c'est notamment le cas de l'hydrogène. $\mathcal{L}_a^c$ devient alors négative et la vitesse de consommation s_c augmente linéairement avec l'étirement κ.

— $Le_{\mathrm{F}} \approx 1$ **:** c'est notamment le cas du méthane. Pour des étirements modérés,

l'épaisseur de flamme diminue mais la vitesse de consommation s_c n'augmente pas.

— $Le_F > 1$: c'est le cas du propane. $\mathcal{L}_a^c$ devient alors positive et la vitesse de consommation s_c diminue linéairement avec l'étirement κ.

Les gaz brûlés sont, eux aussi, affectés par ces effets d'étirement. En effet, dans le cas d'une flamme parfaitement sphérique, les effets de diffusion thermique entraînent une perte d'énergie, au contraire des effets de diffusion massique qui, eux, entraînent un gain d'énergie. Cela s'explique notamment par la forme concave du front de flamme. Ce phénomène est schématisé en Fig. 2.3. Un autre effet des nombres de Lewis non unitaires est

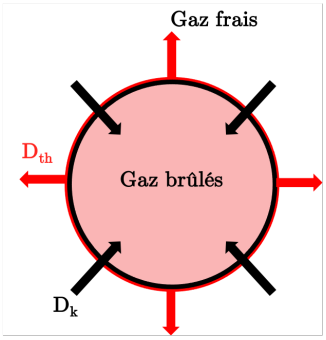


FIGURE 2.3 – Illustration de flux diffusifs dans le cas d'une flamme sphérique. Adapté de [107].

que la température des gaz brulés d'une flamme sphérique dépend du nombre de Lewis du carburant :

— $Le < 1$: comme $D_{\text{th}} < D_k$ et les pertes thermiques sont inférieures aux gains. La température des gaz brûlés est alors dite sur-adiabatique ($T_{\text{BG}} > T_{\text{ad}}$).

— $Le \approx 1$: comme $D_{\text{th}} \approx D_k$ et les deux effets se compensent.

— $Le > 1$: comme $D_{\text{th}} > D_k$ et les pertes thermiques sont supérieures aux gains. La température des gaz brûlés diminue alors ($T_{\text{BG}} < T_{\text{ad}}$).

Un dernier point est que pour une flamme sphérique, la courbure de la flamme diminue lorsque la flamme se propage et ces effets se dissipent. Pour une flamme faiblement étirée, on obtient alors l'Eq. (2.44) [31] :

$$\frac{T_{\text{BG}} - T_{\text{ad}}}{T_{\text{ad}}} = \left(\frac{1 - Le}{Le}\right) \frac{D}{{s_{\text{L}}^0}^2} \kappa, \tag{2.44}$$

avec D une diffusivité caractéristique.

Le dernier point d'importance lié aux effets des nombres de Lewis non unitaires avec certains carburants est que leur dynamique peut être fortement impactée par le biais d'instabilités comme discuté ci-après.

2.2.4 Instabilités de flammes

Il existe différents types d'instabilités qui peuvent influencer la structure d'une flamme. On sait aujourd'hui que ces instabilités peuvent participer à accélérer la flamme laminaire à des niveaux de vitesse très élevés, d'où leur importance dans le cadre des explosions. Certains de ces mécanismes sont intrinsèquement liés aux écoulements réactifs et d'autres apparaissent pour certaines compositions du mélange.

— **Instabilités de Darrieus-Landau (DL) :** ces instabilités, dites hydrodynamiques, sont générées dès lors que la flamme est soumise à des perturbations locales, et leur origine est liée à l'expansion des gaz brûlés caractéristiques de toute flamme. Lorsque le front flamme est légèrement perturbée, l'expansion des gaz brûlés a tendance à amplifier les perturbations [90]. La flamme est alors instable. Ces instabilités s'accroissent au fur et à mesure que la flamme se développe.

— **Instabilités thermodiffusives (TD)** Dans le cas où le nombre de Lewis du carburant, $Le_F < 1$, le flux d'espèce est plus important que le flux thermique. Cette différence de diffusion entraîne une variation locale de la richesse et ainsi une variation de vitesse de consommation locale. Ceci engendre une amplification des perturbations qu'un front de flamme peut rencontrer et mène donc à une instabilité qui prend la forme de structures cellulaires comme illustré en Fig. 2.4. Ces instabilités apparaissent à des échelles proches de celles de l'épaisseur de flamme [8].

2.3 Flammes prémélangées turbulentes

Durant la propagation d'une flamme laminaire, des mécanismes d'accélération (discutés en Section Section 2.4) entraînent souvent la génération de structures turbulentes dans l'écoulement devant la flamme. L'interaction d'un front de flamme avec la turbulence est un mécanisme d'accélération additionnel capable de faire passer le régime d'explosion

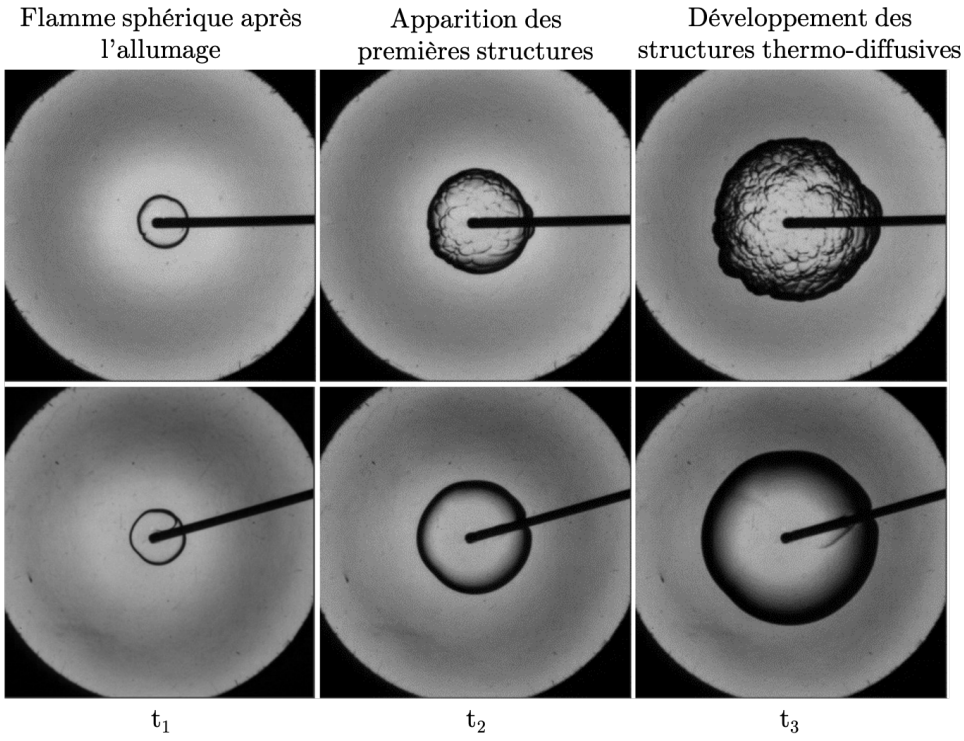


FIGURE 2.4 – Évolution d'une flamme sphérique d'hydrogène-air pauvre (ligne du haut) développant des instabilités thermodiffusives (ligne du haut) et d'une flamme sphérique de méthane/air sans instabilités (ligne du bas). Adapté de [81].

à des niveaux dangereux avec de conséquences souvent catastrophiques. C'est pourquoi il est important d'identifier les propriétés qui jouent un rôle crucial lors de l'interaction entre la flamme et la turbulence.

2.3.1 Propriétés et notions de turbulence

La transition d'un état laminaire à un état turbulent est caractérisée par une augmentation du nombre de Reynolds. Ce nombre adimensionnel compare les forces inertielles aux forces visqueuses et est défini par l'Eq. (2.45) :

$$Re = \frac{ul}{\nu}, \tag{2.45}$$

où u et l correspondent à la vitesse et à la longueur caractéristique de l'écoulement. ν correspond à la viscosité cinématique.

Pour une géométrie donnée, il existe un Nombre de Reynolds critique au-dessus duquel

l'écoulement est dit turbulent. Cette notion de turbulence est caractérisée par la génération de structures tourbillonnaires qui interagissent entre elles et transfèrent leur énergie des plus grandes aux plus petites échelles. Ces échelles sont notamment séparées en trois zones en fonction de leur nombre d'onde. Elles sont également caractérisées par leurs différents niveaux d'énergie cinétique turbulente. Ces zones sont présentées en Fig. 2.5, dans le spectre d'énergie pour une turbulence homogène et isotrope (THI)[105] :

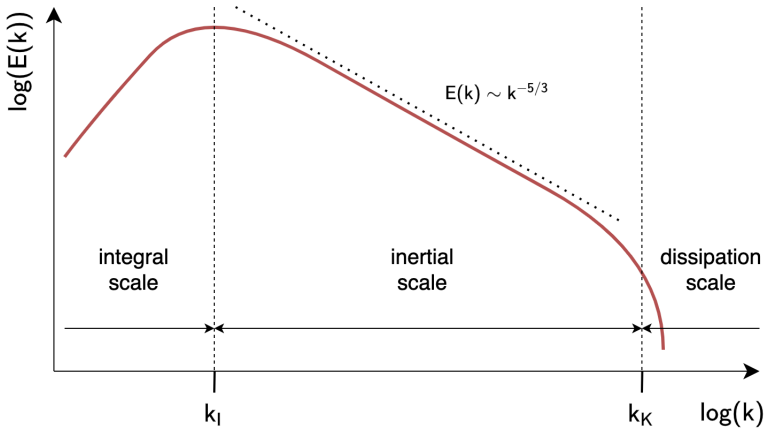


FIGURE 2.5 – Schéma du spectre d'énergie pour une THI. k_I représente la longueur d'onde de l'échelle de longueur intégrale de l'écoulement et k_K à l'échelle de Kolmogorov [79], correspondant à la plus petite échelle tourbillonnaire possible dans l'écoulement. Issu de [43]

- **La zone intégrale :** cette zone contient les plus grandes échelles tourbillonnaires qui sont aussi les plus énergétiques. À cette échelle intégrale l_t, les tourbillons ne sont pas affectés par les effets visqueux, mais par la géométrie.
- **La zone inertielle :** dans cette zone, les tourbillons de grandes échelles se rompent et transfèrent leur énergie aux tourbillons de plus petite échelle en suivant une loi en $k^{-5/3}$ dans le cas d'une THI [105].
- **La zone dissipative :** cette zone correspond aux plus petites échelles tourbillonnaires dites de Kolmogorov [105] l_K. À ce niveau, les forces inertielles et visqueuses se compensent et l'énergie cinétique turbulente est dissipée en chaleur.

La génération de cette turbulence peut avoir un effet non négligeable sur la flamme en affectant sa structure, la rendant turbulente.

2.3.2 Régimes de combustion turbulente

Lorsqu'une flamme interagit avec un écoulement turbulent, on parle de combustion turbulente [102]. Différentes interactions sont alors possibles et il faut comparer certaines grandeurs caractéristiques de flamme avec celles de l'écoulement turbulent pour les classifier. Il est notamment possible de comparer les temps caractéristiques de flamme, τ_c, à ceux de la turbulence, τ_t et τ_K. Plusieurs définitions et ratios sont alors possibles. Typiquement, on peut avoir :

— Temps caractéristique chimique de la flamme τ_c (Eq. (2.46)) :

$$\tau_c = \frac{\delta_{\mathrm{L}}^0}{s_{\mathrm{L}}^0}, \tag{2.46}$$

— Temps caractéristique de la turbulence à l'échelle intégrale, τ_t (Eq. (2.47)) :

$$\tau_t = \frac{l_t}{u'(l_t)}, \tag{2.47}$$

où $u'(l_t)$ correspond à la vitesse des tourbillons à l'échelle intégrale l_t ;

— Temps caractéristique de la turbulence à l'échelle de Kolmogorov, τ_K (Eq. (2.47)) :

$$\tau_K = \frac{l_K}{u'(l_K)}, \tag{2.48}$$

où $u'(l_K)$ correspond à la vitesse des tourbillons à l'échelle de Kolmogorov l_K.

À partir de ces temps caractéristiques, il est possible de définir des nombres adimensionnels afin de comparer différents régimes de combustion turbulente. On note en particulier :

— **Le nombre de Damköhler** Da **:** compare le temps caractéristique chimique de la flamme au temps caractéristique de la turbulence à l'échelle intégrale et est défini

par l'Eq. (2.49) :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t}{\delta_{\mathrm{L}}^0} \frac{s_{\mathrm{L}}^0}{u'(l_t)}. \tag{2.49}$$

— **Le nombre de Karlovitz** Ka **:** compare le temps caractéristique de la turbulence à l'échelle de Kolmogorov au temps caractéristique chimique de la flamme et est défini par l'Eq. (2.50) :

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{u'(l_K)}{s_{\mathrm{L}}^0} \frac{\delta_{\mathrm{L}}^0}{l_K} = \left(\frac{l_t}{\delta_{\mathrm{L}}^0}\right)^{-1/2} \left(\frac{u'(l_t)}{s_{\mathrm{L}}^0}\right)^{3/2}. \tag{2.50}$$

Notons que l'on peut relier les nombres de Damköhler et de Karlovitz en utilisant le nombre de Reynolds turbulent Re_t, à travers lEq. (2.51) :

$$Re_t = \frac{u'(l_t) l_t}{\nu} = Da^2 Ka^2. \tag{2.51}$$

Grâce à cette relation, on peut caractériser les frontières des différents régimes de combustion turbulente, comme schématisés en Fig. 2.6 [102].

— **Régime de flamme laminaire** $(Re_t < 1)$ **:** la flamme n'est pas du tout ou que très légèrement plissée et l'écoulement est laminaire.

— **Régime de flamme turbulente** $(Re_t > 1)$ **:** il existe différents régimes de flamme turbulente :

  — **Régime de flammelette** $(Ka < 1)$ **:** $\tau_c < \tau_K$ et l'épaisseur de flamme est plus petite que les structures turbulentes à l'échelle l_K. Deux types de régimes de flammelette existent alors :

    — **Régime de flammelette plissée** $(u'(l_t)/s_{\mathrm{L}}^0 < 1)$ **:** dans ce cas, les structures turbulentes ne sont pas assez énergétiques pour plisser la flamme au point d'engendrer des interactions avec le front de flamme.

    — **Régime de flammelette ondulée** $(u'(l_t)/s_{\mathrm{L}}^0 > 1)$ **:** dans ce cas-là, la

turbulence est assez forte pour plisser la flamme et ainsi créer des poches de gaz frais et de gaz brulés.

— **Régime de flamme épaissie-plissée** ($Ka > 1$, $Da > 1$) **:** $\tau_c > \tau_K$ et les structures tourbillonnaires à l'échelle intégrale l_t sont plus petites que l'épaisseur de flamme δ_{L}^0. Dans ce cas, ces structures peuvent aussi modifier la structure interne de la flamme en épaississant la zone de préchauffage et viennent accroître les transferts thermiques.

— **Régime de flamme épaissie** ($Ka > 100$) **:** $\tau_c > \tau_K$ et les structures tourbillonnaires à l'échelle de Kolmogorov l_K sont plus petites que l'épaisseur réactive δ_r. Dans ce cas-là, les structures tourbillonnaires plissent toujours la flamme, mais viennent également modifier la structure interne de la flamme, incluant la fine zone réactive.

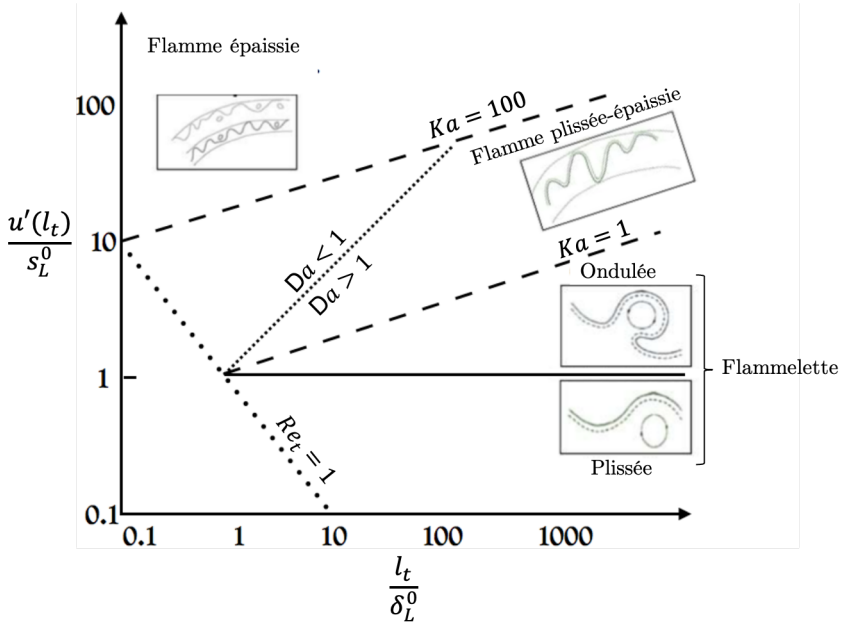


FIGURE 2.6 – Diagramme des régimes de combustion turbulente en fonction des nombres caractéristiques Re_t, Da et Ka [100]. Illustrations des différentes structures de flamme correspondantes. Adapté de [42].

Cette classification et les limites des régimes sont uniquement qualitatives et dépendent d'un grand nombre d'hypothèses. Elle permet notamment d'avoir une première approximation du régime dans lequel la flamme peut se trouver. Pour avoir une idée plus précise, des diagrammes modifiés ont été développés en se basant sur l'interaction entre une

flamme et un tourbillon, aussi appelé vortex. À partir d'expérimentations et de DNS, des diagrammes spectraux [103, 111] ont été construits et plusieurs limites ont été plus clairement identifiées et sont très différentes de celles obtenues précédemment, comme illustré en Fig. 2.7. Dans ce diagramme modifié, il existe notamment une limite de coupure à partir de laquelle les structures tourbillonnaires n'ont plus d'effet significatif sur la forme et la structure de la flamme, ainsi qu'une limite d'extinction pour laquelle les structures de fortes intensités vont venir éteindre la flamme.

L'impact principal de ces différents régimes est un changement des vitesses caractéristiques dues aux interactions avec la turbulence comme détaillé ci-après.

2.3.3 Définition de vitesse de flamme turbulente

Comme pour une flamme laminaire, il est possible de définir une vitesse de flamme turbulente. Cependant, cela est bien plus complexe de par le grand nombre d'effets à prendre en compte et les différents régimes de combustion turbulente à considérer. Une méthode couramment utilisée dans le cadre du régime de flamme plissée est d'uniquement prendre en compte l'augmentation du taux de consommations des réactifs causée par l'augmentation de la surface de flamme, générée lors de l'interaction entre la flamme et les grandes structures turbulentes. En effet, la surface d'une flamme plissée augmente, ce qui induit directement une augmentation de la vitesse de propagation du front de flamme par effet de surface. On peut alors définir la vitesse de propagation du front de flamme turbulent par s_T donc l'expression est donnée en Eq. (2.52) :

$$s_T = s_{\mathrm{L}}^0 \frac{A_T}{A}, \tag{2.52}$$

où A est la surface de flamme moyenne, A_T la surface totale de flamme plissée et s_{L}^0 la vitesse de flamme laminaire comme représentés en Fig. 2.8. La vitesse de flamme turbulente dépend alors du modèle de combustion turbulente utilisé et peut prendre différentes formes. Ce point est abordé plus en détails en Section 3.2.2.

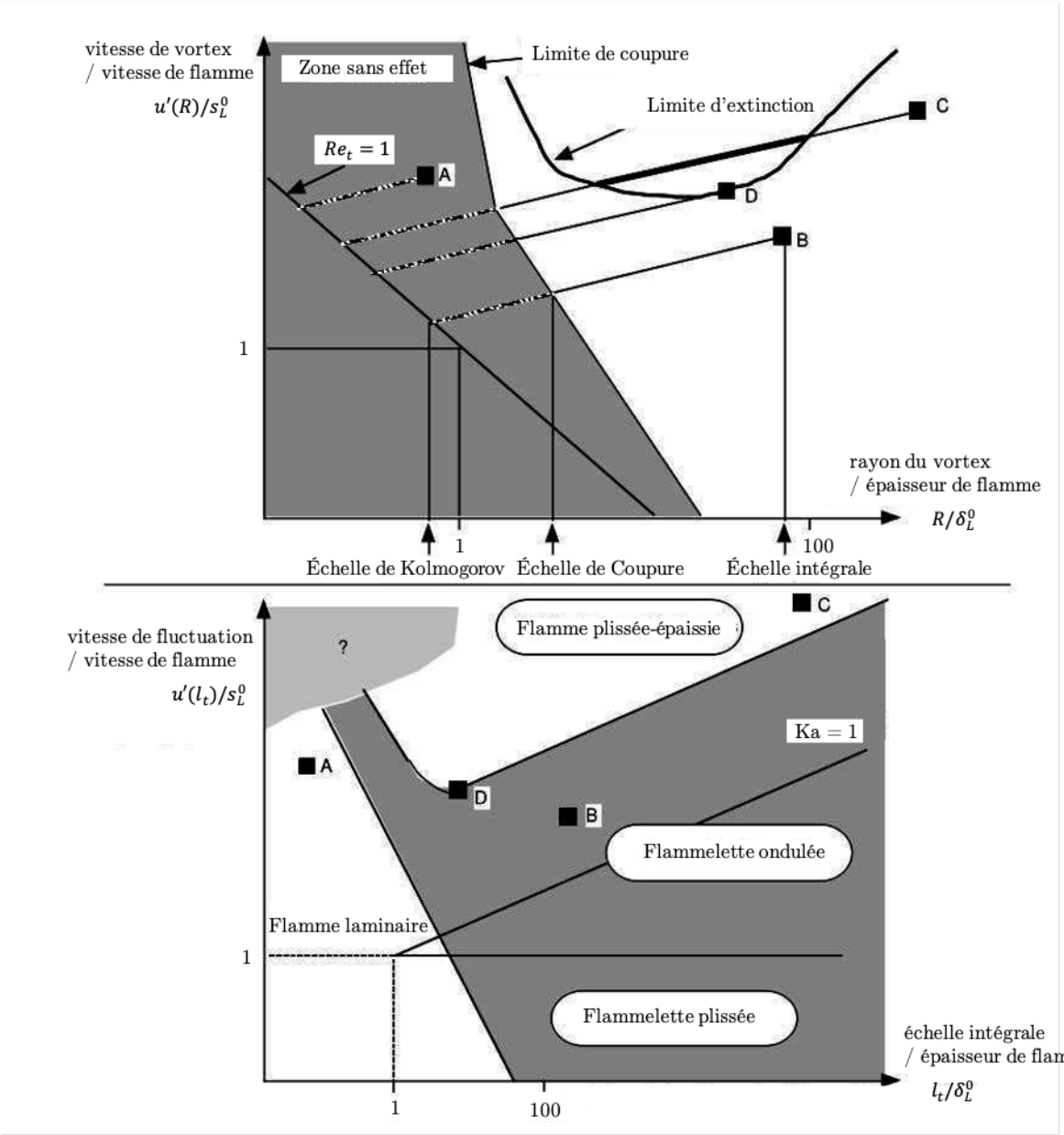


FIGURE 2.7 – Haut : diagramme spectral pour flamme vortex. Bas : diagramme de combustion turbulente correspondant. Les points A, B, C et D correspondent à différents champs turbulents de tailles caractéristiques et d'intensités différentes. Adapté de [102].

2.4 Particularité des explosions en milieu obstrué et confiné

Dans le contexte de la sécurité industrielle, la variable clé à anticiper est la surpression, laquelle est principalement responsable des effets destructeurs et est influencée par le phénomène d'accélération de la flamme. En simplifiant le problème à sa forme intégrale,

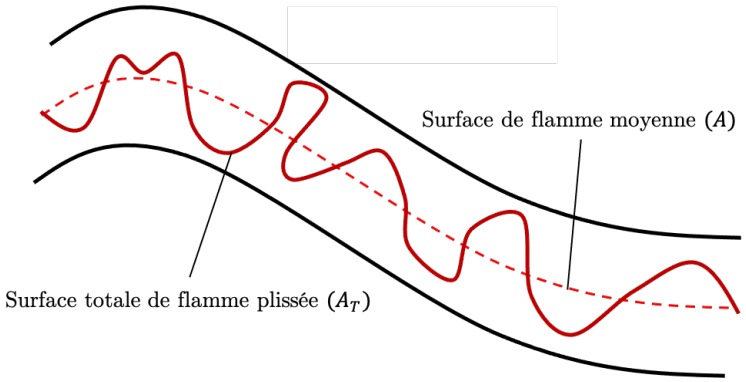


FIGURE 2.8 – Illustration d'une flamme plissée par la turbulence. La ligne en trait continu représente la surface totale de flamme plissée A_T et la ligne discontinue la surface de flamme moyenne A. Adapté de [107].

le processus de génération de surpression par une flamme se propageant dans un domaine avec une surface ouvert S_{out} peut être décrit par l'Eq. (2.53) [107]. Il est important de noter que cette équation prend en compte l'évolution de la pression moyenne dans un volume donné en considérant une pression homogène dans tout le volume. Une hypothèse de parois adiabatiques est également utilisée ici.

$$\boxed{\frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{\gamma-1}P\right)_{\text{mean,ch}} \,.\, V_{\text{ch}}} = \boxed{\dot{\omega}_{T_{\text{mean,ch}}} \,.\, V_{\text{ch}}} - \boxed{(C_p \rho T U_n)_{\text{mean,S}_{\text{out}}} \,.\, S_{\text{out}}} \qquad (2.53)$$

L'évolution temporelle de la surpression (noir) est donc dictée par la différence entre un terme proportionnel au taux de dégagement de chaleur volumique moyen (rouge) et un terme proportionnel au flux sortant (bleu), par les évents par exemple. Ce dernier étant nul dans des configurations entièrement closes. Le terme source $\dot{\omega}_{T_{\text{mean,ch}}}$ augmente notamment lorsque la flamme est plissée par la turbulence. Ciccarelli et Dorofeev [28] ont proposé une classification des principaux mécanismes d'accélération de flamme, et donc de l'augmentation de $\dot{\omega}_{T_{\text{mean,ch}}}$, dans le contexte des explosions, allant de l'expansion initiale des gaz à la situation critique de transition, de la déflagration à la détonation (DDT). D'un point de vue phénoménologique, deux phases sont à distinguer lorsqu'une flamme se propage :

— une phase laminaire,

— une phase turbulente,

— une phase de transition à la détonation.

Ces trois phases sont détaillées ci-après.

2.4.1 Phase de flamme laminaire

Cette phase débute directement après l'allumage d'un prémélange inflammable. La flamme évolue alors dans un écoulement laminaire et n'est pas plissée. Pendant sa phase laminaire, la flamme est principalement accélérée par l'expansion des gaz brûlés et par les instabilités intrinsèques de Darrieus-Landau. D'autres instabilités, comme les instabilités thermodiffusives, peuvent aussi accélérer la flamme, en fonction des caractéristiques du mélange et de la géométrie, comme expliqué en Section 2.2.4.

Dans la phase de propagation laminaire, il est possible d'évaluer l'accélération de la flamme lors de son expansion thermique. En effet, si l'on néglige les effets d'étirement, l'expansion des gaz brûlés et la vitesse de flamme résultante sont alors définies par cette l'Eq. (2.54) :

$$u_{\mathrm{BG}} = s_{\mathrm{L}}^{0} \frac{\rho_{\mathrm{UG}}}{\rho_{\mathrm{BG}}} = \Theta s_{\mathrm{L}}^{0}, \tag{2.54}$$

où u_{BG} est la vitesse d'expansion des gaz brûlés et Θ le taux d'expansion (Fig. 2.9. La flamme se propage alors sphériquement jusqu'à subir les effets de confinement causés par la présence de parois. Elle va alors prendre une forme de doigt (finger shape). Dans le cas de géométries cylindriques ou axisymétriques, Bychkov et al. [20] a établi des relations théoriques (Eqs (2.55) et (2.56)) qui permettent de caractériser la vitesse absolue du front de flamme, s_{tip}, en se basant sur la position du point le plus avancé de la flamme, x_{tip} ainsi que la position des côtés de la flamme, r_{skirt} [20].

$$\frac{dr_{skirt}}{dt} = s_{\mathrm{L}}^{0} + C(R^2 - r_{skirt}^2), \tag{2.55}$$

$$s_{tip} = \frac{dx_{tip}}{dt} = \Theta s_{\mathrm{L}}^{0} + 2C r_{skirt} x_{tip}, \tag{2.56}$$

avec $C = (\Theta - 1)s_{\mathrm{L}}^{0}/R^2$ et R le rayon du cylindre. Selon ces expressions, la vitesse radiale ($\frac{dr_{skirt}}{dt}$) de la flamme diminue lorsqu'elle s'approche des parois ($r_{skirt} \longrightarrow R$). Lorsque cette vitesse commence à réduire du fait du blocage des gaz frais entre la paroi et le front de flamme, la vitesse axiale (s_{tip}), elle, continue d'augmenter. Cela a tendance à étendre

la flamme dans la direction longitudinale. Cette augmentation de vitesse de la "tête de flamme" s'arrête quand les côtés de la flamme touchent les parois, et ce front évolue le long du canal, comme présenté en Fig. 2.9.

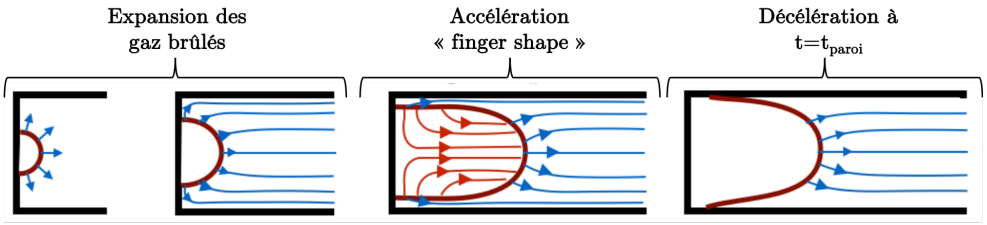


FIGURE 2.9 – Illustration de la transition de l'expansion de flamme vers l'accélération "finger-shape", puis jusqu'à la décélération quand la flamme touche les parois ($t = t_{paroi}$). Adapté de [42].

Ce mécanisme d'élongation du front de flamme constitue le premier promoteur d'accélération. Il est exponentiel en temps mais limité aussi en temps puisque l'accélération s'arrête subitement lorsque les parties latérales de la flamme touchent les parois latérales.

2.4.2 Phase de transition de la flamme vers le régime turbulent

Lors de la propagation de la flamme, cette dernière agit comme un piston perméable poussant les gaz frais devant elle. L'interaction de ses gaz frais en mouvement avec des obstacles peut alors entraîner la création de structures tourbillonnaires de fortes intensités autour et dans le sillage d'obstacles, faisant passer l'écoulement d'un régime laminaire à un régime turbulent. Lorsque la flamme passe autour de ces mêmes obstacles, elle subit un fort plissement par l'interaction avec les structures tourbillonnaires, comme illustré en Fig. 2.10. Dans ce cas de figure, l'accélération de flamme est due à deux mécanismes :

— **L'interaction Flamme-Vortex :** cette interaction engendre une augmentation de la surface de flamme qui augmente la consommation de combustible. Cette interaction a été détaillée en Section 2.3.2.

— **La contraction de l'écoulement :** Les obstacles n'ont pas juste un effet de génération de turbulence, mais génèrent aussi une accélération de l'écoulement par contraction comme illustrée en Fig. 2.11. Lors de leur passage au travers une contraction de section, comme entre des obstacles, un fort gradient de vitesse est créé et une zone de recirculation se forme derrière ces derniers. Quand le front de

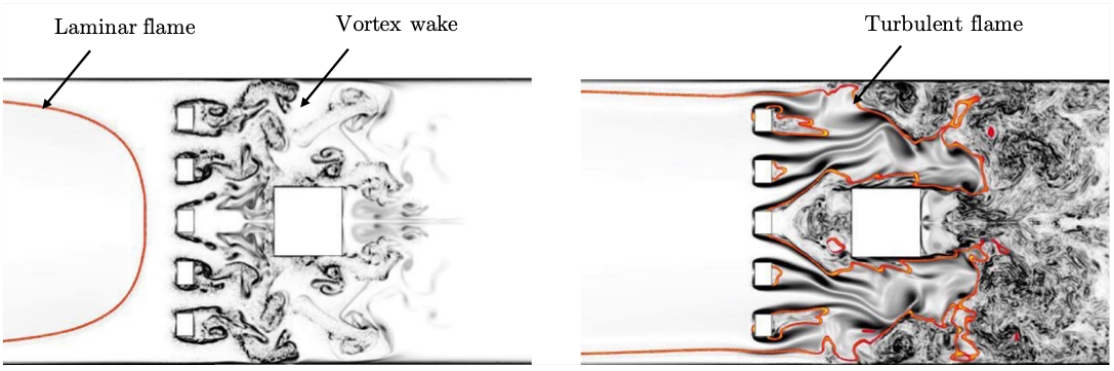


FIGURE 2.10 – Transition de la flamme d'un état laminaire à un état turbulent, lors de son passage à travers une rangée d'obstacles. Adapté de [124].

flamme arrive au niveau de cette contraction, elle est alors aspirée par l'écoulement et subit un fort étirement, ce qui contribue notamment à l'allonger et donc à augmenter sa surface. Cette augmentation de surface amène directement à une accélération de la flamme. Lorsque la flamme passe les obstacles, elle rencontre en outre des poches de gaz frais présentes dans les zones de recirculation derrière ces derniers, engendrant une propagation dans le sens transverse.

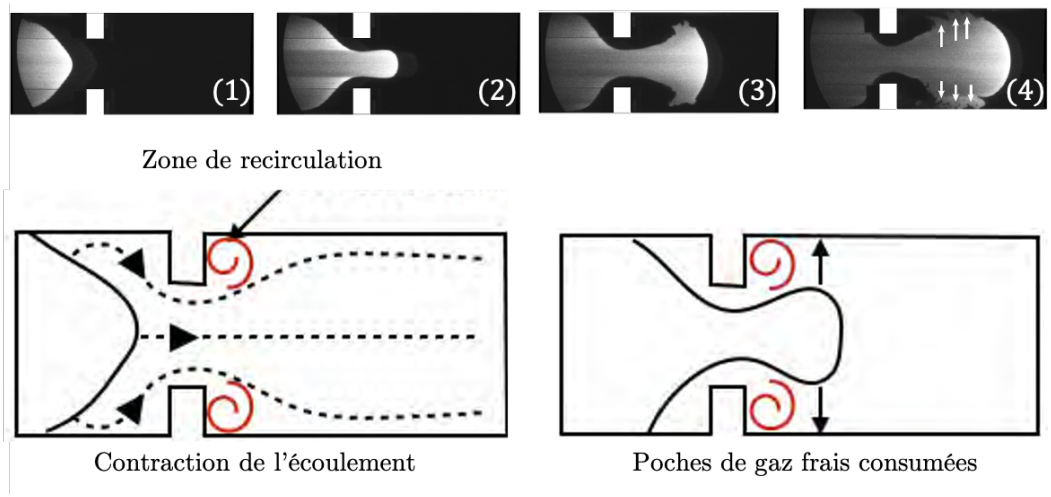


FIGURE 2.11 – Visualisation du mécanisme de contraction de l'écoulement à travers des obstacles. (1) La flamme laminaire arrive au niveau de l'obstacle. (2) La flamme est aspirée par l'écoulement et est étirée. (3) La tête de flamme a passé l'obstruction et interagit avec la turbulence. (4) La flamme consume les poches de carburant formées dans la zone de recirculation. Adapté de [42].

Ces processus d'accélération de flammes, lorsqu'ils sont intenses et/ou répétées, peuvent générer de fortes ondes de compressions, voire des chocs se propageant devant la flamme. Ces derniers ont des effets dévastateurs sur les structures et sont

souvent à l'origine des explosions catastrophiques. Il existe aussi un phénomène encore plus dévastateur qui a lieu suite à des phases d'accélération de flammes particulièrement violentes : la transition de la déflagration à la détonation. Ce phénomène mène à des niveaux de surpression dangereusement élevés contre lesquels les bâtiments ne sont que rarement dimensionnés. Prédire clairement les conditions menant à la DDT afin de l'éviter reste fondamental puisque étant le régime d'explosion le plus destructeur et dangereux. De nombreuses études ont été menées spécifiquement avec cet objectif, pour différentes complexités de configurations, et des critères de DDT ont été proposés [27]. Ce phénomène ne sera toutefois pas étudié en détail dans ce manuscrit, ce dernier se concentrant sur des applications de déflagrations.

2.5 Conclusions intermédiaires

Bien qu'une grande partie de la théorie autour de ces explosions soit connue et que les différents mécanismes d'accélération de flamme soient documentés, simuler de telles configurations est aujourd'hui très complexe de par la différence entre la grande gamme d'échelle des phénomènes physiques en jeu ($\approx$ mm) et celle des géométries industrielles étudiées ($\approx$ m). La réalisation de simulations d'explosions capables de prédire les différents phénomènes mentionnés ci-dessus nécessite le développement de méthodes haute-fidélité spécifiques et discutés ci-après.

Chapitre 3

Bases théoriques de modélisation pour la simulation aux grandes échelles d'explosions

Pour permettre la simulation précise des phénomènes d'explosion, il est nécessaire de passer par l'utilisation de modèles permettant la résolution de l'écoulement réactif. Ainsi, l'approche LES utilisées dans ce manuscrit est d'abord détaillée. Ensuite, les autres modélisations portant respectivement sur la turbulence et sur la combustion sont présentées et justifiées. Enfin, le solveur utilisé pour les simulations des prochains chapitre et ses particularités sont introduites

3.1 Le formalisme de la simulation aux grandes échelles (LES)

La simulation aux grandes échelles (LES) repose sur une opération de filtrage spatial des équations de Navier-Stokes. La LES consiste alors à 1) résoudre les équations de Navier-Stokes filtrées, et 2) modéliser les termes de sous-maille, c'est-à-dire les phénomènes qui prennent place à une échelle plus petite que la maille. Cette approche a été développée dans le cadre des écoulements turbulents. Elle s'appuie sur la notion de cascade dans un écoulement turbulent introduite par Kolmogorov. Dans cette vision, les petites échelles ont un rôle de transfert et dissipation de l'énergie cinétique turbulente, avec un caractère universel, indépendant de la structure des plus grandes échelles de l'écoulement. Cette généricité permet la construction de modèles de sous-maille valables dans une large gamme d'écoulements.

L'opération de filtrage introduit la notion d'échelle du filtre, notée Δ. En pratique, l'opération de filtre n'est pas explicite, mais un résultat de la discrétisation des champs à résoudre sur un maillage : la taille du filtre est alors de l'ordre de la taille caractéristique

des éléments du maillage. D'un point de vue théorique, cette opération filtrage peut être formalisée pour une quantité f donnée par l'expression suivante :

$$\overline{f} = \int f(x')G_{\Delta}(x - x')dx'. \tag{3.1}$$

Le noyau du filtre, noté G_{Δ}, est souvent considéré Gaussien [105]. Dans le cas d'écoulements compressibles, l'opération de filtrage de Favre, qui introduit une pondération par la masse volumique, permet d'éviter l'introduction de termes supplémentaires liés à la variation de masse volumique qu'il faudrait alors modéliser. Elle est définie par :

$$\bar{\rho}\widetilde{f} = \int \rho f(x')G_{\Delta}(x - x')dx'. \tag{3.2}$$

Celle-ci est donc préférée et elle sera utilisée dans le reste de ce manuscrit. La quantité f peut alors être décomposée en une composante résolue filtrée et une composante dite de sous-maille :

$$\widetilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}} \quad \text{et} \quad f = \widetilde{f} + f''. \tag{3.3}$$

Il est important de souligner que, contrairement à la modélisation RANS, $\widetilde{\widetilde{f}} \neq \widetilde{f}$ et $\widetilde{f''} = \widetilde{f} - \widetilde{\widetilde{f}} \neq 0$.

Enfin, il est important de noter que la résolution des équations de Navier-Stokes se fait via intégration volumique des équations de conservation locales (Section 2.1.2). Ainsi, le filtrage des équations de Navier-Stokes nécessite de commuter l'opérateur de filtrage et l'opérateur de dérivée partielle. Cette commutation n'étant pas valide dans le cas général, elle donne lieu à une erreur de commutation. Celle-ci est généralement négligée. Ce point est notamment discuté en Section 4.4.4.

3.1.1 Équations de Navier-Stokes filtrées

En appliquant l'opération de filtrage de Favre sur les équations de Navier-Stokes, on obtient alors les équations de conservation utilisées dans la LES [102], définie par les équations suivantes :

Équation de conservation de la masse (continuité)

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_j}{\partial x_j} = 0. \tag{3.4}$$

Équations de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j\right)\right] - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau}_{ij}}{\partial x_j}, \quad \text{pour i} = 1, 2, 3. \tag{3.5}$$

Équation de conservation de l'énergie

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{E}}{\partial x_i} = &-\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\overline{\rho}\left(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u}_i\widetilde{E}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda\overline{\frac{\partial T}{\partial x_i}}\right) \\ &- \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\sum_{k=1}^{N} h_{s,k}J_{i,k}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{u_i\left(p\delta_{ij} - \tau_{ij}\right)}\right) + \dot{\omega}_{\mathcal{T}}.\end{aligned} \tag{3.6}$$

Équations de conservation de l'espèce chimique k

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{Y}_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\overline{\rho}\left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u}_i\widetilde{Y}_k\right)\right] - \frac{\partial \overline{J_{i,k}}}{\partial x_i} + \overline{\omega}_k \quad \text{pour k} = 1,\ \text{N}. \tag{3.7}$$

Les termes de flux turbulents, d'enthalpie et d'espèces sont prédominants faces aux termes de flux diffusifs laminaires. Ces derniers peuvent donc être négligés. En pratique, ils sont exprimés à partir des gradients résolus, de ce qui permet de dégénérer correctement

vers le comportement DNS quand la taille de filtre tend vers zéro. On obtient alors les expressions suivantes, respectivement pour les différents flux diffusifs laminaires d'espèce et d'énergie :

$$\overline{J_{i,k}} = -\overline{\rho}\left(\overline{D_k}\frac{W_k}{W}\frac{\partial\widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i^c}\right), \quad \overline{\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}} = \overline{\lambda}\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_i}, \text{ et } \quad \overline{\sum_{k=1}^{N} h_k J_{i,k}} = \sum_{k=1}^{N}\widetilde{h_k}\overline{J_{i,k}}, \quad (3.8)$$

$$\text{avec } \widetilde{V_i^c} = \sum_{k=1}^{n}\overline{D_k}\frac{W_k}{W}\frac{\partial\widetilde{X_k}}{\partial x_i}.$$

3.1.2 Modèles de fermeture des équations de Navier-Stokes filtrées

En raison de la non-linéarité des équations de Navier-Stokes, des termes croisés apparaissent dans les équations filtrées qui nécessitent une modélisation dédiée. Ces modèles, dits de fermeture, ont une grande importance pour représenter la physique des échelles de sous-maille et garantir un comportement correct des simulations LES.

Le tenseur de Léonard

Le tenseur de Léonard est défini par l'expression :

$$\widetilde{(\widetilde{u_i}\widetilde{u_j})} - \widetilde{u_i}\widetilde{u_j}. \quad (3.9)$$

Le modèle utilisé est souvent issu des modèles classiques développés pour des cas non réactifs et n'intègre donc pas les effets de termes sources tels que le dégagement de chaleur. La modélisation s'appuie sur l'hypothèse de Boussinesq (le flux est proportionnel au gradient de la quantité), de façon analogue au tenseur des contraintes visqueuses [105] :

$$\widetilde{(\widetilde{u_i}\widetilde{u_j})} - \widetilde{u_i}\widetilde{u_j}. = -\mu_{sgs}\left(\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\widetilde{u_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\widetilde{u_k}}{\partial x_k}\right), \quad (3.10)$$

avec μ_{sgs} la viscosité dynamique turbulente de sous-maille, qui est évalué par un modèle dédié. Pour l'ensemble des cas présentés dans ce manuscrit, le modèle WALE [98] (pour Wall-Adapting Local Eddy-viscosity) est utilisé, de par sa bonne réponse asymptotique aux parois, mais également car il ne produit pas de viscosité turbulente dans le cas d'un cisaillement pur ni d'une dilatation pure. Ce point est notamment important dans des contextes d'écoulements avec de fortes ondes de compressions, voire des chocs, comme c'est le cas pour les explosions. La viscosité cinématique turbulente est alors définie par l'Eq. (3.11) :

$$\nu_{sgs} = (C_w \Delta)^2 \frac{(s^d_{ij} s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S_{ij}}\widetilde{S_{ij}})^{5/2} + (s^d_{ij} s^d_{ij})^{5/4}}, \tag{3.11}$$

$$\text{avec } s^d_{ij} = \frac{1}{2}(\widetilde{g_{ij}}^2 + \widetilde{g_{ji}}^2) - \frac{1}{3}\widetilde{g_{kk}}^2 \delta_{ij},$$

où $\widetilde{g_{ji}}$ représente le tenseur de gradient de vitesse résolu et $\widetilde{S_{ij}}$ sa partie symétrique, aussi appelée le taux de déformation. C_w est un coefficient du modèle.

Les termes de flux turbulents d'espèces et d'enthalpie

Le terme de flux turbulent de fraction massique de l'espèce k est défini par l'expression (3.12) :

$$\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i}\widetilde{Y_k}, \tag{3.12}$$

et le terme de flux turbulents d'enthalpie est défini par l'expression (3.13) :

$$\widetilde{u_i h_t} - \widetilde{u_i}\widetilde{h_t}. \tag{3.13}$$

Ces termes sont généralement modélisés de façon analogue aux flux turbulents de quantité de mouvement à l'aide des gradients résolus. Les flux turbulents de sous-maille d'espèces sont définis par :

$$\overline{\rho}(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i}\widetilde{Y_k}) = \overline{J_{i,k}}^t = -\overline{\rho}\left(\overline{D_k^t}\frac{W_k}{W}\frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i^{c,t}}\right), \tag{3.14}$$

avec $\overline{D_k^t} = \frac{\nu_{sgs}}{Sc_k^t}$, le coefficient de diffusion massique turbulent.
Sc_k^t représente le nombre de Schmidt (Eq. (2.24)) turbulent de l'espèce k. La vitesse de correction (Eq. (2.16)) turbulente $\widetilde{V_i^{c,t}}$ est définie par l'Eq. (3.15) :

$$\widetilde{V_i^{c,t}} = \sum_{k=1}^{N} \overline{D_k^t}\frac{W_k}{W}\frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k}\widetilde{V_i^{c,t}}, \tag{3.15}$$

et le terme de flux turbulent d'enthalpie par l'Eq. (3.16) :

$$\overline{\rho}(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i}\widetilde{E}) = -\lambda^t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \widetilde{h_{S,k}}\overline{J_{i,k}}^t, \tag{3.16}$$

avec $\lambda^t = \frac{\mu_{sgs}\overline{C_p}}{Pr^t}$, le coefficient de diffusion thermique turbulent et Pr^t le nombre de Prandtl (Eq. (2.25)) turbulent. Cette relation n'est cependant pas valable dans le front de flamme et nécessite un traitement particulier décrit plus tard.

3.2 Modélisation de la combustion turbulente

Pour modéliser correctement les flammes turbulentes, et de façon analogue à la turbulence, la simulation LES nécessite l'introduction de modèles de combustion turbulente. Les modèles de combustion utilisés dans ce travail sont présentés dans cette section.

Dans le cadre de la LES, deux aspects nécessitent l'introduction de modèles de combustion :

1. les épaisseurs thermiques des flammes laminaires sont typiquement submillimétriques. Résoudre directement ces fronts de flammes sur le maillage LES nécessiterait des maillages plus fins que nécessaire pour résoudre la turbulence.

2. Dans un contexte réactif, les petites échelles de l'écoulement n'ont pas uniquement un caractère dissipatif. Elles plissent la flamme et, ainsi, créent une augmentation de surface et de vitesse de consommation de la flamme. Ce phénomène n'est pas pris

en compte dans les modélisations de turbulence de sous-maille classiques. Il faut prendre en compte cet effet avec un modèle dédié d'interaction chimie/turbulence de sous-maille.

Un grand nombre de modèles ont été développés [125] (Taux de dissipation scalaire [88], Fonction de densité de probabilité (PDF), G-equation, Densité de Surface de Flamme (FSD), Flamme épaissie (TFLES)). L'objectif de ces modèles est d'assurer une modélisation correcte des taux de réaction des quantités réactives transportées et du dégagement de chaleur associé.

Cette section est organisée comme suit : le modèle TFLES utilisé dans ce manuscrit est décrit en Section 3.2.2. Les senseurs de flammes et le principe d'épaississement dynamique sont respectivement présentés dans les Section 3.2.4 et 3.2.5, avant de présenter la tabulation des propriétés de flamme en Section 3.2.5. Une correction de la réponse à l'étirement des flammes épaissies est également présentée en Section 3.2.3. Enfin, la modélisation utilisée pour prendre en compte les effets thermodiffusifs est détaillée en Section 3.2.3.

3.2.1 Modélisation de la chimie

Pour représenter les termes sources chimiques, différents mécanismes cinétiques ou tables peuvent être utilisés. Ces mécanismes prennent en compte un nombre donné d'espèces et décrivent leurs transformations avec une série de réactions. Pour des mélanges classiques, tels que les hydrocarbures, le nombre d'espèces peut atteindre plusieurs centaines et le nombre de réactions plusieurs milliers. Comme présenté dans la Section 3.2, la LES résout cinq équations de transport en 3D pour les écoulements non réactifs. Dans le cas d'écoulements réactifs, le nombre d'équations de transport à résoudre augmente du nombre d'espèces chimiques transportées. Le coût de calcul de la simulation aux grandes échelles étant proportionnel au nombre d'équations de transport résolues, il est nécessaire de développer des modèles avec un nombre d'espèces réduit.

Mécanismes détaillés

Ces mécanismes ont pour objectif de décrire l'intégralité des espèces et réactions participant à la combustion. Cette approche permet une reproduction fidèle de toutes les caractéristiques de flammes, mais, comme évoqué précédemment, entraînent un coût de calcul rédhibitoire. Par exemple, le mécanisme GRI-Mech 3.0 construit pour des hydrocarbures légers [114] possède 53 espèces pour 325 réactions, ce qui représente un coût de calcul prohibitif.

Mécanismes squelettiques et mécanismes réduits analytiquement

Obtenus à partir des mécanismes détaillés, les mécanismes squelettiques omettent certaines espèces et réactions n'ayant pas un impact significatif sur les quantités d'intérêt, généralement des caractéristiques macroscopiques de flamme (vitesse de flamme laminaire plane non étirée, température adiabatique, épaisseur thermique de flamme) et profils d'espèces le long de la flamme, en particulier dans les études de prédiction de polluants. Une autre contrainte d'optimisation consiste à sélectionner une plage de conditions opératoires en pression, température et richesse des gaz frais. En effet, les caractéristiques de flamme peuvent varier au cours du calcul, selon l'évolution de ces quantités, et il faut alors les ajuster pour correctement modéliser la flamme. Ainsi, la prédiction des caractéristiques de flammes restent proches, dans des plages de conditions opératoires sélectionnées, de celle obtenue pour un mécanisme détaillé, et ce pour un coût moindre. C'est notamment le cas du mécanisme de San Diego [21] pour la modélisation de la combustion d'hydrogène.

Les chimies ARC (Analytically Reduced Chemistry) [24] simplifient les schémas détaillés et les schémas squelettiques en introduisant du lumping (suppression de réactions non-nécessaire pour prédire les quantités d'intérêt) et en utilisant les QSSA (Quasi-steady state assumption) pour diminuer la raideur numérique du système chimique, tout en évitant de transporter des espèces à création/destruction rapides.

Cependant, pour certaines applications, seules les caractéristiques macroscopiques de flamme sont d'intérêt pour la prédiction de la physique. C'est notamment le cas dans les études d'explosions de mélanges parfaitement pré-mélangés. Dans de tels cas, les mécanismes squelettiques peuvent être remplacés par des schémas cinétiques globaux.

Mécanismes globaux

Les mécanismes globaux sont des schémas à une ou deux étapes (ou réactions) qui ont été optimisés afin de reproduire les vitesses de flamme laminaire et les températures adiabatiques, obtenues par des mécanismes détaillés [46].

Par construction, ils sont peu coûteux : quatre et six espèces sont nécessaires, respectivement, pour les flammes d'hydrogène/air et pour les hydrocarbures. Cette approche permet alors une diminution significative du coût de calcul. De plus, l'absence de raideur spatiale et temporelle améliore grandement leur robustesse numérique.

3.2.2 Modélisation TFLES

Une fois les caractéristiques de flamme obtenues à l'aide de la modélisation chimique, il faut s'assurer la résolution correcte de cette dernière. Comme évoqué en Chap. 2, les grandeurs caractéristiques de flamme, notamment de la zone de réaction, sont de l'ordre de la centaine de nanomètres, ce qui représente une résolution trop faible pour réaliser des simulations dans des domaines de taille relativement grande. Ainsi, pour permettre la résolution du front de flamme, il faut réaliser une modélisation de la flamme. Par analyse dimensionnelle, il est possible de montrer que la vitesse et l'épaisseur de flamme laminaire sont directement contrôlées par le terme diffusif et le terme source [130] :

$$s_{\mathrm{L}}^{0} \propto \sqrt{\dot{\omega} D_{th}} \qquad \text{et} \qquad \delta_{\mathrm{L}}^{0} \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{\dot{\omega}}}. \tag{3.17}$$

Le modèle TFLES (pour Thickened Flame model for LES) [19] se base sur un principe simple : il est possible d'épaissir une flamme, en introduisant un facteur d'épaississement $\mathcal{F}$, afin de résoudre les fronts de flamme sur un maillage LES. Ainsi, il est possible de conserver la vitesse de flamme laminaire en multipliant d'une part le terme diffusif par un facteur d'épaississement $\mathcal{F}$, et en divisant d'autre part le terme source chimique par ce même facteur afin de garder la vitesse de propagation laminaire non épaissie. En introduisant ce facteur d'épaississement $\mathcal{F}$, on obtient alors l'Eq. (3.18) :

$$s_{\mathrm{L}}^1 \propto \sqrt{\frac{\dot{\omega}}{\mathcal{F}} \times \mathcal{F} D_{th}} = s_L^0 \qquad \text{et} \qquad \delta_{\mathrm{L}}^1 \propto \sqrt{\frac{\mathcal{F} D_{th}}{\dot{\omega}/\mathcal{F}}} = \mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0, \tag{3.18}$$

où l'exposant 0 correspond aux propriétés de flamme non épaissie et l'exposant 1 à la flamme épaissie. L'analyse dimensionnelle présentée dans Eq. (3.18) montre que l'on retrouve bien la même vitesse de flamme laminaire pour une flamme d'une épaisseur thermique multipliée par un facteur $\mathcal{F}$. Par un changement de variable sur la coordonnée spatiale, on peut montrer que la transformation est mathématiquement exacte pour une flamme 1D non étirée. En pratique, la valeur choisie pour ce facteur d'épaississement permet de garantir une résolution suffisante d'un point de vue numérique du front de flamme sur un maillage de type LES. Ce facteur peut atteindre des valeurs très importantes (>100) dans des configurations de grands volumes, notamment des applications industrielles.

L'approche d'épaississement dynamique, permettant d'adapter la valeur de $\mathcal{F}$ à la résolution du maillage dans les cas où les caractéristiques de flamme laminaire évoluent au cours du calcul, sera présentée en Section 3.2.5.

Cette méthode permet alors de retrouver facilement des résultats expérimentaux, et/ou de simulation DNS, pour des cas d'application de flammes laminaires, et ce pour des coûts de calcul plus faibles. Cependant, en l'état, elle ne permet pas de retrouver les résultats obtenus dans des cas d'application turbulents. Une correction est nécessaire : l'utilisation d'une fonction d'efficacité.

Modèles d'efficacité TFLES

Selon l'hypothèse de Damköhler, la vitesse de flamme turbulente est proportionnelle au ratio des surfaces de flammes turbulentes et laminaires :

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_T}{A_L}. \tag{3.19}$$

En entrée des modèles de combustion turbulente TFLES permettant de calcul la vitesse de flamme turbulente, on retrouve souvent les mêmes paramètres :

— La vitesse de fluctuation turbulente u',

— l'épaisseur de flamme δ_{L}

— la vitesse de flamme s_{L},

— une longueur caractéristique du domaine étudié $\mathrm{L_t}$,

Plusieurs nombres adimensionnelles caractéristiques de l'interaction flamme-turbulence (nombre de Damköhler (Eq. (2.49)), de Karlovitz (Eq. (2.50)), rapport des échelles de longueur L_t/δ^L) d'une flamme épaissie sont modifiés d'un $\mathcal{F}$. Il résulte notamment de la modification du rapport d'échelle L_t/δ^L qu'une gamme plus restreinte d'échelles turbulentes est à même de contribuer efficacement au plissement du front de flamme [4]. Cette perte de plissement réduit la surface totale de flamme A_T et donc la vitesse de flamme turbulente s_T.

Afin de corriger cette perte de plissement de flamme par la turbulence, des modèles dit de fonction d'efficacité, ont été introduits afin de compenser la contribution perdue sur le plissement total de la flamme correspondant à la partie manquante du spectre d'énergie cinétique turbulente à laquelle la flamme aurait dû être sensible sans épaississement de flamme.

Le plissement de la flamme à l'échelle Δ_c est noté Ξ_{Δ_c} où Δ_c désigne une échelle de coupure du filtre LES combustion, qui est de l'ordre de $2\delta_L^0 \simeq 10\Delta_x$, ce qui est une valeur supérieure au filtre LES Δ pour la partie aérodynamique qui est de l'ordre de $1 - 3\Delta_x$.

Il existe différents modèles permettant de prendre en compte cette perte de surface en définissant une fonction d'efficacité noté $\mathcal{E}$ (Eq. (3.20)), définie par le rapport du plissement à l'échelle Δ_c pour une flamme non épaissie $\Xi_{\Delta_c}(\delta_{\mathrm{L}}^0)$ et celui de la flamme épaissie $\Xi_{\Delta_c}(\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0)$:

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi_{\Delta_c}(\delta_L^0)}{\Xi_{\Delta_c}(\mathcal{F}\delta_L^0)}. \tag{3.20}$$

L'analyse dimensionnelle, présentée en Eq. (3.21), montre que multiplier le taux de réaction et la diffusion thermique par un facteur $\mathcal{E}$ permet d'obtenir une augmentation de vitesse de flamme de ce même facteur :

$$s_{\mathrm{L}}^{1} \propto \sqrt{\frac{\mathcal{E}\dot{\omega}}{\mathcal{F}} \times \mathcal{F}\mathcal{E}D_{th}} = \mathcal{E}s_{L}^{0} \qquad \text{et} \qquad \delta_{\mathrm{L}}^{1} \propto \sqrt{\frac{\mathcal{F}\mathcal{E}D_{th}}{\mathcal{E}\dot{\omega}/\mathcal{F}}} = \mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^{0}. \tag{3.21}$$

Ainsi, en multipliant le terme de diffusion D_{th} et le taux de réaction par $\mathcal{E}$, on peut retrouver la vitesse de que devrait avoir la flamme sans la perte de plissement due à l'épaississement. Cela nécessite cependant l'utilisation d'un modèle approprié pour définir la valeur de $\mathcal{E}$.

Dans ce travail, le choix a été fait d'utiliser deux modèles de fermeture algébrique basé sur des quantités locales de l'écoulement. Il existe aussi des variantes de modèles basées sur une équation de transport pour modéliser ce plissement de sous-maille [98, 113].

La fonction d'efficacité de Colin [34]

La fonction d'efficacité de Colin, notée $\mathcal{E}_{\mathrm{Colin}}$, fait l'hypothèse d'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous-maille. Dans le modèle de Colin, le plissement à l'échelle Δ_c est défini par l'Eq. (3.22) :

$$\Xi_{\Delta_c}^{\mathrm{Colin}} = 1 + \alpha_{\mathrm{Colin}} \frac{\Delta_c}{s_{\mathrm{L}}^{0}} \left\langle \alpha_T^{sgs} \right\rangle_S , \tag{3.22}$$

où α_{Colin} est une constante du modèle et $\left\langle \alpha_T^{sgs} \right\rangle_S$ est le taux de déformation de sous-maille moyen sur le front de flamme, obtenu à partir du champ de fluctuation de vitesse résolue à l'échelle Δ_c, u'_{Δ_c} :

$$\left\langle \alpha_T^{sgs} \right\rangle_S = \Gamma_{\mathrm{Colin}} \left(\frac{\Delta_c}{\delta_{\mathrm{L}}}, \frac{u'_{\Delta_c}}{s_{\mathrm{L}}} \right) \frac{u'_{\Delta_c}}{\Delta_c}, \tag{3.23}$$

avec u'_{Δ_c} une estimation de l'intensité turbulente à l'échelle Δ_c calculée en appliquant l'opérateur 2 de Colin [34] : $u' = \mathrm{OP2}\left(\vec{u}\right) = 2\Delta_x^3 \nabla^2(\nabla \times \vec{u})$, où $\vec{u}$ est le champ de vitesse résolue. La fonction Γ_{Colin} est l'intégrale du taux de déformation entre l'échelle de coupure de la flamme (les vortex plus petits que cette échelle ne plissent pas la flamme) et l'échelle Δ_c et est définie par l'Eq. (3.24) :

$$\Gamma_{\mathrm{Colin}} = \frac{3}{4} \exp\left[-\frac{1.2}{(u'_{\Delta_c}/s_{\mathrm{L}}^{0})^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_c}{\delta_{\mathrm{L}}^{0}} \right)^{2/3}. \tag{3.24}$$

La constante α_{Colin} (Eq. (3.25)) est obtenue à l'aide de la théorie de Damköhler ($\Xi \approx 1 + u'/s_{\text{L}}$), pour une flamme plissée par toutes les structures turbulentes :

$$\alpha_{\text{Colin}} = \beta_{\text{Colin}} \frac{ln(2)}{2c_{ms}(\theta Re_t^{0.5} - 1)}, \tag{3.25}$$

où $c_{ms} \approx 0.28$ et $\beta_{\text{Colin}} = 0.3$ sont des constantes du modèle. θ est un facteur correctif qui permet de limiter le plissement dans le cas d'une turbulence de faible intensité ($l_k > \delta_L^c$). L'expression de θ est définie par :

$$\theta = \min \left[\left(\frac{l_k}{\delta_{\text{L}}^c} \right)^{2/3}, 1 \right], \tag{3.26}$$

avec

$$\left(\frac{l_k}{\delta_{\text{L}}^c} \right) = \frac{\ln(2)}{2c_{ms} Re_t^{1/2}} \exp \left[-\frac{1.2}{(u'/s_{\text{L}}^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{l_t}{\delta_{\text{L}}^0} \right)^{2/3}$$

L'échelle intégrale l_t est une donnée en paramètre d'entrée du modèle. Finalement, on peut écrire l'expression de la fonction d'efficacité de Colin, $\mathcal{E}_{\text{Colin}}$ comme le ratio de la valeur de la fonction de plissement appliquée pour la flamme non épaissie sur la valeur obtenue pour la flamme épaissie :

$$\mathcal{E}_{\text{Colin}} = \frac{\Xi_{\Delta_c}^{\text{Colin}} \left(\frac{\Delta_c}{\delta_{\text{L}}^0}, \frac{u'_{\Delta_c}}{s_{\text{L}}^0}, Re_t \right)}{\Xi_{\Delta_c}^{\text{Colin}} \left(\frac{\Delta_c}{F\delta_{\text{L}}^0}, \frac{u'_{\Delta_c}}{s_{\text{L}}^0}, Re_t \right)}. \tag{3.27}$$

La fonction d'efficacité de Charlette [26]

La fonction d'efficacité de Charlette, $\mathcal{E}_{\text{Charlette}}$, considère également l'hypothèse d'équilibre entre la flamme et la turbulence. Contrairement au modèle de Colin, le modèle de Charlette utilise une loi de puissance typique des modèles fractals. Ainsi, pour une taille de filtre Δ_c choisie, on obtient :

$$\Xi_{\Delta_c}^{\text{Charlette}} \left(\frac{\Delta_c}{\delta_{\text{L}}^0}, \frac{u'_{\Delta_c}}{s_{\text{L}}^0}, Re_{\Delta_c} \right) = \left(1 + \min \left(\frac{\Delta_c}{\delta_{\text{L}}^0}, \Gamma_{\text{Charlette}} \frac{u'_{\Delta_c}}{s_{\text{L}}^0} \right) \right)^{\beta_{\text{Charlette}}}, \tag{3.28}$$

où $\beta_{\text{Charlette}}$ est directement lié à la dimension fractale D de la flamme :

$$\beta_{\text{Charlette}} = D - 2. \tag{3.29}$$

Dans ce manuscrit, la valeur de $\beta_{\text{Charlette}} = 0.5$, préconisée dans l'article de Charlette [26], est utilisée. L'expression de $\Gamma_{\text{Charlette}}$ a été obtenue par analyse de calculs DNS et définie en Eq. (3.30) :

$$\Gamma^{fit}_{\text{Charlette}}\left(\frac{\Delta_c}{\delta^0_{\text{L}}}, \frac{u'_{\Delta_c}}{s^0_{\text{L}}}, Re_\Delta\right) = \left[\left(\left(f_u^{-a} + f_{\Delta_c}^{-a}\right)^{-1/a}\right)^{-b} + f_{Re}^{-b}\right]^{-1/b}, \tag{3.30}$$

avec :

$$f_u = 4\left(\frac{27C_k}{110}\right)^{1/2}\left(\frac{18C_k}{55}\right)\left(\frac{u'_{\Delta_c}}{s^0_{\text{L}}}\right)^2,$$

$$f_{\Delta_c} = \left[\frac{27C_k\pi^{4/3}}{110}\left(\left(\frac{\Delta_c}{\delta^0_{\text{L}}}\right)^{4/3} - 1\right)\right]^{1/2},$$

$$f_{Re} = \left[\frac{9}{55}\exp\left(-\frac{3}{2}C_k\pi^{4/3}Re^{-1}_{\Delta_c}\right)\right]^{1/2} Re^{1/2}_{\Delta_c},$$

où

$$a = 0.6 - 0.2\exp\left[-0.1\left(u'_{\Delta_c}/s^0_{\text{L}}\right)\right] - 0.2\exp\left[-0.01\left(\Delta_c/\delta^0_{\text{L}}\right)\right], b = 1.4, C_k = 1.5,$$

et

$$Re_{\Delta_c} = 4(\Delta_c/\delta^0_L)(u'_{\Delta_c}/s^0_L).$$

3.2.3 Limite de TFLES pour les déflagrations

Bien que le modèle soit peu couteux et permette de retrouver les bonnes caractéristiques des flammes, en plus d'être un des rares modèles à gérer la transition laminaire/turbulent et à être capable de prendre en comptes certains phénomènes de façon naturelle (ex : pertes thermiques), certains phénomènes peuvent voir leurs effets amplifier à cause de l'épaississement de la flamme.

Effet du facteur d'épaississement sur la réponse de la flamme à l'étirement

D'un point de vue physique, il est important de souligner que lorsqu'une flamme est épaissie, sa réponse à l'étirement est modifiée : sous l'effet de l'étirement, la vitesse de consommation de la flamme augmente (respectivement diminue) par rapport à une flamme laminaire non étirée pour des nombres de Lewis plus petit (respectivement plus grand) que l'unité. Cet effet doit donc être corrigé pour retrouver un comportement physique sans turbulence ou aux échelles résolues. Quillatre [107] a développé un modèle, nommé **TF-adapt**, permettant de prendre ces effets en compte en utilisant un nombre de Lewis modifié Le_k^*, basé sur Le_k issu des propriétés de transport du schéma cinétique considéré. L'objectif est d'adapter ce nombre de Lewis modifié et de le rendre dépendant du facteur d'épaississement afin d'assurer la condition suivante :

$$\delta(Le_k - 1) = cste, \tag{3.31}$$

où δ est l'épaisseur de la flamme épaissie. Ainsi, grâce à cette expression, on peut relier les nombres de Lewis modifiés Le_k^* aux Le_k d'origine :

$$\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0(Le_k^* - 1) = \delta_{\mathrm{L}}^0(Le_k - 1). \tag{3.32}$$

On obtient l'expression des nombres de Lewis modifiés :

$$Le_k^* = 1 + \frac{Le_k - 1}{\mathcal{F}}. \tag{3.33}$$

En pratique, cette modification des Le_k en Le_k^* est réalisée en ajustant les nombres de Schmidt des espèces tandis que le nombre de Prandlt est maintenu à sa valeur d'origine. Il est important de noter que, la vitesse de flamme laminaire est impactée par ces corrections. Bien que cet impact soit modéré, il convient de réajuster la constante pré-exponentielle de la réaction d'oxydoréduction du combustible pour retrouver s_L^0.

Effet des instabilités thermodiffusives

Comme précisé en Section 2.2.4, les instabilités thermodiffusives apparaissent à petites échelles, de l'ordre de quelques épaisseurs de flamme laminaire δ_L^0. Il est possible de les capter numériquement pour des résolutions proches de la DNS, et donc des facteurs d'épaississement F faible. Dans un contexte de LES de géométries représentatives, les facteurs d'épaississement sont grands, ne permettant pas de résoudre ces phénomènes, qui sont complètement 'sous-maille'. Il est donc nécessaire de les modéliser.

Différents modèles ont émergé ces dernières années pour les prendre en compte, ce qui est essentiel pour reproduire correctement la dynamique d'une flamme dans des conditions de mélange pauvres [60, 74], comme celui de Berger et al. [10], utilisé dans les travaux de ce manuscrit. Ce modèle est basé sur une corrélation construite sur un grand nombre de simulations de flammes initialement planes dans des conditions thermo-diffusivement instables. Il permet de prendre en compte l'augmentation de surface et l'augmentation de la réactivité locale du front de flamme liée à l'instabilité, phénomènes non résolus par la simulation LES. La vitesse de consommation en régime pleinement développé de l'instabilité est utilisée afin d'obtenir un facteur multiplicatif E_{lam} de terme source de réactions dû aux effets thermodiffusifs, défini en Eq. (3.34) :

$$E_{\text{lam}} = \left(\left(\frac{s_c}{s_{\text{L}}^0} \right)_{\text{Ref}} - 1 \right) \left(\frac{\phi}{\phi_{\text{Ref}}} \right)^{\gamma_\phi} \left(\frac{T_{\text{u}}}{T_{\text{u,Ref}}} \right)^{\gamma_{T_{\text{u}}}} \left(\frac{P}{P_{\text{Ref}}} \right)^{\gamma_P} + 1, \tag{3.34}$$

où $\left(\frac{s_c}{s_{\text{L}}^0} \right)_{\text{Ref}} = 2.69$, $\phi_{\text{Ref}} = 0.5$, $T_{\text{u,Ref}} = 298$ K et $P_{\text{Ref}} = 10^5$ Pa sont des valeurs de référence définies par Berger et al. [10]. $\gamma_\phi = -1.62$, $\gamma_{T_{\text{u}}} = -2.56$ et $\gamma_P = 0.4$ sont des exposants permettant de représenter les dépendances en richesse, température des gaz frais et pression.

3.2.4 Senseur de flamme pour l'épaississement dynamique

Comme discuté dans la section Section 3.2.2, l'introduction d'un facteur d'épaississement modifie les coefficients de diffusion thermique et de diffusion moléculaire. Appliquer la même modification des propriétés diffusives dans les gaz frais ou les gaz brûlés, dans lesquels il n'y a pas de flamme, serait néfaste pour la qualité la LES, altérant la pré-

diction de phénomènes importants pour la combustion, comme par exemple le mélange air-carburant pour des cas stratifiés.

Pour limiter l'application de la correction TFLES au niveau du front de flamme, les senseurs de flamme ont été développés. Comme leur nom l'indique, leur but est de détecter les régions de l'écoulement où un front de flamme est présent. Cet aspect est critique, d'autant plus dans le cadre d'une approche AMR comme celle utilisée dans ces travaux, car la construction de la méthode d'adaptation de maillage est directement basée sur ce senseur pour détecter les zones qui doivent être raffinées. En pratique, le senseur de flamme θ_F est un champ scalaire valant 1 dans les fronts de flammes, 0 dans les gaz frais et les gaz brûlés, et des valeurs intermédiaires dans une zone de transition.

Le champ d'épaississement dynamique construit à partir de ce senseur est le suivant :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{\max} - 1)\theta_F, \tag{3.35}$$

où $\mathcal{F} = 1$ en dehors de la flamme et $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\max}$ dans la flamme. Et par construction du modèle, l'efficacité $\mathcal{E}$ vaut également 1 quand $\mathcal{F} = 1$.

Le type de senseur de flamme dépend de la chimie utilisée. Pour les schémas globaux de cinétique chimique (à une ou deux étapes) la réaction d'oxydation du carburant est utilisée. Le senseur utilisé dans ce cas de figure est dit "senseur classique" [85]. Pour les schémas squelettiques de cinétique chimique, il existe de nombreuses réactions consommant le fuel, et celles-ci sont distribuées spatialement. Cette propriété rend l'approche "senseur classique" inutilisable et il est nécessaire d'utiliser une autre approche. Ici, l'approche "senseur de relaxation" [68] est choisie.

Senseur de flamme pour schémas cinétiques globaux

Pour les schémas de cinétique chimique dit "globaux", le senseur de flamme θ_F est défini par l'Eq. (3.36) :

$$\theta_F = \tanh\left(\beta' \frac{\Theta}{\Theta_0}\right), \tag{3.36}$$

où $\beta' = 50$ est une constante de modèle, Θ est le taux de réaction local et Θ_0 est son maximum dans une flamme plane laminaire non étirée, déterminé à partir d'un calcul de

flamme laminaire 1D à une pression initiale donnée p_0, une température initiale T_0 et une richesse ϕ. Ce taux de réaction est défini comme suit (Eq. (3.37)) :

$$\Theta = {Y_{\mathrm{F}}}^{n_{\mathrm{F}}} {Y_{\mathrm{O}}}^{n_{\mathrm{O}}} \exp\left(-\chi \frac{E_{\mathrm{a}}}{RT}\right), \tag{3.37}$$

avec Y_{F} et Y_{O} les fractions massiques du combustible et de l'oxydant, E_{a} l'énergie d'activation, R la constante des gaz parfaits et $\chi = 1/2$ est une constante du modèle.

Bien que ce senseur parvienne à détecter le front de réaction, il ne parvient pas, en l'état, à capturer tout le profil de flamme. En particulier, le gradient de masse volumique en pied de flamme, du côté des gaz frais, n'est pas toujours intégralement capté. Ce gradient peut être raide et, ainsi, les schémas numériques centrés utilisés dans le solveur LES peuvent créer des oscillations parasites. De telles oscillations sont généralement dissipées par de la viscosité artificielle. Cependant, cette diffusion non-physique peut conduire à une mauvaise reproduction numérique de la vitesse et de l'épaisseur, alors que le concept du modèle TFLES repose précisement sur la conservation de ces propriétés de flamme.

Afin d'éviter ces perturbations, le senseur de flamme est étendu, utilisant le facteur d'épaississement afin de réduire le gradient de masse volumique. Dans le cadre de solveurs non structurés, la propagation d'information sur un maillage n'est pas triviale. Dans AVBP, le solveur utilisé dans ce travail, les procédures numériques de gather et de scatter sont utilisées [45]. Ces procédures sont schématisées en Fig. 3.1. L'opération de gather consiste en une communication entre les données des nœuds et leurs cellules adjacentes. Ici, l'opération de communication retenue, le 'gather', consiste à moyenner à la cellule les valeurs des nœuds qui la composent. Ainsi, la cellule adjacente à un nœud, où le senseur détecte une flamme ($\theta_F = 1$), propage cette information à la cellule. Ensuite, l'opération de scatter procède de manière analogue en propageant, cette fois, les valeurs dans les cellules aux nœuds qui lui appartiennent, avec une pondération par le volume de la cellule.

La Fig. 3.2 montre cette étape de filtrage gather/scatter appliquée à un senseur de flamme en 1D. Le profil de senseur de flamme est bien étendu dans les gaz frais, ce qui permet d'appliquer le facteur d'épaississement jusqu'au pied de flamme et de résoudre correctement l'inflexion du profil de densité.

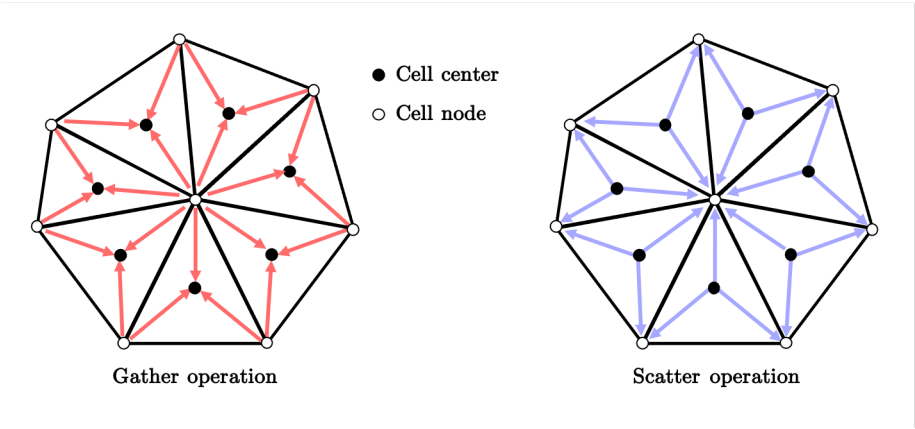


FIGURE 3.1 – Schéma de principe des procédures de gather/scatter.

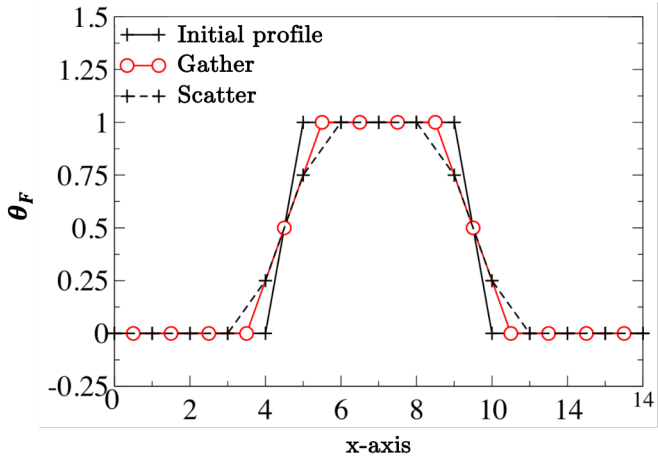


FIGURE 3.2 – Application d'une étape de la procédure de gather/scatter sur le profil de senseur de flamme. L'abscisse représente les nœuds du maillage et l'ordonnée la valeur prise par le senseur de flamme θ_F. Adapté de [107].

Senseur de flamme pour schémas cinétiques squelettiques, analytiques et détaillés

Dans les cas où des chimies complexes sont employées, le senseur de relaxation de Jaravel [68] est utilisé. On introduit une quantité intermédiaire θ_S (Eq. (3.38)), qui se base sur le terme source du combustible $\dot{\omega}_F$ pour détecter la zone de réaction du front de flamme :

$$\theta_S = \max\left[\min\left(2\frac{\mathcal{F}_{\max}|\dot{\omega}_F|}{|\dot{\omega}_F|_{max}} - 1, 1\right), 0\right], \tag{3.38}$$

où $|\dot{\omega}_F|_{max}$ correspond à la valeur maximale de $\dot{\omega}_F$ obtenue par une simulation 1-D

[51]. De manière analogue au senseur "classique" pour chimie globale (Eq. (3.36)), ce senseur détecte la zone de réaction du front de flamme sans toutefois détecter la totalité du profil de flamme, en particulier le gradient de masse volumique en pied de flamme. Ici, une équation de transport additionnelle est résolue afin de propager le senseur de flamme. La quantité scalaire transportée, Ψ_F, est définie par l'équation de transport (3.39) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Psi_F) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\Psi_F) = \nabla\cdot(\rho D_{\Psi_F}\nabla\Psi_F) + \rho\dot{\omega}_{\Psi_F}, \tag{3.39}$$

où le terme source $\dot{\omega}_{\Psi_F}$ est défini en Eq. (3.40) :

$$\begin{cases} \text{Si } \theta_S < 0.05 \longrightarrow \dot{\omega}_{\Psi_F} = \frac{\Psi_F^0 - \Psi_F}{\tau_1}, \\ \text{Si } 0.05 \leq \theta_S \leq 0.8 \longrightarrow \dot{\omega}_{\Psi_F} = 0, \\ \text{Si } \ \theta_S > 0.8. \longrightarrow \dot{\omega}_{\Psi_F} = \frac{\Psi_F^0 - \Psi_F}{\tau_0}. \end{cases} \tag{3.40}$$

En pratique, $\tau_0 = 20\Delta_t$ pour garantir la bonne stabilité numérique et une relaxation rapide de Ψ_F vers $\Psi_F^0 = 20$. Au contraire, $\tau_1 >> \tau_0$ de l'ordre d'un temps de flamme afin d'assurer une relaxation lente de Ψ_F vers $\Psi_F^0 = 20$. Cette constante est obtenue à l'aide d'une simulation 1-D (cas dépendant), elle peut prendre deux valeurs : une pour les gaz frais si T $<$ 1600 K et une pour les gaz brûlés sinon. D_{Ψ_F} est un paramètre évalué en se basant sur l'espèce chimique ayant la diffusion la plus rapide :

$$D_{\Psi_F} = \frac{\nu}{\min(Sc_k)}. \tag{3.41}$$

Finalement, le senseur de flamme $\theta_{F_{relax}}$, pour les simulations avec une chimie détaillée, est défini par l'équation suivante :

$$\theta_{F_{relax}} = \max\left(\min(\Psi_F, 1), \theta_S\right). \tag{3.42}$$

Le profil correspondant à ce senseur est présenté en Fig. 3.3. L'expression finale du senseur $\theta_{F_{relax}}$ est donc bien élargie et permet de venir résoudre correctement toutes les caracté-

ristiques de flamme.

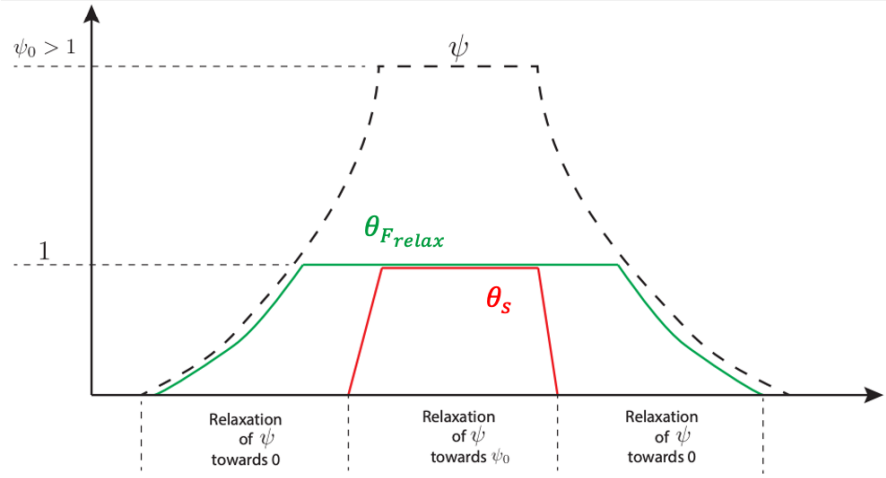


FIGURE 3.3 – Obtention du senseur de flamme θ_F à partir du scalaire passif ψ. θ_S est le senseur avant l'élargissement. Adapté de [68].

De façon analogue aux senseurs précédemment introduits, le champ d'épaississement est obtenu par à partir de $\theta_{F_{relax}}$ par :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{\max} - 1)\theta_{F_{relax}}, \tag{3.43}$$

où $\mathcal{F}_{\max}$ est défini par l'Eq. (3.44).

3.2.5 Épaississement dynamique

Historiquement, les premières simulations avec flammes épaissies ont été réalisées avec une valeur d'épaississement constante dans tout le domaine [19]. Dans les géométries complexes, la résolution du maillage est variable et il est donc nécessaire d'adapter la valeur de l'épaississement à la résolution locale du maillage. Un facteur d'épaississement trop faible conduit à une sous-résolution d'un front de flamme, ce qui peut altérer sa vitesse de propagation, alors qu'un facteur trop grand peut donner un poids trop important au modèle de combustion de sous-maille.

L'approche utilisée pour déterminer le niveau d'épaississement à appliquer se base sur l'épaisseur thermique (non épaissie) de la flamme aux conditions de pression, de température et richesse des gaz frais, δ_L^0. Ainsi, pour une résolution locale Δx et un nombre de cellules souhaité dans le front de flamme N_c, l'épaisseur de flamme épaissie peut-être

exprimée par :

$$\delta_L^1 = \mathcal{F}_{\max}\delta_L^0 = N_c\Delta_x. \tag{3.44}$$

En isolant $\mathcal{F}_{max}$ dans l'Eq. (3.44), on obtient une valeur locale de l'épaississement pour un N_c donné. Le choix de la valeur du N_c se fait en fonction de la raideur spatiale de la chimie. Pour les chimies globales, $N_c = 5$ est suffisant pour résoudre les gradients dans le profil de flamme. Dans le cas de chimies détaillées, les raideurs spatiales et temporelles du schéma cinétique dépendent de la chimie employée. La simulation de flamme 1D non étirée, également utilisée pour ajuster les constantes du senseur de flamme (Section 3.2.4), permet de déterminer la valeur de N_c. Cette valeur est généralement entre $N_c = 5$ et $N_c = 7$.

Il est important de noter que, dans le modèle TFLES, les caractéristiques de la flamme ($\delta_{\mathrm{L}}^0,\ s_{\mathrm{L}}^0$) interviennent en entrée des diverses expressions. Or, dans une configuration complexe, les propriétés du mélange (ϕ), et donc les propriétés de flamme laminaire ($\delta_{\mathrm{L}}^0,\ s_{\mathrm{L}}^0$), peuvent être modifiées. De plus, dans le cas des explosions en milieu confiné, les fortes montées en pression doivent être prises en compte dans la modélisation. À cet effet, les caractéristiques de flamme doivent être spécifiées en fonction de la richesse, de la pression et de la température des gaz frais. Pour la montée en pression lors des explosions, ceci peut être fait part le biais de tabulations et d'une hypothèse de compression isentropique des gaz frais est utilisée, menant à une température supérieure, quand la pression augmente, à la température initiale. Par exemple, dans les flammes hydrogène/air, augmenter la pression diminue la vitesse de flamme laminaire. Cependant, l'échauffement dû à la compression isentropique augmente la vitesse de flamme laminaire. Des expressions polynomiales sont alors utilisées pour caractériser l'effet de la compression des gaz frais sur la vitesse de flamme :

$$s_{\mathrm{L}}(p, T_{\mathrm{u}}) = s_{\mathrm{L}}(p_0, T_{\mathrm{u},0}) \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\alpha_p} \left(\frac{T_{\mathrm{u}}}{T_{\mathrm{u},0}}\right)^{\alpha_T}, \tag{3.45}$$

En supposant une compression isentropique, l'augmentation de température peut être liée à la compression à travers le coefficient adiabatique γ comme $T_{\mathrm{u}}/T_{\mathrm{u},0} = (p/p_0)^{(\gamma-1)/\gamma}$. Pour les mélanges air-combustible, généralement $\gamma \approx 1.4$, ce qui conduit à l'expression

approximative suivante :

$$s_{\mathrm{L}}(p, T_{\mathrm{u}}) \approx s_{\mathrm{L}}(p_0, T_{\mathrm{u},0}) \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\alpha_p + \alpha_T/3,5} . \tag{3.46}$$

Les valeurs des coefficients α_p et α_T dépendent de l'ordre de la réaction globale, qui varie en fonction du type de combustible, de la concentration et de la pression. Néanmoins, des valeurs typiques pour les combustibles usuels tels que le méthane [52] ou le propane [95] peuvent être prises en compte, dans des conditions proches de l'ambiante et à des pressions allant jusqu'à plusieurs dizaines de bars. En général, α_T prend des valeurs positives, et α_p des valeurs négatives, avec $|\alpha_T| > 4|\alpha_p|$: la vitesse de flamme diminue avec l'augmentation de la pression, mais augmente fortement avec l'augmentation de la température. Pour l'hydrogène, α_p peut même prendre des valeurs positives pour des mélanges très pauvres [3, 80]. On peut donc conclure que pour les combustibles les plus courants dans des conditions typiques, la vitesse de flamme laminaire augmentera pendant le processus d'accélération de flamme.

3.3 Le solveur AVBP

Le solveur compressible massivement parallèle AVBP [49] est basé sur une approche temporelle explicite, utilisant une méthode des volumes finis/éléments finis Cell-Vertex pour résoudre les équations de Navier-Stokes compressibles, réactives et instationnaires multiespèces sur des maillages non structurés. Les conditions aux limites utilisent le formalisme Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC) [101].

Schémas numériques

Afin de résoudre les équations de Navier-Stokes (Eq. (3.4) - Eq. (3.7)), deux schémas numériques sont utilisés dans ce manuscrit. Leurs propriétés de dispersion et de dissipation sont essentielles pour reproduire numériquement les écoulements réactifs.

— **Le schéma numérique de Lax-Wendroff (LW) [83]** : c'est un schéma numérique centré en volume fini d'ordre 2 en espace et en temps. Il est surtout utilisé de par son faible coût de calcul.

— **Le schéma numérique de Taylor-Galerkin (TTGC) [33]** : c'est un schéma numérique centré d'ordre 3 en espace et en temps. Il possède de meilleures propriétés dispersives et dissipatives que le schéma LW mais est aussi relativement plus coûteux. Il est particulièrement bien adapté à la simulation LES réactive.

Viscosité artificielle

Les deux schémas numériques utilisés étant spatialement centrés, ils sont sujets à la formation d'oscillations numériques point à point (les wiggles) dans les régions de forts gradients. Afin d'évacuer ces perturbations, un terme de viscosité artificielle est ajouté aux équations de transport. Différentes formulations de viscosité artificielle existent. Celle retenue dans ce manuscrit est issue de Colin [32]. Elle est composée de deux paramètres :

— Un terme de dissipation d'ordre 4, qui permet d'atténuer l'amplitude des wiggles.

— Un terme de dissipation d'ordre 2, qui vient atténuer les oscillations locales, autour de zones de gradients raides.

En plus de cette viscosité artificielle, un filtre est appliqué sur le champ de pression pour détecter les zones de fort gradient dans les chocs, afin d'y appliquer un opérateur de diffusion artificielle locale (LAD) [75] pour pouvoir les résoudre correctement.

3.4 Spécificité du contexte d'explosion : synthèse

Afin de modéliser les explosions, de nombreux modèles doivent être utilisés. Dans les cas d'écoulements réactifs et notamment d'explosions, plusieurs modélisations deviennent essentielles :

1. La modélisation de la chimie : dans ces travaux, les schémas de cinétique chimique utilisés sont souvent simplifiés ou globaux afin de permettre de retrouver les caractéristiques de faible pour un coût de calcul acceptable.
2. La modélisation de la flamme : Dans un contexte d'application de simulation LES pour des configurations industrielles, l'épaisseur de flamme est trop faible. Ainsi, pour la résoudre correctement, l'utilisation d'un modèle de flamme épaissie permet, sans changer la vitesse de flamme laminaire, d'épaissir artificiellement la flamme

pour pouvoir la résoudre sur des maillages moins raffinés. Les effets de ce modèle sur l'intensification de la réponse de la flamme à l'étirement sont également corrigés à l'aide d'une modélisation basée sur le nombre de Lewis.

3. La modélisation des effets diffusifs : Dans le cas de combustible avec des propriétés fortement diffusives, comme l'hydrogène, la prise en compte des instabilités des effets thermodiffusifs est nécessaire pour retrouver l'évolution de la vitesse de flamme en modélisant le plissement induit.
4. La modélisation de la turbulence : la méthode LES requiert l'utilisation d'un modèle de turbulence afin de modéliser la turbulence de sous-maille.
5. La modélisation de l'interaction flamme/turbulence : L'interaction de la flamme avec la turbulence doit également être modélisée, de par la formulation de la méthode de flamme épaissie. Les modèles utilisés dans ces travaux ont déjà prouvé leur efficacité dans des simulations d'explosions.

Comme rappelé en Chapitre 1, bien que ces modélisations aient déjà été validées sur des simulations d'explosions, cela reste insuffisant pour permettre la réalisation de simulations LES de phénomènes propagatifs comme les explosions dans des domaines de grands volumes. Il est alors possible d'utiliser de l'adaptation de maillage dynamique dans ce but.

Chapitre 4

Développement d'une méthode AMR générique pour la LES d'explosions

Dans le formalisme LES, la modélisation de sous-maille de la flamme et de la turbulence permettent de réduire la gamme d'échelles à résoudre. Ces niveaux de résolution intermédiaire rendent la LES accessible sur des géométries de laboratoire. Cependant, la taille des maillages et le coût de calcul associés restent prohibitifs dans un contexte industriel qui requiert, d'une part, un nombre de cas à simuler souvent important pour réaliser une étude paramétrique et, d'autre part, d'aller vers des grandes géométries, à l'échelle d'installations industrielles. Comme évoqué en Chapitre 1, l'adaptation de maillage dynamique peut permettre de réduire considérablement les temps de calcul en ne maillant finement que les zones d'intérêt. Même une faible réduction du coût de calcul permettrait d'obtenir un gain global important dans le cas d'études paramétriques, pour plusieurs points de fonctionnement et pour plusieurs géométries, par effet d'échelle. Cependant, les méthodes sont nombreuses et leur développement doit être adapté au périmètre de configurations étudiées. Plusieurs ont déjà été utilisées et ont montré leur efficacité pour des simulations CFD dans le domaine de la combustion. Bien que ces méthodes se ressemblent, elles ont chacune leurs spécificités :

- **Multi-Level Adaptive Techniques (MLAT) [17] :** Ces techniques utilisent une superposition de maillages de différentes résolutions pour représenter la géométrie. Elles reposent souvent sur des méthodes de correction d'erreurs ou de projection entre les différents niveaux de maillage pour ajuster la résolution là où il est nécessaire. Bien que précises et capables de s'adapter à des géométries complexes, elles peuvent être compliquées à gérer à cause du nombre de grilles différentes et ainsi mener à des coûts algorithmiques plus élevés. Un exemple d'application de la méthode, pour une simulation de flamme de méthane, est montré en Fig. 4.1.
- **Adaptive multiresolution methods (MR) [55] :** Ces méthodes combinent plusieurs niveaux de résolution dans un même maillage, souvent par des techniques

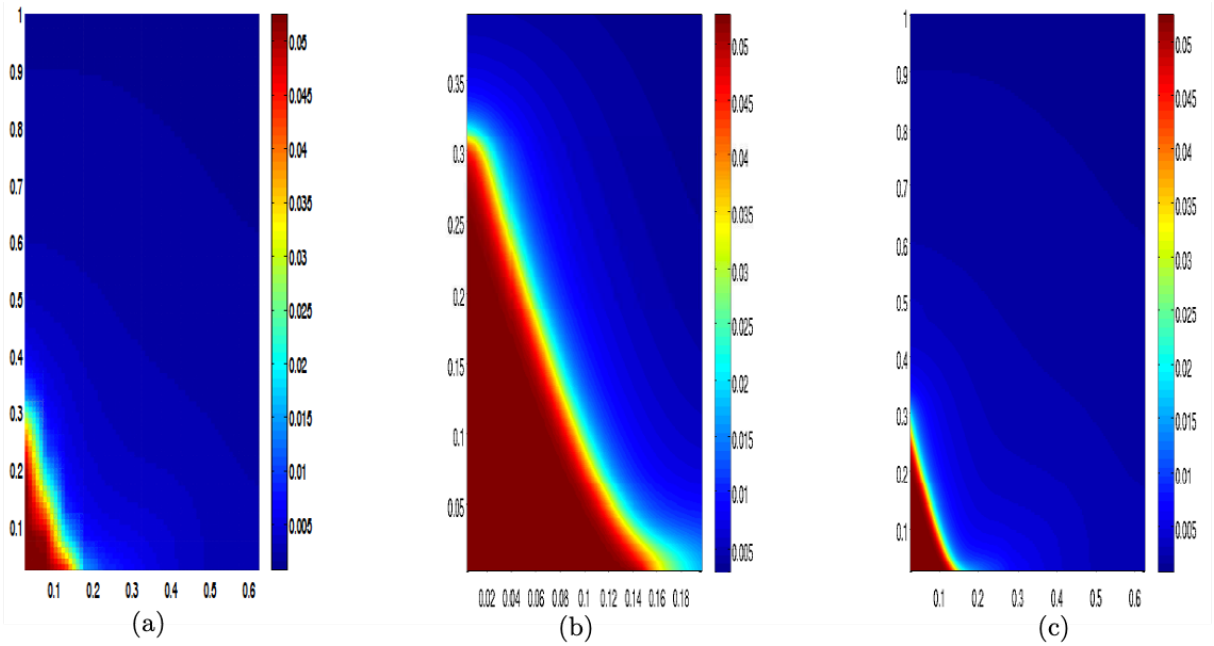


FIGURE 4.1 – Exemple d'utilisation de la méthode MLAT pour la simulation d'une flamme laminaire. Fraction massique de méthane sur (a) le maillage grossier couvrant tout le domaine, (b) le maillage fin couvrant uniquement la physique d'intérêt et (c) le maillage final issu de la combinaison entre les maillages (a) et (b). Issu de [118].

de transformation d'ondelettes ou d'approches hiérarchiques. Elles permettent une représentation efficace des phénomènes à différentes échelles spatiales, en adaptant dynamiquement la résolution du maillage pour capturer les détails fins là où cela est nécessaire et en utilisant des niveaux de résolution plus bas pour les régions où la variation de l'erreur est moins sensible. Les variables conservatives sont d'abord calculées sur un maillage grossier, puis approximées sur un maillage plus fin à l'aide d'un opérateur prédictif permettant d'évaluer la valeur des variables [117] sur un maillage plus raffiné. En comparant ces deux solutions et à l'aide d'un opérateur d'erreur [56], l'algorithme parvient à affecter un masque sur le maillage, en ciblant les zones ayant une erreur plus grande qu'un seuil limite et devant donc être raffinées davantage. Ainsi, le maillage va s'adapter à chaque pas de temps en assurant une bonne résolution des phénomènes d'intérêts, tout en conservant une structure hiérarchique, permettant à l'algorithme d'obtenir une grande efficacité et d'avoir un coût relativement faible. Cependant, leur implémentation est légèrement plus complexe que les autres méthodes présentées ici. Une application de cette méthode est présentée en Fig. 4.2 pour la configuration GraVent de l'université de

Munich [15].

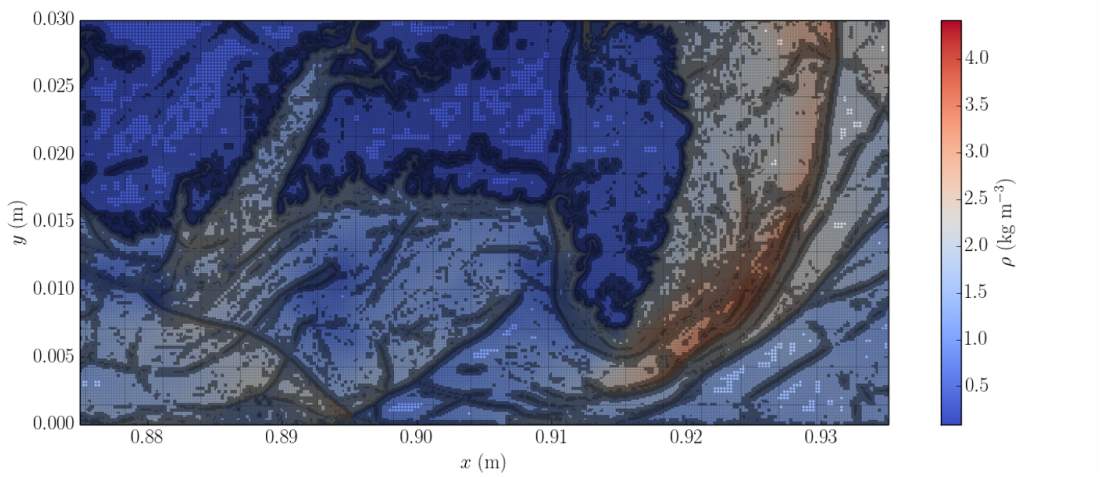


FIGURE 4.2 – Exemple d'utilisation de la méthode MR pour la propagation d'un front de flamme dans un canal obstrué [15]. Visualisation de la densité et du maillage adapté. Issu de [84].

- **Adaptive Mesh Refinement (AMR) [12] :** Cette dernière méthode est celle utilisée dans ce manuscrit. Contrairement à la méthode MLAT, elle n'utilise qu'une seule grille qui est modifiée au cours du calcul. Lorsqu'un phénomène d'intérêt est détecté, à l'aide de critères d'erreurs [9] ou de grandeurs physiques instantanées [127], des mailles sont rajoutées dans ces zones pour venir augmenter la résolution de ces quantités. L'implémentation de cette méthode est plus simple que celle de la MR et permet également au maillage de s'adapter à des géométries complexes. Elle est notamment plus adaptée à l'approche de maillage non structuré utilisée par le solveur AVBP utilisé ici. Cependant, l'ajout ou le retrait de cellules peut dégrader la qualité du maillage, et ainsi la précision du calcul. De plus, les gains obtenus en termes de coût de calcul sont souvent moins importants que pour la méthode MR. Un exemple de l'application de cette méthode sur la simulation d'une flamme turbulente est montré en Fig. 4.3.

Dans le contexte spécifique de ces travaux, qui ciblent la LES de déflagrations dans des géométries complexes, confinées et obstruées, la méthodologie AMR est construite avec l'objectif de satisfaire les propriétés suivantes :

- **Massivement parallèle :** bien que la parallélisation de l'AMR soit complexe à

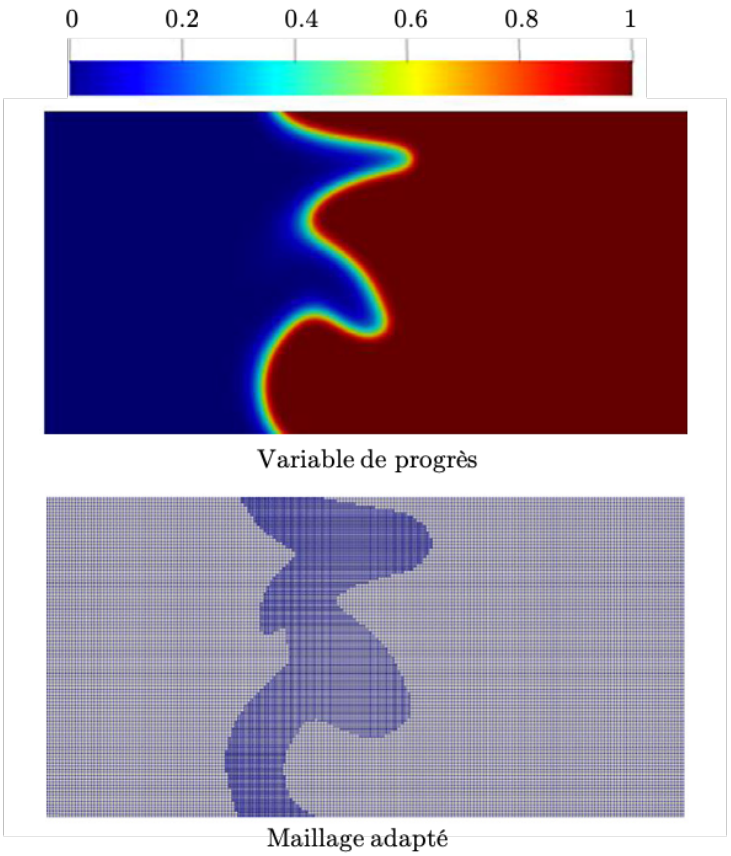


FIGURE 4.3 – Exemple d'utilisation de la méthode AMR pour la propagation d'une flamme turbulente. Visualisation de la variable de progrès et du maillage adapté. Issu de [22].

cause des notions d'équilibrage de charge et de communication parallèle entre les différentes parties du maillage non structuré, elle est essentielle pour permettre la simulation de configurations d'échelles géométriques importantes.

- **Capable de s'ajuster à des frontières complexes :** les applications industrielles ont souvent des géométries contenant des obstacles [15, 89]. Dans ce cadre, l'approche est basée sur des maillages non structurés et conformes, adaptés aux caractéristiques du solveur LES utilisé.
- **Basée sur des grandeurs physiques instantanées :** l'approche LES rend difficile la mise en œuvre d'une approche basée sur des critères d'erreur, qui doivent prendre en compte l'effet du filtre LES pour l'écoulement et la combustion pour ne pas dégénérer vers la DNS, comme rappelé en Section 1.4.2. Une approche plus empirique, ciblant des caractéristiques physiques importantes de l'écoulement et

de la flamme dans le contexte d'une déflagration est développée.

- **Basée sur des critères de raffinement de maillage génériques et indépendants de l'utilisateur** : l'AMR a été largement utilisé pour la simulation de flammes turbulentes propagatives [22, 82, 93, 94, 123, 129], mais la plupart des méthodes proposées dépendent de seuils spécifiques au cas étudié. En effet, la plupart des critères utilisés pour déterminer où un maillage fin est nécessaire reposent souvent sur des grandeurs dimensionnelles : gradients de vitesse, de température ou d'espèces [22, 109], énergie cinétique turbulente [7], vorticité [66, 82] ou taux de dégagement de chaleur [54, 82]. Même avec une adimensionnalisation appropriée, ces grandeurs peuvent nécessiter un seuil arbitraire qui dépend fortement du cas. Ces seuils ne sont pas connus *a priori* et sont difficilement valides sur la large gamme d'échelles rencontrée dans une configuration de déflagration, où la flamme passe d'un régime laminaire à basse vitesse à un régime de flamme rapide proche de la vitesse du son. Malgré ces potentielles difficultés, ces approches ont été utilisées dans le contexte des déflagrations et ont montré de bons résultats. Par exemple, Xiao et al. [131] ont utilisé une méthode AMR basée sur les gradients de vitesse et de densité pour une propagation turbulente de flamme dans un canal rempli d'obstacles, en donnant un seuil adapté en entrée. Sengupta [112] a utilisé une approche AMR similaire pour une explosion dans une chambre obstruée pour suivre l'évolution des structures tourbillonnaires à l'aide d'un critère basé sur la vorticité, en donnant lui aussi un seuil adapté a-priori. Certains auteurs ont proposé des formulations adimensionnelles pour détecter l'évolution des vortex [72, 99, 132] ou de la flamme [93, 94, 123]. Ces approches permettent d'obtenir des senseurs, permettant la détection de quantités d'intérêt, qui pourraient être utilisés sur différents cas sans devoir être adaptés. Cependant, aucune méthode liant à la fois ce type de critères génériques basés sur la flamme et la turbulence n'est disponible pour l'étude de flammes turbulentes propagatives.
- **Capable de suivre la dynamique des phénomènes d'intérêt** : le maillage doit évoluer dynamiquement et son déclenchement doit se faire en se basant sur des paramètres liés à la propagation des grandeurs d'intérêt. Il existe un grand nombre de critères de déclenchement de remaillage dans la littérature. Une méthode

simple consiste à définir une fréquence de temps fixe [1, 2] ou à utiliser un déplacement spatial minimum [57]. Ces approches ne sont cependant pas génériques, car elles reposent sur des choix de valeurs des paramètres fortement dépendants du cas d'étude et difficile à déterminer *a priori*. Ce choix est d'autant plus difficile dans un contexte d'explosion avec des phénomènes physiques qui peuvent avoir un temps caractéristique très différent au cours de la propagation du front de flamme. Par exemple, dans un cas d'explosion, la flamme accélère et la vitesse absolue du front de flamme peut augmenter fortement, passant de l'ordre de 0.1 m/s dans la phase laminaire initiale à 10^2 m/s dans les phases finales : dans cette situation, la fréquence des adaptations du maillage devrait donc augmenter au cours de la simulation, pour s'adapter au processus d'accélération de la flamme, ce qui n'est pas possible en se basant sur un paramètre prédéfini par l'utilisateur. Ainsi, le développement d'une méthode automatique est nécessaire pour à la fois s'assurer de la bonne résolution des grandeurs d'intérêt à chaque instant, mais également pour éviter un remaillage trop fréquent qui serait alors très couteux.

4.1 Construction de la méthodologie Turbulent Flame Propagation AMR (TFP-AMR)

La méthode se concentre sur les déflagrations dans des géométries confinées et obstruées. Les caractéristiques physiques d'intérêt sont ainsi la flamme et les structures tourbillonnaires résolues qui entraînent la phase d'accélération de flamme. Cette hypothèse est choisie suite aux différentes simulations d'explosions disponibles dans la littérature ayant montré la contribution significative de l'interaction flamme-vortex dans les mécanismes d'accélération de flamme menant aux explosions ([14, 42, 59, 107, 124]). Le type de grandeur d'intérêt pourrait éventuellement être étendue en fonction de la physique concernée. Par exemple, lorsque le processus d'accélération de flamme est suffisamment fort, il peut conduire à la formation de chocs : leur interaction avec la flamme et l'écoulement peuvent jouer un rôle important (notamment dans la transition à la détonation), nécessitant la définition de cibles supplémentaires non considérées dans cette étude. Les phénomènes de couche limite sont également écartés, mais ils peuvent jouer un rôle fondamental dans

des configurations peu obstruées, comme dans le cas canonique d'une déflagration dans un tube lisse. L'objectif de la méthode TFP-AMR (pour Turbulent Flame Propagation AMR) est triple :

1. Suivre l'évolution dynamique de la flamme et des structures tourbillonnaires à l'aide de senseurs,
2. Déterminer, de manière automatique, quand une adaptation du maillage doit être déclenchée et
3. Déterminer la distribution de la taille locale de maille, aussi appelée métrique, requise pour l'adaptation, afin d'assurer la bonne résolution des phénomènes physiques survenant lors d'une propagation de flamme turbulente.

La méthode AMR est également indépendante de la libraire AMR choisie et peut être utilisée avec n'importe quelle libraire AMR basée sur des maillages non structurés avec des valeurs stockées aux nœuds du maillage. La construction de la métrique cible est décrite en Fig. 4.4. Pour suivre les phénomènes physiques d'intérêt, un senseur est défini. Il identifie soit la flamme, soit les structures tourbillonnaires dans le contexte de déflagrations. Il doit être basé sur une quantité physique, instantanée et de préférence sans dimension, et constitue la QoI. En s'appuyant sur ce senseur, des critères sont appliqués pour construire un champ de masque de métrique M, qui va de M=1 dans les régions où un maillage fin (Δ_x^{fine}) est requis, à M=0 dans les régions où un maillage grossier (Δ_x^{coarse}) est jugé suffisant. Dans ce travail, ces critères sont basés sur des valeurs seuils : si la valeur locale d'une QoI devient supérieure à un seuil fixe, le critère est satisfait, ce qui fait prendre localement, au champ de masque de métrique correspondant, la valeur de M=1. Sinon, M=0. À partir de la valeur locale du champ de masque de métrique, la taille de cellule cible pour l'AMR est alors déterminée et est définie par l'équation suivante :

$$\Delta_x = \Delta_x^{\text{fine}} + \left(\Delta_x^{\text{coarse}} - \Delta_x^{\text{fine}}\right)(1 - M)\,. \tag{4.1}$$

De plus, une transition progressive entre Δ_x^{fine} et Δ_x^{coarse} est assurée grâce à une contrainte sur le taux de croissance maximal, c'est-à-dire le ratio maximum de taille de deux arêtes adjacentes. Le choix de laisser l'utilisateur définir cette valeur, et non d'utiliser des cri-

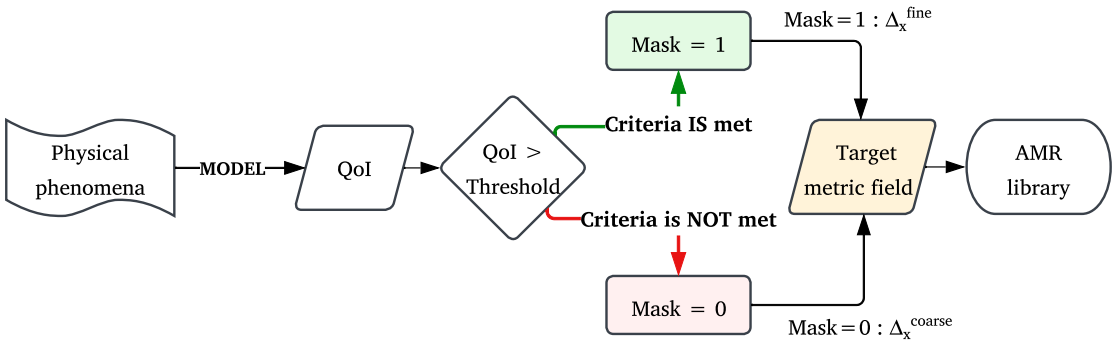


FIGURE 4.4 – Schéma de principe de la construction de la métrique à partir des phénomènes physiques pré-identifiés.

tères de convergence, est retenu afin d'obtenir des maillages de tailles raisonnables. Il est possible d'estimer à priori, en connaissant le volume de la géométrie, le taille du maillage homogène correspondant à une résolution Δ_x^{fine}. Ainsi, il est possible de définir la taille cible en choisissant un nombre maximal de mailles à ne pas dépasser. Lorsqu'une adaptation du maillage est nécessaire, le champ métrique cible complet est transmis à la libraire AMR. Dans ce travail, la libraire AMR kalpaTARU est utilisée (Section 4.2). La libraire gère l'adaptation parallèle et la génération du maillage dont la distribution de taille de cellule suit le champ métrique cible. Elle prend également en charge l'interpolation des champs nécessaire pour la poursuite du calcul sur le nouveau maillage.

L'utilisation du champ de masque de métrique est illustré dans la Fig. 4.5 : les zones où se trouvent la flamme et les structures tourbillonnaires sont caractérisées par un champ de masque de métrique égal à un. Dans cette zone, une résolution fine du maillage est ciblée. La taille du maillage passe ensuite progressivement à des valeurs plus grandes dans les zones qui ne présentent pas d'intérêt et où le champ de masque de métrique est donc égal à zéro. Les senseurs et les critères permettant de construire de ces masques sont construits indépendamment pour la flamme et les structures tourbillonnaires. Ils sont présentés dans les Section 4.3 et 4.4, respectivement.

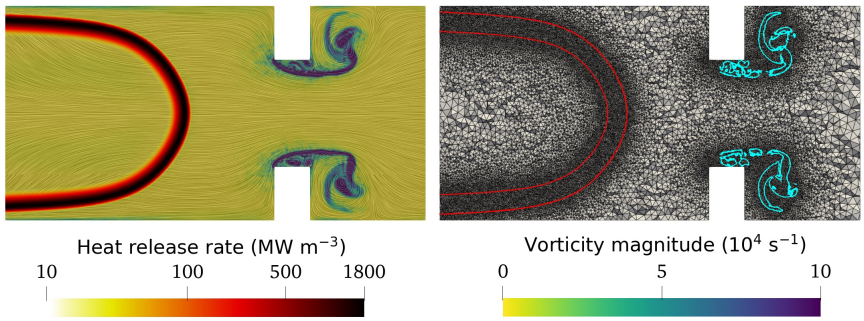


FIGURE 4.5 – Identification de la QoI et maillage adapté correspondant dans une configuration 2D simple d'interaction flamme/obstacle. À gauche : LIC (Line Integral Convolution) du champ de vitesse, avec la magnitude de la vorticité (échelle de bleus) ainsi que le taux de dégagement de chaleur (échelle de rouges). À droite : les physiques d'intérêt (flamme et vortex) sont identifiés par des contours (rouge et bleu, respectivement) qui délimitent la région où M=1. Le maillage adapté qui résulte de ces métriques est également visible.

4.2 La libraire AMR kalpaTARU

Il existe un grand nombre de librairies de remaillage disponibles comme AMReX [133], libMesh [78], Peano [128] ou MMG3D [40]. C'est cette dernière librairie qui est utilisée dans le cadre de ces travaux, suite aux résultats déjà obtenus de son utilisation avec le solveur LES AVBP [39], mais sans capacité d'exécution parallèle de l'outil. Afin d'assurer la liaison entre le solveur, AVBP, et la librairie de remaillage, MMG3D [37, 40] dans un paradigme massivement parallèle, une librairie de remaillage, **kalpaTARU**, a été développée au CERFACS [122] dans des travaux récents de G. Staffelbach et de P. Mohanamuarly. Cette librairie gère notamment la conversion des données sortant du solveur. Elle implémente un algorithme parallèle itératif qui transmet le maillage de chaque partition à l'outil de remaillage de MMG3D, avec re-partitionnement du maillage et équilibrage de la charge à chaque étape. Elle gère également les consignes de convergence de l'algorithme, basées sur des critères de qualité du maillage, et l'interpolation des variables conservatives sur le maillage renvoyé par MMG3D. La librairie kalpaTARU est liée au solveur AVBP à l'aide d'une interface de programmation d'applications (API) en langage C pur. Toutes les données d'entrée, telles que le maillage, la métrique et les champs solution, sont partagées sous forme de pointeurs mémoire, évitant ainsi les transferts de données redondants et leur stockage. Après adaptation du maillage, les données locales, interpolées sur le maillage

adapté, sont directement copiées dans les tableaux AVBP. L'algorithme de fonctionnement du solveur LES couplé à de cette librairie est présenté en Fig. 4.6.

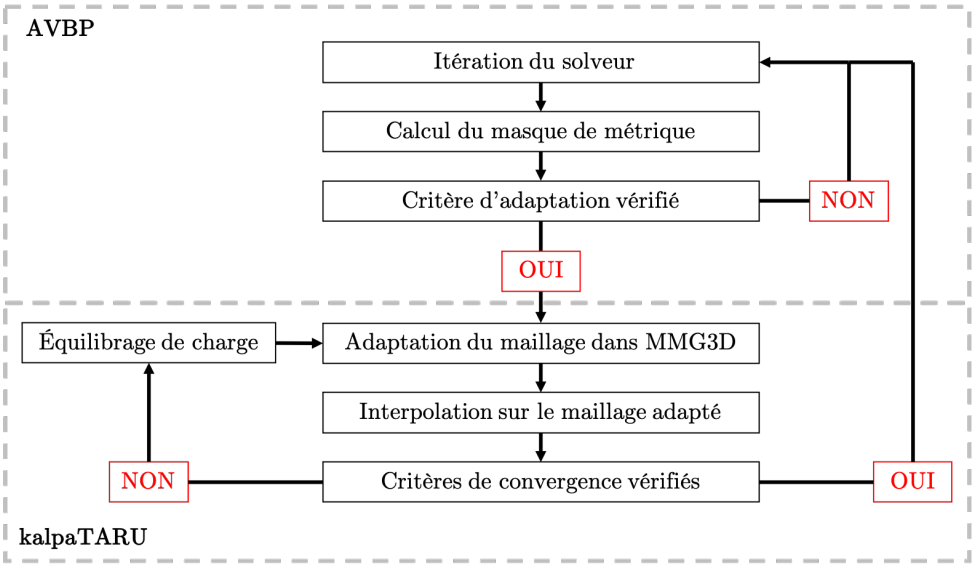


FIGURE 4.6 – Schéma fonctionnel de l'algorithme de couplage entre AVBP (haut) et kalpaTARU (bas).

Cet algorithme est décomposé en plusieurs étapes :

— **Itération dans le solveur :** les quantités physiques sont calculées par le solveur AVBP dans un premier temps.

— **Définition du champ de métrique :** un masque de métrique, valant 1 dans les zones d'intérêt et 0 ailleurs, est calculé à partir des QoI pour obtenir la métrique, correspondant au champ de taille de maille cible. Ce masque est lissé pour être compatible avec le taux de croissance maximal imposé.

— **Déclenchement d'une adaptation de maillage :** à l'aide du critère de déclenchement de remaillage, défini en Section 4.3.2, une adaptation est déclenchée si ce dernier est vérifié. Quand l'adaptation est déclenchée, les champs nécessaires (champ de métrique et de variables conservatives) sont récupérés en mémoire par kalpaTARU qui les formate pour les envoyer dans l'outil de remaillage de MMG3D.

— **Vérification des critères de convergence :** la dernière étape consiste à vérifier que les critères de qualité, calculés par kalpaTARU, sont bien satisfaits. Le critère utilisé par la librairie est la déviation maximale du champ de métrique, qui doit rester sous un certain seuil. Si ce critère est validé, alors le maillage adapté est renvoyé à AVBP et la simulation peut reprendre. Dans le cas contraire, le maillage

est renvoyé à MMG et une nouvelle adaptation est déclenchée.

— **Adaptation du maillage dans MMG3D :** le maillage est alors adapté pour correspondre au champ de métrique construit dans AVBP. Pour cela, une succession de plusieurs sous-adaptations a lieu. Le maillage est alors redécoupé à chaque itération jusqu'à satisfaire des critères de qualité. Le maillage adapté est alors renvoyé dans kalpaTARU pour vérifier sa conformité.

— **Interpolation sur le maillage adapté :** le champ de métrique et les champs nécessaires à la poursuite du calcul sont ensuite interpolées sur ce nouveau maillage. Les informations supplémentaires concernant l'interpolation utilisée sont discutées en Section 4.2.3.

Cette librairie d'adaptation et d'équilibrage de charge, pour des maillages tétraédriques non structurés, a un fonctionnement massivement parallèle. Elle exploite la connaissance de la topologie du maillage pour obtenir une répartition optimale de la charge de calcul et des données, afin de garantir une efficacité parallèle maximale. L'outil de partitionnement hiérarchique des maillages et l'outil d'équilibrage de charge dans la libraire ont prouvé leur efficacité pour des tailles de maillages et pour des nombres de cœurs très grands [96]. Une approche itérative similaire à Benard et al. [9] est utilisée, où les éléments de partitions voisines sont gelés lors de la première étape d'adaptation et une étape de rééquilibrage du maillage garantit que ces éléments gelés sont poussés vers les régions internes lors de la prochaine étape d'adaptation (Fig. 4.7). Les stratégies de partitionnement, d'équilibrage de charge et d'interpolation sont décrites en Section 4.2.1, 4.2.2 et 4.2.3.

4.2.1 Parallélisation de l'algorithme d'adaptation

La librairie de remaillage utilisée ici (MMG3D) n'est pas parallèle. Ainsi, une stratégie d'adaptation de maillage isotropique est mise en œuvre. Elle nécessite l'utilisation d'un champ métrique scalaire unique [2, 40] pour imposer une distribution souhaitée des tailles d'arête des mailles. L'algorithme s'arrête lorsqu'un seuil de convergence souhaité, basé sur la déviation maximale du champ de métrique, est atteint. kalpaTARU utilise des librairies de partitionnement comme Zoltan [16] et ParMetis [73]. Le processus d'adaptation itérative complet est illustré dans la Fig. 4.7 en utilisant un maillage 2D simple et un champ métrique sur quatre cœurs.

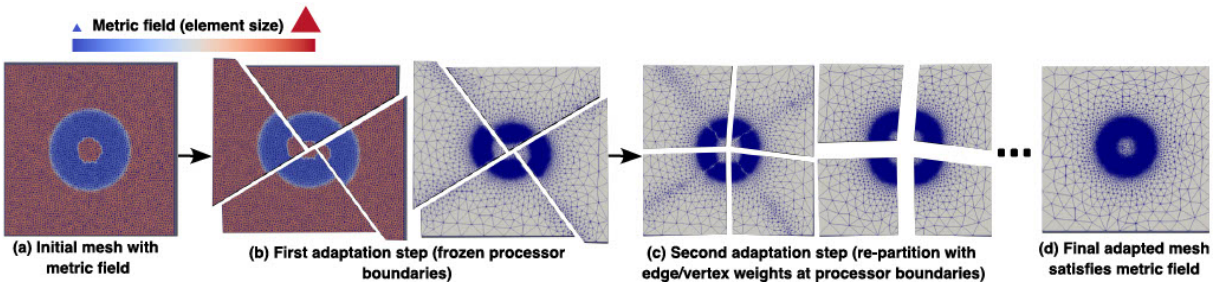


FIGURE 4.7 – Schéma du processus itératif d'adaptation parallèle sur quatre cœurs MPI parallèles ; (a) maillage initial et champ métrique défini par l'utilisateur, (b) première étape d'adaptation, (c) deuxième étape d'adaptation avec répartition de charge et (d) maillage adapté final. Les quatre frontières de cœurs sont indiquées par les coupes dans le maillage et les tailles relatives des éléments sont indiquées dans la légende. Tiré de [122]

Pour minimiser le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre ce seuil, les poids des sommets et des arêtes dans le graphe de partitionnement sont définis à des valeurs élevées aux frontières des partitions (généralement un facteur 10). Cette pénalité force le partitionneur à mettre à jour les partitions, où les éléments de mauvaise qualité, au bord de partition de l'itération précédente, peuvent maintenant être adaptés. Le processus est répété de façon itérative jusqu'à ce que le critère de convergence sur l'ensemble du maillage soit satisfait.

4.2.2 Équilibrage de charge

L'équilibrage de charge, ou *Load Balancing*, permet de repartir les éléments entre différentes partitions afin d'optimiser l'efficacité de la parallélisation du calcul. Lorsque le maillage est adapté, le nombre d'éléments dans chaque partition peut fortement changer, conduisant à un déséquilibre de la charge. Dans ce cas, certaines partitions auront une charge plus importante que d'autres et prendront plus de temps pour effectuer une tâche en parallèle. La partition avec une charge plus faible va alors attendre les autres pour poursuivre la simulation et ce temps perdu vient directement baisser l'efficacité de la méthode. La répartition de la charge est effectuée en attribuant des poids aux nœuds et aux éléments, permettant ainsi de conserver un partitionnement constant pour les nœuds n'ayant pas été bougés et ainsi de réduire le coût de cette opération. L'équilibrage de charge utilisé dans kalpaTARU est un des points novateurs de la librairie. Il supporte notamment des maillages extrêmement grands.

4.2.3 Interpolation des variables

À la fin de chaque itération d'adaptation de maillage et avant d'être renvoyée dans la boucle temporelle du solveur, la solution est interpolée sur le maillage nouvellement adapté. Il existe un grand nombre d'algorithmes d'interpolation, mais deux d'entre eux ont été implémentés et évalués dans kalpaTARU :

— **Interpolation barycentrique linéaire :** ce type d'interpolation est généralement simple à mettre en œuvre et a une bonne précision dans les cas où le maillage est de bonne qualité.

— **Interpolation linéaire des moindres carrés :** plus difficile à implémenter, ce type d'interpolation est notamment utile dans le cas de signaux bruités et ses paramètres peuvent être adaptés en fonction des cas.

Plusieurs comparaisons préliminaires ont été effectuées et l'interpolation barycentrique a été retenue pour l'ensemble des résultats présentés dans ce manuscrit, de par son faible coût de calcul et son efficacité de calcul. Bien que l'interpolation joue un rôle dans les résultats, elle a un impact assez faible sur la précision du calcul. En effet, la méthodologie AMR utilisée impose une résolution cible constante (Δ_x^{fine}) dans les régions d'intérêt qui est propagée par l'opération de dilatation du masque de métrique et la contrainte sur le taux de croissance de la taille de maille. Ainsi, dans les zones d'intérêts, la taille de maille reste quasi-constante entre les maillages avant et après adaptation, avec peu de modifications des mailles, ce qui assure de très faibles erreurs d'interpolation.

4.3 Développement d'un critère de raffinement pour la flamme et d'une méthode de déclenchement de remaillage

Dans cette section, seuls les aspects AMR liés à la flamme sont décrits. La méthodologie concernant les structures tourbillonnaires est présentée dans la Section 4.4. Le but ici est de développer une méthodologie permettant d'à la fois détecter la flamme pour venir raffiner le maillage dans cette zone, mais également de suivre sa propagation dans le domaine.

Pour cela, il faut, dans un premier temps, définir un senseur de flamme permettant de la cibler, puis un critère afin de venir adapter le maillage dans les zones où elle se trouve. Il faut également développer une méthode automatique d'adaptation de maillage afin d'assurer la résolution de la flamme à chaque instant.

4.3.1 Définition du masque de flamme

L'un des principaux phénomènes physiques d'intérêt dans une déflagration est le front de flamme. Celui-ci possède une épaisseur et une vitesse de propagation propres. La structure de flamme se traduit par de forts gradients de température, d'espèces et de densité. Il est donc impératif d'avoir une résolution de maillage suffisante pour bien résoudre les caractéristiques du front de flamme. Comme rappelé en Section 3.2.2, l'utilisation du modèle de flamme épaissie DTFLES [85] permet d'épaissir la flamme et ainsi réduit le besoin en termes de résolution de maillage. Cependant, le facteur d'épaississement doit être contrôlé afin de permettre la bonne résolution de la flamme. Par exemple, dans une configuration confinée, il faut s'assurer que La flamme épaissie ait une épaisseur inférieure à l'espace entre deux obstacles. Ainsi, il faut contrôler le niveau d'épaississement pour assurer le bon comportement du modèle. Dans cette méthode AMR, la QoI utilisé pour cibler la position de la flamme est le senseur de flamme θ_{F} utilisé dans le modèle d'épaississement dynamique [85] pour n'appliquer le modèle TFLES que dans la zone de flamme. Ce champ est calculé à chaque itération et dépend du type de mécanisme chimique utilisé. Dans le cas d'un mécanisme global, il est défini par l'Eq. (3.36). Pour cibler la zone où le maillage doit être fin, un champ de masque de métrique est construit sur la base d'un critère de type seuil. Pour cibler exclusivement le front de flamme, une valeur seuil $\theta_{\mathrm{F}}^{\mathrm{lim}} = 1/2$ est appliquée au champ du senseur de flamme. Le champ de masque de métrique est ensuite défini comme suit :

$$M(\theta_{\mathrm{F}}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \theta_{\mathrm{F}} \geq \theta_{\mathrm{F}}^{\mathrm{lim}} \\ 0 & \text{si } \theta_{\mathrm{F}} < \theta_{\mathrm{F}}^{\mathrm{lim}}. \end{cases} \tag{4.2}$$

Cette définition du champ de masque de métrique garantit que la taille de maille Δ_x, et donc $\mathcal{F}$, restent constants dans le front de flamme, pour une flamme prémélangée

dont l'épaisseur laminaire est constante. Le choix du senseur de flamme est totalement indépendant de la nature des équations résolues : le senseur du modèle DTFLES choisi ici peut tout à fait être utilisé en DNS comme en LES. Par ailleurs, la méthode n'est pas restreinte à l'utilisation du senseur θ_F (Eq. (3.36)) mais peut s'appliquer avec n'importe quel autre senseur.

4.3.2 Stratégie de déclenchement de l'adaptation du maillage

Pendant la propagation du front de flamme, des adaptations de maillages successives assurent que les phénomènes d'intérêt ne pénètrent jamais les régions moins résolues du maillage. Cela entraînerait différents types d'erreur :

— Une forte variation de l'échelle de filtre, pour l'écoulement et la combustion, ce qui serait préjudiciable pour la précision de la LES.

— Cela entraînerait également de fortes erreurs d'interpolation lors de l'adaptation du maillage.

Ce type de problème est illustré et discuté plus en détail dans la Section 4.3.4. Cependant, comme le processus d'adaptation du maillage représente un coût supplémentaire, s'il est déclenché trop souvent, les coûts cumulés des adaptations peuvent devenir prohibitifs et l'emporter sur les gains dus à la réduction de la taille du maillage.

Dans le but d'obtenir un critère de déclenchement capable d'adapter la fréquence de remaillage, une approche basée sur la variation du champ de masque de métrique M^*, a été proposée dans la thèse de Sengupta [112]. Elle compare le masque initial de métrique M_0, c'est-à-dire le champ de masque de métrique calculé avant le premier pas de temps sur le maillage actuel, avec le masque de métrique actuel M, c'est-à-dire le champ de masque de métrique au pas de temps actuel. La variation relative du masque M^* est ensuite calculée comme suit aux nœuds du maillage :

$$M^* = \frac{\sum_{n=0}^{nnodes} \mid M_0^n - M^n \mid}{\sum_{n=0}^{nnodes} M_0^n}, \tag{4.3}$$

où l'exposant indique le nœud n du maillage et $nnodes$ est le nombre de nœuds total

du maillage. Ce rapport représente la variation relative du masque de métrique cible par rapport au masque de métrique utilisé lors de la dernière adaptation de maillage (qui a donné le maillage courant). Plus sa valeur est élevée, plus grande est la zone où les phénomènes d'intérêt évoluent sur un maillage grossier, c'est donc une mesure globale de la dégradation de la précision numérique. De façon symétrique, les zones sans intérêt pour la physique maillées finement augmentent aussi la valeur de ce rapport, ce qui traduit le fait qu'elles correspondent à un surcoût de calcul inutile. L'adaptation est déclenchée en fonction d'une valeur seuil M^*_{lim} définie par l'utilisateur. La méthode de variation du masque a montré des résultats satisfaisants dans les travaux de Sengupta [112] à condition que le seuil soit correctement choisi. Cependant, la valeur dépend toujours du cas d'étude et ne peut pas être connue *a priori* : si la valeur est trop basse, l'adaptation du maillage est déclenchée trop fréquemment ; si elle est trop élevée, la flamme peut sortir de la zone de maillage fin, entraînant de fortes erreurs d'interpolation et des résultats inexacts (voir Section 4.3.4 pour l'illustration de ce phénomène). De plus, le critère de l'Eq. (4.3) est un critère global, qui peut conduire localement à une résolution de la physique d'intérêt sur des zones grossières du maillage. Ce n'est pas acceptable pour des phénomènes de déflagration, ou la dynamique locale, notamment celle du point le plus amont de flamme, va se répercuter sur la dynamique globale par des effets de rétroaction sur la création de surface de flamme. À titre d'illustration, une flamme initialement laminaire et donc lisse peut localement s'accélérer ou se plisser, se propageant dans des zones de maillage grossier sans augmenter significativement la valeur de M^*, comme illustré en Fig. 4.8. Une flamme initialement laminaire et lisse est entraînée par la forte vitesse d'écoulement créée par la contraction au niveau des obstacles. Bien que la majeure partie de la flamme reste dans une zone raffinée ($M = 1$, $M_0 = 1$) et que la zone raffinée puisse s'étendre devant la flamme ($M = 0$, $M_0 = 1$), l'extrémité de la flamme est aspirée par l'écoulement et s'étend dans une région de maillage grossier ($M = 1$, $M_0 = 0$). Comme il s'agit d'une petite partie de la flamme, M^* est très faible et l'adaptation du maillage n'est pas déclenchée, bien que l'impact sur la dynamique globale du phénomène soit important.

Pour éviter ces mauvais comportements locaux, une méthode de déclenchement basée sur des informations locales est proposée dans ces travaux. Elle repose sur un paradigme simple : les physiques d'intérêts, telles que la flamme, doivent être toujours incluses dans

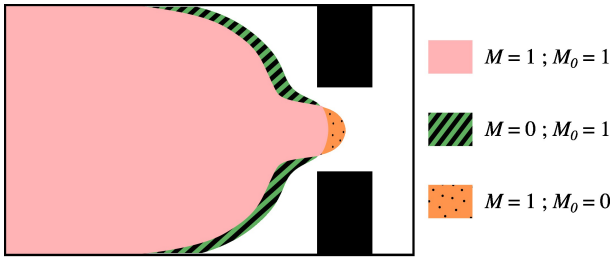


FIGURE 4.8 – Illustration de la limitation de la méthode de variation du masque [122]. Schéma d'une flamme lisse entrant localement dans des régions de maillage grossier en raison d'une réduction de section de passage.

des régions fines du maillage à chaque pas de temps. Cette méthode est appelée inclusion du masque dans la suite du manuscrit.

La formulation est basée sur la comparaison entre le champ initial de masque de métrique M_0 et le champ de QoI (θ_F pour la flamme). Dès que le phénomène d'intérêt quitte localement la région fine du maillage, une adaptation est déclenchée. Pour ce faire, ces deux champs sont comparés à chaque pas de temps et à chaque nœud de maillage. L'adaptation du maillage est déclenchée dès que la condition suivante est satisfaite :

$$\theta_F^n - M_0^n > \theta_F^{\text{lim}}, \quad \text{pour au moins un nœud n du maillage.} \tag{4.4}$$

Ce passage d'une condition globale à une condition locale stricte, a un bénéfice double sur la précision des résultats :

— La formulation de déclenchement par inclusion du masque garantit la résolution fine des phénomènes physiques d'intérêt en chaque point à chaque pas de temps.

— Lors d'une étape d'adaptation, les variables physiques sont interpolées, la taille locale de la maille est la même (Δ_x^{fine}) dans les zones d'intérêt, limitant ainsi les erreurs d'interpolation.

4.3.3 Dilatation du masque de métrique

La méthode d'inclusion du masque, décrite dans la Section 4.3.2, déclenche automatiquement une adaptation du maillage dès qu'un point du front de flamme quitte la zone raffinée. En l'état, cela conduit au déclenchement d'une adaptation dès que la flamme se propage localement sur la distance d'une cellule, et donc une fréquence d'adaptation

déraisonnablement élevée. Pour maintenir une fréquence d'adaptation raisonnable, une solution consiste à étendre la région de maillage fin devant la flamme : la fréquence de remaillage va alors dépendre du rapport entre la vitesse absolue du front de flamme et de la distance sur laquelle le maillage fin est étendu. Cette extension de la zone de maillage fin en amont de la flamme permet une fréquence plus faible d'adaptations (réduisant ainsi le coût total des étapes d'adaptation), mais au détriment d'un maillage plus lourd (augmentant le coût des itérations du solveur LES). Cette extension de la zone raffinée est obtenue par une opération morphologique, appelée dilatation en morphologie mathématique. Elle est appliquée au champ de masque de métrique pour étendre la région raffinée (où $M = 1$) d'un nombre donné de cellules de maillage devant la flamme, qui se traduit directement en une distance en utilisant la taille locale de la maille. Si cette procédure est directe à mettre en œuvre sur maillages structurés, elle repose sur des opérateurs spécifiques sur des maillages non structurés. Une méthode de gather/scatter avec réduction par un opérateur 'maximum' est employée ici, et son principe est illustré dans la Fig. 4.9. En première étape, la valeur maximale des vertex composant cellule est stockée au centre de la cellule (gather max, Fig. 4.9a). Les valeurs aux cellules obtenues sont ensuite redistribuées aux vertex de la cellule (scatter max, Fig. 4.9b). Cela dilate effectivement le masque de métrique dans l'espace d'une cellule à chaque fois que l'opération est effectuée (Fig. 4.9c).

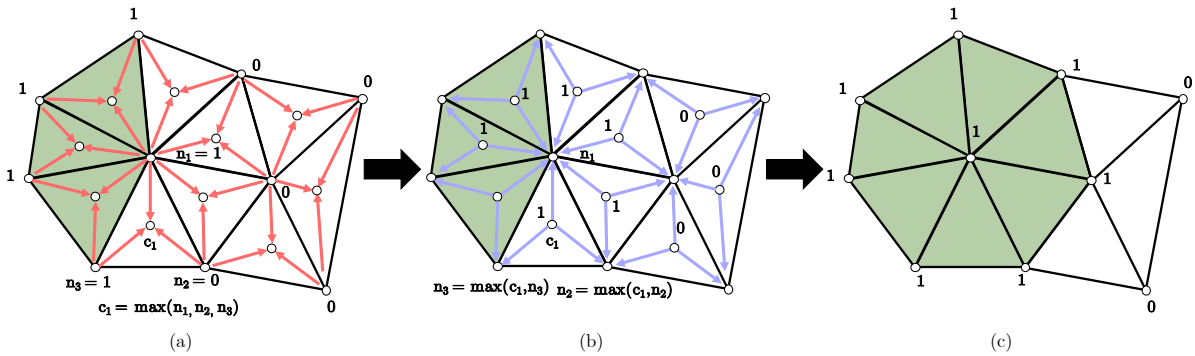


FIGURE 4.9 – Illustration de la méthode de type gather/scatter max utilisée pour dilater le masque de métrique, qui définit la zone raffinée. (a) Opération de gather max : le centre de la cellule rassemble les valeurs trouvées aux vertex de la cellule et prend la valeur maximale ; (b) opération de scatter max : la valeur de la cellule est redistribuée aux vertex de la cellule, chaque vertex prenant la valeur maximale de ses centres de cellules connectées ; (c) valeurs finales aux vertex.

Pour limiter un surcoût lié à des maillages plus importants avec le processus de dilatation, des considérations physiques sont introduites. Tout d'abord, il convient de noter que le plissement de la flamme créé par l'interaction flamme-vortex se produit principalement du côté des gaz frais, les vortex dans les gaz brûlés étant moins énergétiques en raison de l'augmentation de la viscosité due à l'élévation de la température, avec un faible rôle sur le plissement de la flamme. Par conséquent, il est seulement nécessaire d'effectuer la dilatation dans la direction de la propagation de la flamme, c'est-à-dire dans la direction des gaz frais, qui peut être facilement détectée par la définition d'une variable de progrès c. Dans le contexte de la combustion entièrement prémélangée, l'expression de c utilisée est décrite en Eq. (2.35) et basée sur la fraction massique du combustible. où la variable de progrès va de $c = 0$ dans les gaz frais à $c = 1$ dans les gaz brûlés. Cela permet d'économiser significativement en termes de coûts de calcul sans compromettre la reproduction des principales caractéristiques de la propagation de la flamme. Le principe de la dilatation du champ de masque de métrique est illustré dans la Fig. 4.10a. En bas, le champ de masque de métrique n'est pas dilaté et la taille des cellules commence à augmenter progressivement devant la flamme conformément au taux de croissance maximal de taille de maille. En haut, le champ de masque de métrique est dilaté de trois cellules, ce qui donne un maillage fin qui s'étend en amont de la direction de propagation de la flamme, c'est-à-dire dans les gaz frais, identifiés par la variable de progrès c. Le nombre de cellules

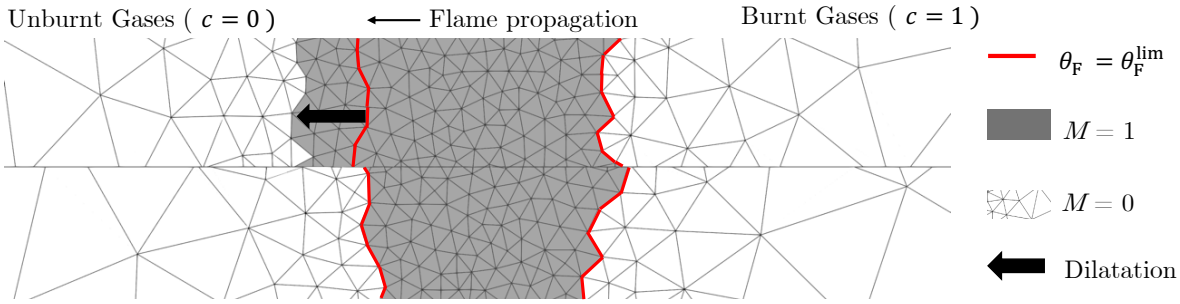


FIGURE 4.10 – Exemple d'une dilatation du champ de masque de métrique pour une flamme sur un maillage non structuré. Aucune dilatation du champ de masque de métrique (en bas) et dilatation de trois cellules (en haut) avec le contour du senseur de flamme où $\theta_F = \theta_{F_{limite}}$. Les gaz frais et les gaz brûlés sont indiqués avec les valeurs associées de la variable de progrès. La direction de la dilatation suit la propagation de la flamme vers les gaz frais.

par lesquelles le champ de masque de métrique est dilaté a un double impact sur le coût

de calcul total :

— Augmenter la dilatation du champ de masque de métrique entraîne, d'une part, une plus grande zone de maillage fin et, par conséquent, un coût de calcul plus élevé pour les itérations du solveur fluide.

— D'autre part, l'adaptation du maillage est déclenchée moins fréquemment, réduisant le coût de l'adaptation du maillage.

Par conséquent, un optimum doit être trouvé, comme discuté plus tard dans la Section 5.6.1. Cependant, un minimum d'une cellule doit être respecté afin d'assurer le fonctionnement correct de la méthode automatique de déclenchement de remaillage. Il convient de noter que ce choix ne devrait avoir qu'un impact marginal sur la précision du calcul, car les phénomènes d'intérêt restent résolus sur un maillage fin dans tous les cas, par construction du critère de déclenchement. Dans ce travail, sauf indication contraire, la dilatation du champ de masque de métrique est fixée à une cellule.

Le processus de déclenchement de l'adaptation du maillage est récapitulé dans la Fig. 4.11. Initialement (Fig. 4.11a), la région fine du maillage (en vert, $M_0 = 1$) englobe correctement le senseur de flamme (en rose). La région de maillage fin est dilatée d'un certain nombre de cellules devant la flamme. Ensuite (Fig. 4.11b), la flamme se propage jusqu'à atteindre la transition entre les régions de maillage fin et grossier (en bleu, $M_0 = 0$). À ce stade, une adaptation du maillage est déclenchée et la région de maillage fin se déplace vers les gaz frais (Fig. 4.11c) pour assurer une résolution correcte du front de flamme dans les temps suivants.

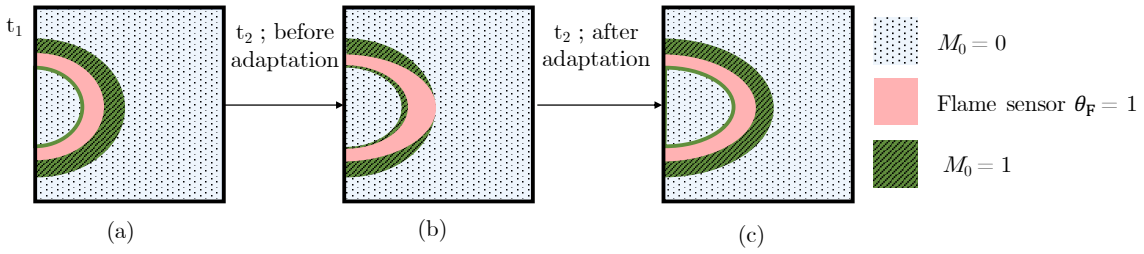


FIGURE 4.11 – Illustration de la méthode d'inclusion du masque pour la propagation de la flamme. (a) État initial : la flamme se propage dans une région de maillage fin en amont du front ; (b) Après un certain temps de simulation, une partie de la flamme se propage et atteint la fin de la zone de maillage fin et une adaptation est déclenchée ; (c) État initial du masque mis à jour après l'adaptation.

4.3.4 Application du critère de flamme sur un cas élémentaire de flamme plane laminaire en 3-D

Afin d'illustrer et de valider les différentes notions introduites dans les Section 4.3.2 et 4.3.3, plusieurs simulations de la propagation d'une flamme plane prémélangée méthane-air 3D et épaissie sont réalisées, comme résumé dans la Table 4.1. Les cas A et B sont utilisés pour mettre en évidence les limites de la méthode de déclenchement basée sur la variation du masque et l'importance de la dilatation, tandis que le cas C est supposé représenter la configuration optimale. Il convient de noter que, dans les cas A et B, la valeur de M^*_{limit} est délibérément fixée à un niveau élevé pour mettre en évidence ses limitations dans des cas extrêmes. Les principales caractéristiques de la flamme et les conditions opératoires sont résumées dans la Table 4.2.

TABLE 4.1 – Matrice des cas AMR pour évaluer l'influence de la méthode de déclenchement de l'adaptation et de la dilatation

Configuration	Dilatation	Déclenchement de remaillage	Seuil fixé
A - Variation du masque / Pas de dilatation	non	Eq. (4.3)	$M^*_{\text{limit}} = 50\%$
B - Variation du masque / Dilatation	1 point	Eq. (4.3)	$M^*_{\text{limit}} = 50\%$
C - Sortie du masque / Dilatation	1 point	Eq. (4.4)	Pas de seuil

TABLE 4.2 – Caractéristiques principales de la flamme CH_4-air et conditions de fonctionnement : richesse ϕ, vitesse laminaire de la flamme s^0_{L}, épaisseur laminaire de la flamme δ^0_{L}, température des gaz frais T_{u}, température des gaz brûlés T_{b} et pression initiale p_0.

ϕ (−)	s^0_{L} (m/s)	δ^0_{L} (mm)	T_{u} (K)	T_{b} (K)	p_0 (Pa)
0.8	0.282	0.43	300	2013	101325

Le modèle de flamme épaissie dynamique pour la LES (DTFLES) [34] est utilisé. Ce modèle applique un épaississement artificiel à la flamme en utilisant le senseur de Eq. (3.36). Le schéma cinétique chimique à deux étapes BFER [45] est utilisé. La flamme est résolue avec 5 cellules par épaisseur thermique ($N_{\text{c}} = 5$ dans l'Eq. (3.44)). La flamme est initialisée à partir de profils extraits d'une flamme 1-D calculée avec le solveur cinétique chimique Cantera [51]. Les conditions aux limites (BC) utilisent un formalisme de type NSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions) [101] et sont indiquées dans la Fig. 4.12 : la vitesse d'entrée est fixée à $u_{\text{BC}} = s^0_{\text{L}} - u_{\text{d}} = 0\,\text{m/s}$ de sorte que la flamme se

propage vers l'entrée (de droite à gauche) à une vitesse absolue de $u_\mathrm{d} = s_\mathrm{L}^0 = 0.282\,\mathrm{m/s}$. Il s'agit d'une validation de la méthode AMR dans le cas canonique d'une flamme laminaire propagative, représentative de la phase initiale d'un scénario de déflagration. Une première simulation sur un maillage statique et homogène avec $\Delta_x = 0.258\,\mathrm{mm}$ est réalisée, correspondant à un épaississement $\mathrm{F}_\mathrm{max} = 3$. Ce cas est considéré comme une référence (REF) pour valider les résultats des cas AMR. La vitesse de consommation s_c [102] est utilisée ici pour évaluer la précision des résultats. Elle s'exprime comme suit :

$$s_\mathrm{c} = -\frac{1}{\rho_\mathrm{u} Y_\mathrm{F,u}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\dot{\omega}_\mathrm{F}}{\mathcal{F}} \mathrm{d}x, \tag{4.5}$$

où $\dot{\omega}_\mathrm{F}$ est le taux de réaction du combustible et ρ_u la densité des gaz frais. L'objectif du cas test est de pouvoir retrouver les résultats du cas statique en ciblant la même résolution de maillage que le cas de référence, $\Delta_x^\mathrm{fine} = 0.258\,\mathrm{mm}$, dans les régions où les QoI sont détectées avec la méthode AMR. En dehors de ces régions, la taille de maille cible est augmentée d'un facteur 10 ($\Delta_x^\mathrm{coarse} = 2.58\,\mathrm{mm}$). La transition entre les régions de maillage fin et grossier est gouvernée par un taux de croissance maximal de 40%. Le premier maillage adapté, avec les conditions aux limites associées et un iso-contour de senseur de flamme, est présenté dans la Fig. 4.12.

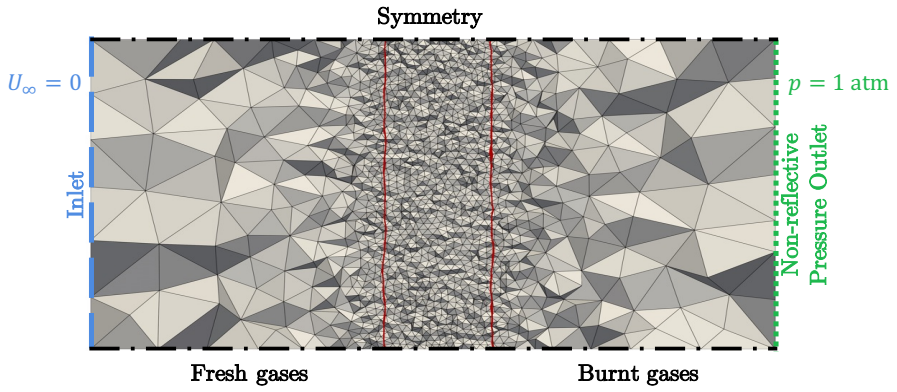


FIGURE 4.12 – Cas test de flamme laminaire plane 3D : vue en coupe du maillage initial adapté avec les conditions aux limites du domaine. Le front de flamme est délimité par un iso-contour du senseur de flamme, $\theta_\mathrm{F} = \theta_\mathrm{F}^\mathrm{lim}$.

L'évolution de la vitesse de consommation, pour chaque cas, présentée dans la Fig. 4.13. Étant donné que la flamme considérée ici est une flamme laminaire non étirée, la vitesse de consommation s_c devrait être égale à la vitesse laminaire de la flamme

s_L^0. Ce comportement est confirmé par la simulation REF. Les méthodes AMR A et B présentent des pics non physiques de vitesse de consommation le long de la propagation, qui seront analysés ultérieurement. La configuration C ne présente aucun de ces pics et, comme anticipé, conduit aux meilleurs résultats avec l'AMR. Le critère de déclenchement de l'inclusion du masque garantit que la flamme reste dans la région de maillage fin tout au long de la propagation. Le coût de calcul total de la méthode C est réduit de 79% par rapport à la simulation de référence sur un maillage statique homogène, avec un coût des adaptations de maillage représentant seulement 1,2% du coût total de la simulation. Cette tendance sur le coût de l'AMR reste cependant propre à ce cas test à la géométrie idéalisée et n'est pas généralisable à des cas sur des géométries beaucoup plus complexes, comme cela sera illustré en Chapitres 5 et 6.

Les gains montrés ici dépendent également fortement du rapport entre la longueur du domaine fluide considéré et l'épaisseur de flamme épaissie : moins les QoI occupent d'espace, plus la réduction du coût de calcul fourni par l'AMR est importante.

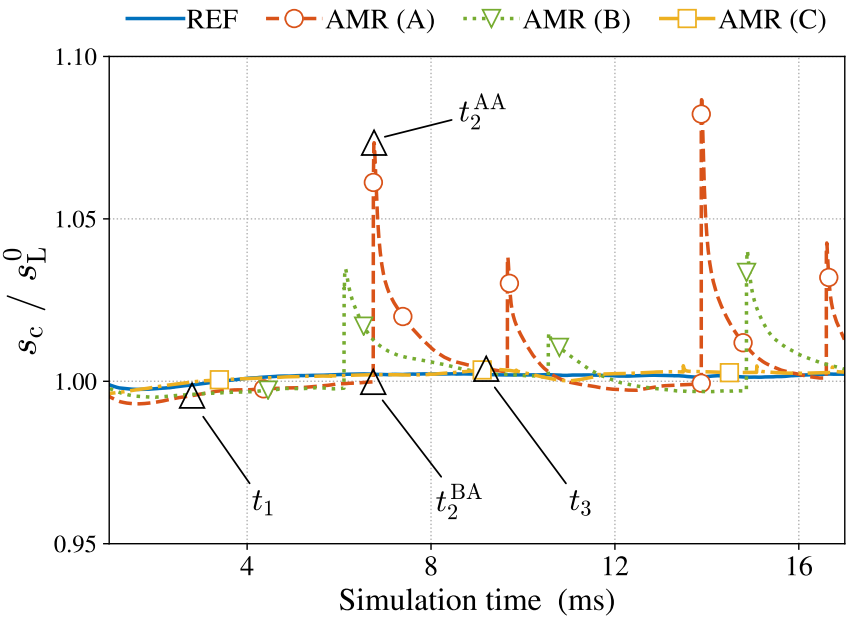


FIGURE 4.13 – Cas test de flamme laminaire plane 3D. Comparaison de l'évolution temporelle de la vitesse de consommation pour le cas REF (maillage statique) et les différentes méthodes AMR A, B et C. Les instants temporels indiqués (△) pour le cas A correspondent aux profils présentés dans la Fig. 4.14. Les indices BA et AA signifient respectivement "Before Adaptation" et "After Adaptation".

La Fig. 4.14 détaille les pics non physiques de la vitesse de consommation observés

dans la Fig. 4.13 avec la méthode AMR A. À t_1 (Fig. 4.14a), la flamme se trouve initialement dans une région fine du maillage. Lorsqu'elle se déplace dans une région moins résolue (t_2^{BA} dans la Fig. 4.13 et la Fig. 4.14b), la vitesse de flamme est correctement préservée, comme prévu avec le modèle DTFLES [34] : le terme $\dot{\omega}_{\mathrm{F}}/\mathcal{F}$, présent dans l'équation de transport pour le combustible, est réduit d'un facteur $\mathcal{F}$ par rapport à la flamme laminaire non épaissie, mais cela est compensé par le fait que la flamme est $\mathcal{F}$ fois plus large dans l'espace en raison de la modification de l'équilibre diffusion-réaction, de sorte que l'intégrale globale (c'est-à-dire la vitesse de consommation) est conservée. Cependant, à mesure que la flamme se propage dans cette région moins résolue, la valeur du facteur d'épaississement augmente progressivement dans la zone de réaction, car il dépend de la taille de cellule locale comme défini dans Eq. (3.35). Une fois l'adaptation de maillage déclenchée (t_2^{AA} dans la Fig. 4.13 et la Fig. 4.14c), la taille du maillage diminue soudainement dans le front de flamme, entraînant une chute instantanée de $\mathcal{F}$. Comme les profils spatiaux de température et de fractions massiques des espèces sont préservés grâce à l'interpolation, le taux de réaction du combustible avant application du facteur d'épaississement $\dot{\omega}_{\mathrm{F}}$ est conservée après l'adaptation. Cependant, le terme source chimique appliqué dans l'équation de transport du carburant après division par le facteur d'épaississement $\dot{\omega}_{\mathrm{F}}/\mathcal{F}$ est globalement augmenté, car il est impacté par la baisse instantanée de $\mathcal{F}$. Cela conduit au pic observé de la vitesse de consommation. Au fur et à mesure que la flamme se propage à nouveau dans une région fine du maillage mis à jour (t_3 dans la Fig. 4.13 et la Fig. 4.14d), l'équilibre réaction-diffusion est progressivement rétabli, et les différents profils de température et de fractions massiques, ainsi que les termes sources, recouvrent progressivement vers leur forme attendue, permettant ainsi de récupérer une valeur correcte de vitesse de consommation. Les cas A et B illustrent donc les limites de la méthode de déclenchement de l'adaptation basée sur la variation du masque lorsqu'un seuil incorrect est sélectionné. Cela est démontré ici pour le modèle DTFLES, mais cette observation devrait également s'appliquer aux autres approches couramment utilisées, qui dépendent également de la taille de filtre dans leur construction, telles que les modèles de flammelette, comme le modèle FTACLES [44]. La dilatation du masque réduit comme attendu la fréquence des adaptations du maillage et donc la fréquence des pics (Fig. 4.13), mais ne résout pas le problème sous-jacent.

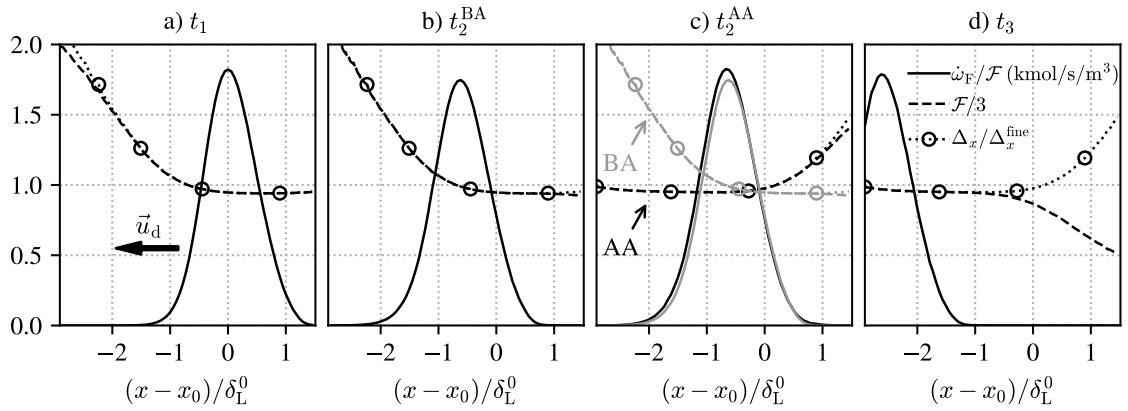


FIGURE 4.14 – Profils spatiaux des caractéristiques de flamme normalisées aux instants critiques, conduisant aux pics de vitesse de consommation observés pour la méthode AMR A.

4.4 Développement d'un critère pour la détection des vortex et interaction avec une flamme

Dans les scénarios typiques de déflagration dans des canaux confinés et obstrués, la résolution des structures tourbillonnaires générées dans l'écoulement est essentielle pour prédire avec précision la dynamique de la flamme, notamment sa transition à la turbulence et sa vitesse de propagation turbulente. Les structures tourbillonnaires résultent de l'interaction de l'écoulement induit par la flamme avec les obstructions, par le biais de mécanismes tels que les détachements tourbillonnaires (vortex shedding). Lors des simulations d'explosions, les zones où apparaissent les vortex doivent être raffinées pour éviter une dissipation de ces derniers avant leur interaction avec la flamme. Cela reviendrait alors à manquer ce phénomène d'interaction flamme-vortex et ainsi à négliger un mécanisme d'accélération de flamme, crucial à la bonne reproduction des phénomènes physiques. Ces observations ont déjà été validées dans des travaux précédents portant sur le passage d'une flamme au travers d'un obstacle derrière lequel des vortex de fortes intensités sont générés par effet piston [13]. Dans le cadre de la LES, ces structures à grande échelle conduisent par un phénomène de cascade à des structures à plus petite échelle jusqu'à l'échelle du filtre qui vont augmenter la vitesse de flamme turbulente, constituant un mécanisme moteur pour l'accélération de la flamme dans les géométries obstruées et confinées. Cette section se concentre donc sur cet aspect critique pour les simulations AMR. Tout d'abord, une

stratégie de capture des vortex est élaborée dans le contexte de simulations non réactives (Section 4.4.1). La méthodologie est ensuite adaptée aux simulations réactives dans le but d'appliquer la méthode aux LES de déflagrations (Section 4.4.3) : un critère de sélection des vortex est ainsi construit en se basant sur des arguments théoriques de l'interaction flamme-vortex pour identifier les structures tourbillonnaires pertinentes, cruciales pour prédire le processus d'accélération de la flamme.

4.4.1 Détection des vortex dans les écoulements non réactifs

Les structures tourbillonnaires peuvent être identifiées comme les régions de l'écoulement où la rotation rigide prédomine sur la déformation. Cette idée est utilisée pour définir la QoI pour l'identification pour l'AMR des structures tourbillonnaires : le senseur Ω. La formulation de ce senseur a été introduite par Kamkar et al. [72] et a été modifiée plus récemment par Liu et al. [87]. Ce senseur de détection des vortex présente l'avantage d'avoir une formulation sans dimension et bornée. Il est donc insensible aux échelles du cas considéré : il sépare les zones où la rotation prédomine des zones où la déformation prédomine, quelle que soit la taille ou l'intensité du tourbillon. D'autres quantités peuvent également être utilisées de manière similaire pour la détection des vortex, telles que la magnitude de la vorticité ω [82], le critère Q [65] ou le critère λ_2 [69], mais ils nécessitent un seuil dépendant du cas d'étude qui ne peut pas être connu *a priori*.

Le senseur Ω est noté Ψ dans cet article, afin de le différencier clairement de la vorticité, couramment notée ω. Il est défini comme le rapport de la norme de Frobenius du tenseur de rotation sur la somme des normes des tenseurs de rotation et de déformation :

$$\Psi = \frac{\boldsymbol{B}}{\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} + \epsilon}, \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} A_{ij}^2, \tag{4.6}$$

où $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ sont respectivement la partie symétrique (non tourbillonnaire) et la partie antisymétrique (tourbillonnaire) du tenseur de gradient de vitesse, comme illustré dans leur forme 2D dans l'Eq. (4.7). Le paramètre ϵ a été initialement introduit par Liu et al. [87] pour des raisons numériques ($\epsilon > 0$), à savoir pour éviter de diviser par zéro dans

les régions sans gradients de vitesse et éliminer le bruit numérique.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} ; \; \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}\right) & 0 \end{bmatrix}. \tag{4.7}$$

La QoI Ψ prend des valeurs dans la plage (0,1), tend vers $\Psi = 1$ dans les régions où la rotation prédomine et vers $\Psi = 0$ là où la déformation prédomine, permettant ainsi d'identifier les régions tourbillonnaires dans l'écoulement. Ce sont ces zones qui ont un impact significatif sur la flamme lors de leur interaction. Pour définir le critère de détection de vortex, un seuil $\Psi^{\lim}$ doit être introduit, de sorte que les structures tourbillonnaires soient identifiées dans les régions où $\Psi \geq \Psi^{\lim}$. Ce critère détermine les parties tourbillonnaires de l'écoulement où le champ de masque de métrique prend la valeur $M(\Psi) = 1$:

$$M(\Psi) = \begin{cases} 1 & \text{si } \Psi \geq \Psi^{\lim} \\ 0 & \text{si } \Psi < \Psi^{\lim}. \end{cases} \tag{4.8}$$

Bien que cette méthode de détection des vortex ait été utilisée avec succès pour le maillage adaptatif appliqué aux simulations stationnaires [99], la formulation présente encore quelques faiblesses notables. Tout d'abord, il n'y a pas de consensus dans la littérature quant à la valeur du seuil de détection (entre 0.5 à 0.6), ajoutant un paramètre dépendant de l'utilisateur. Deuxièmement, l'impact et la signification physique du paramètre de régularisation dimensionnelle ϵ n'ont jamais été étudiés. Dans la littérature, différentes options ont été proposées pour la définition de ϵ. Initialement, l'utilisation d'un nombre positif petit ($\epsilon = 1e-3$) a été proposée, puis Dong et al. [41] ont proposé l'expression :

$$\epsilon = c_\epsilon \max(\boldsymbol{B} - \boldsymbol{A}), \tag{4.9}$$

avec le paramètre adimensionnel $c_\epsilon = 10^{-3}$, et l'opérateur max désignant la valeur maximale dans le domaine fluide. Cette expression a été appliquée à plusieurs simulations stationnaires d'écoulements turbulents non réactifs. Dans le contexte de l'AMR pour les LES de phénomènes instationnaires, tels que les déflagrations, cette formulation globale semble donc mal adaptée en raison de la disparité spatiale et temporelle du

problème. Pour améliorer la compréhension des limites asymptotiques du senseur Ψ dans le contexte particulier de cette étude, l'impact de ϵ est évalué analytiquement ci-après. Une définition de la valeur de ϵ est ensuite proposée en se basant sur des arguments physiques de l'interaction flamme vortex afin de rendre son application générique dans le contexte d'une propagation de flamme turbulente dans des environnements obstrués.

Pour mieux comprendre l'interprétation du paramètre ϵ, l'expression exacte de Ψ est dérivée pour un cas canonique simple, correspondant à un vortex isentropique et incompressible, solution des équations d'Euler 2D [115]. Sa fonction de courant et les composantes associées du vecteur de vitesse sont données par l'Eq. (4.10) :

$$\varphi = \Gamma \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{R}\right)^2};\ u = \frac{\partial \varphi}{\partial y};\ v = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \tag{4.10}$$

où r est la coordonnée radiale $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, R est le rayon du vortex, Γ est l'intensité du vortex, à laquelle la circulation du vortex est proportionnelle. En injectant Eq. (4.10) dans la définition de Ψ (Eq. (4.6)), on obtient la solution analytique du senseur Ψ pour un vortex 2D isentropique et incompressible (Eq. (4.11)) :

$$\Psi = \frac{1}{1 + \left(1 + \dfrac{2}{\hat{r}^2 - 2}\right)^2 + \epsilon \tau_\mathrm{v}^2 \dfrac{2\mathrm{e}^{\hat{r}^2}}{(\hat{r}^2 - 2)^2}}; \tag{4.11}$$

où $\hat{r} = r/R$ est la coordonnée radiale normalisée du vortex par son rayon et $\tau_\mathrm{v} = R^2/\Gamma$ est l'échelle de temps caractéristique du vortex, un scalaire positif. Ψ est un champ isotrope, variable par rapport à la coordonnée radiale normalisée, de telle sorte que $\Psi(\hat{r}) \in [0.1]$. Si $\epsilon \tau_\mathrm{v}^2 = 0$, la perturbation exponentielle dans le dénominateur de Eq. (4.11) disparaît et l'expression de Ψ donne alors l'Eq. (4.12) :

$$\Psi = \frac{1}{1 + \left(1 + \dfrac{2}{\hat{r}^2 - 2}\right)^2}. \tag{4.12}$$

Cela est représenté par la courbe solide dans la Fig. 4.15. Loin du centre du vortex, Ψ ne

tend pas vers zéro comme cela serait souhaitable (Eq. (4.13)) :

$$\lim_{\hat{r}\to+\infty} \Psi(\hat{r}, \epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2 = 0) = 1/2. \tag{4.13}$$

Au centre du vortex, $\Psi(\hat{r} = 0.\epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2 = 0) = 1$. Dès que $\epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2 > 0$, Ψ tend vers zéro loin du centre du vortex comme souhaité (Eq. (4.14)) :

$$\lim_{\hat{r}\to+\infty} \Psi(\hat{r}, \epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2 > 0) = 0, \tag{4.14}$$

comme le montre la Fig. 4.15. Au centre du vortex, la valeur de Ψ est déterminée par la valeur de $\epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2$ (Eq. (4.15)) :

$$\lim_{\epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2\to 0} \Psi(\hat{r} = 0) = 1 \quad \text{et} \quad \lim_{\epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2\to\infty} \Psi(\hat{r} = 0) = 0. \tag{4.15}$$

Ainsi, pour un vortex donné ayant une échelle de temps caractéristique τ_{v}, la valeur de ϵ a une influence critique sur sa détection ($\Psi \geq \Psi^{\mathrm{lim}}$). Comme illustré dans la Fig. 4.15, pour $\epsilon\tau_{\mathrm{v}}^2 = 10$ par exemple, le vortex ne serait jamais détecté car Ψ serait toujours inférieur à $\Psi^{\mathrm{lim}} = 1/2$.

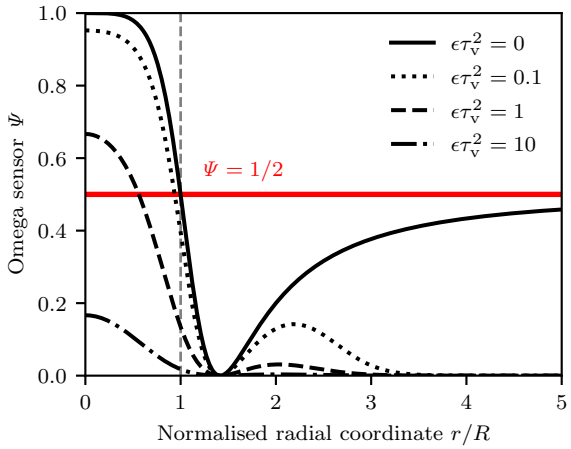


FIGURE 4.15 – Profil radial normalisé du champ Ψ. Effet de ϵ (cf. Eq. (4.11)) sur les valeurs de Ψ pour un vortex isentropique 2D d'échelle de temps caractéristique τ_{v}.

Le rôle de ϵ est donc double :

1. Il agit comme un paramètre de régularisation qui assure le comportement asymptotique correct de Ψ loin du centre du vortex, où le senseur doit tendre vers zéro ;

2. Bien que le senseur Ω ait été conçu pour être indépendant de l'échelle, la valeur du senseur dans le noyau du vortex dépend en réalité du rapport entre $\epsilon^{1/2}$ et l'échelle de temps du vortex τ_{v}.

Cela reste vrai en 3D, comme le confirme une simple analyse dimensionnelle : $[\boldsymbol{A}] = [\boldsymbol{B}] = [\epsilon] = \mathrm{s}^{-2}$. Ainsi, $\epsilon^{-1/2}$ peut être vu comme une échelle de temps de coupure, permettant de définir les structures tourbillonnaires à détecter. Par conséquent, prendre une petite valeur pour ϵ suffit pour détecter toutes les structures, quelle que soit leur taille ou leur intensité, et pour régulariser la formulation en évitant un comportement mal défini si $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} = 0$. La condition nécessaire pour détecter les vortex est que $\tau_{\mathrm{v}}^2 \epsilon \ll 1$, si l'on considère un seuil $\Psi \geq \Psi^{\mathrm{lim}}$ proche de 1/2, comme suggéré dans la littérature [41] (voir la Fig. 4.15). Cet effet de coupure de ϵ est illustré en appliquant la méthodologie TFP-AMR à des simulations non réactives d'advection de vortex dans la Section 4.4.2, confirmant l'importance du choix de la formulation de ϵ.

4.4.2 Application dans un problème d'advection de vortex en 2D

L'importance de la formulation utilisée pour ϵ est évaluée dans le cas de l'advection de deux vortex 2D isentropiques et incompressibles (Eq. (4.10)). L'exemple présenté ici est spécifiquement choisi pour mettre en évidence les limitations de la formulation de l'Eq. (4.9). Les équations d'Euler instationnaires sont résolues sur un domaine 2D illustré dans la Fig. 4.16, en utilisant un schéma éléments finis Taylor-Galerkin continu centré, d'ordre trois en espace et d'ordre quatre en temps (TTG4A [33]) rappelé en Section 3.3. Les conditions aux limites utilisent le formalisme NSCBC [101]. Ce cas test considère deux vortex V1 (en haut) et V2 (en bas), avec différents rayons initiaux R_1 et R_2 et différentes intensités initiales Γ_1 et Γ_2, advectés à une vitesse U_∞. V1 est un gros vortex de faible intensité tandis que V2 est un petit vortex de forte intensité ($R_1 > R_2$ et $\Gamma_1 < \Gamma_2$). Les principales caractéristiques de ces deux vortex sont données dans le Table 4.3. Le temps d'advection de référence est défini comme $\tau_{\mathrm{adv}} = R_1/U_\infty = 0.39\,\mathrm{ms}$. Comme les vortex sont solutions exactes des équations d'Euler et qu'un schéma numérique d'ordre élevé est utilisé, ils devraient être convectés de façon exacte dans le domaine de calcul, sans aucune

distorsion ou dissipation, s'ils sont correctement résolus.

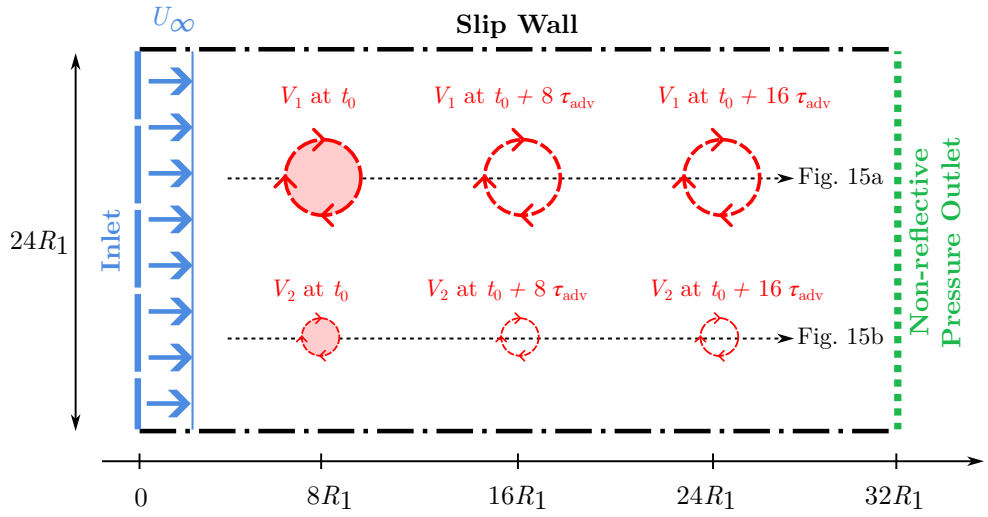


FIGURE 4.16 – Schéma du domaine de calcul pour le test d'advection de vortex.

TABLE 4.3 – Caractéristiques des deux vortex V1 et V2, advectés à une vitesse $U_\infty = 100\,\mathrm{m/s}$.

	Vortex V1	Vortex V2
Rayon R (mm)	39	19.5
Intensité Γ (m^2/s)	0.3	3
Temps caractéristique $\tau_v = R^2/\Gamma$ (ms)	5.07	0.127
Nombre de points dans le rayon (Maillage fin)	26	13
Nombre de points dans le rayon (Maillage grossier)	2.8	1.4

Un cas de référence utilisant un maillage statique homogène est comparé à deux méthodes AMR qui diffèrent par la formulation choisie pour ϵ. Les deux configurations AMR utilisent le masque de métrique construit sur Ψ comme indiqué dans l'Eq. (4.8). La première configuration (A) utilise la formulation proposée par Dong et al. [41]. Dans la deuxième configuration (B), la valeur de $\epsilon = 10^3\ \mathrm{s}^{-2}$ est choisie, de sorte que les deux vortex soient détectés, *i.e* $\epsilon\tau_{v,1}^2 = 2.6 \times 10^{-2} \ll 1$ et $\epsilon\tau_{v,2}^2 = 1.6 \times 10^{-5} \ll 1$ pour satisfaire la condition $\Psi > \Psi^{\mathrm{lim}}$. Bien que de nombreuses valeurs permettent de satisfaire cette relation dans ce cas, des valeurs plus élevées seront plus efficaces pour réduire le bruit parasite. Les deux méthodes sont résumées dans le Table 4.4. Dans les deux cas, le champ de masque de métrique est dilaté d'une cellule, comme pour le senseur de flamme décrit dans la Section 4.3. La méthode d'inclusion du masque est utilisée pour déclencher les

adaptations du maillage. De manière analogue à la QoI de flamme (Section 4.3.2), l'adaptation est déclenchée lorsque la région définie par le champ de QoI (Ψ) n'est plus incluse dans la région définie par le masque de métrique M_0. Cela se traduit par la condition suivante :

$$\Psi^n - M_0^n > \Psi^{\text{lim}} \text{ , pour au moins un nœud de maillage n.} \tag{4.16}$$

La transition de la région de maillage fin à la région de maillage grossier est régie par un taux de croissance maximal de 20% pour ce cas test.

TABLE 4.4 – Résumé des méthodes AMR d'advection de vortex

Configuration	QoI	Définition du masque	Seuil	Expression de ϵ
A - Max epsilon	Ψ	Eq. (4.8)	$\Psi^{\text{lim}} = 1/2$	$\epsilon = 0.001 \max(\|\boldsymbol{B}\|_{\text{F}}^2 - \|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}^2)$
B - Constant epsilon	Ψ	Eq. (4.8)	$\Psi^{\text{lim}} = 1/2$	$\epsilon = 10^3$ s^{-2}

Des visualisations des vortex et des maillages adaptés sont présentés en Fig. 4.17 pour différents instants des cas A et B. La méthode utilisée dans le cas B est la seule capable de détecter et de préserver le vortex V1 (vortex supérieur) car la valeur de ϵ a été choisie de manière cohérente avec les caractéristiques du vortex, de sorte que $\epsilon\tau_{\text{v}}^2 \ll 1$ pour les deux vortex. Pour le cas A, le vortex non détecté et donc insuffisamment résolu V1 est progressivement dissipé au cours de sa propagation. En ce qui concerne le vortex V2, l'évolution des profils de vorticité est identique dans les deux cas et le pic est bien préservé : toutes les méthodes étant calibrées pour détecter V2, le vortex est correctement résolu, comme anticipé. En effet, la méthode A s'assure de résoudre le vortex de plus forte intensité, de par sa formulation, et la valeur du paramètre ϵ est adaptée pour s'assurer de résoudre les deux vortex. On peut noter que la méthode B, donnant les résultats les plus satisfaisants, réduit le coût de calcul total de 94% par rapport au cas de référence sur un maillage statique homogène, ce qui permet également une forte réduction de l'empreinte mémoire du calcul.

Ces tests confirment que l'approche Ψ est très bien adaptée à la détection de vortex, à condition que le paramètre ϵ, qui agit comme une échelle de temps de coupure, soit correctement défini pour capturer les structures tourbillonnaires d'intérêt. Le choix de ϵ peut être fastidieux pour un cas général et dépendant de l'utilisateur. Cependant, dans le

contexte d'interaction flamme-vortex, cet effet de coupure est opportunité s'il est cohérent avec la physique du problème. En effet, les échelles tourbillonnaires pertinentes pour l'interaction avec la flamme peuvent être identifiées a priori : le choix de ϵ peut donc être automatisé pour éviter une sur- ou une sous-sélection de vortex, comme présenté dans la section suivante (Section 4.4.3).

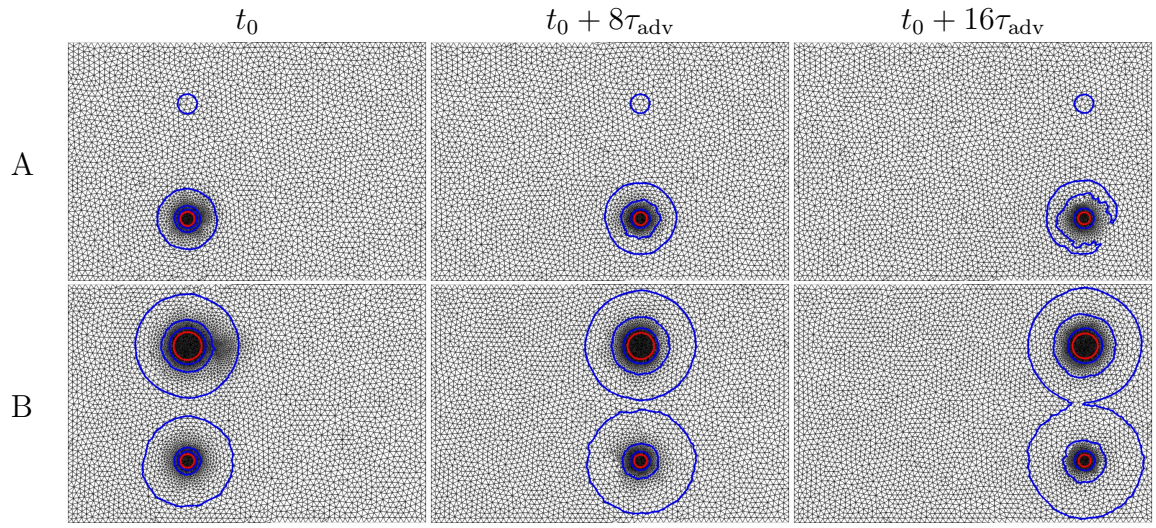


FIGURE 4.17 – Évolution du maillage adapté à trois instants (en colonnes) avec iso-contours de Ψ ($\Psi = \{0.05; 0.5\}$ respectivement en bleu et rouge). Les régions où le critère $\Psi \geq \Psi^{\text{lim}} = 1/2$ sont vérifiées sont délimitées par l'iso-contour rouge. Comparaison entre les différentes formules pour le calcul du senseur de détection de vortex (en lignes). (A) Max epsilon ; (B) constant epsilon.

4.4.3 Détection et sélection des vortex dans les écoulements réactifs

Dans cette section, une formulation pour le paramètre ϵ est proposée pour les écoulements réactifs, en se concentrant sur l'interaction flamme-vortex. L'objectif est de s'assurer que tous les vortex susceptibles d'avoir un impact sur la flamme épaissie résolue sont correctement résolus sur le maillage et, à l'inverse, de ne pas résoudre des vortex qui n'auront pas d'influence significative, afin de réduire le coût de calcul. Pour cela, l'expression du paramètre ϵ, présentée dans le dernier chapitre et identifiable comme un seuil de coupure du point de vue de la physique, est reliée aux caractéristiques de flamme grâce à la théorie d'interaction flamme-vortex et aux résultats issus de la littérature. Ainsi, en liant sa valeur aux grandeurs caractéristiques de la flamme connues *a priori*, il est possible de développer

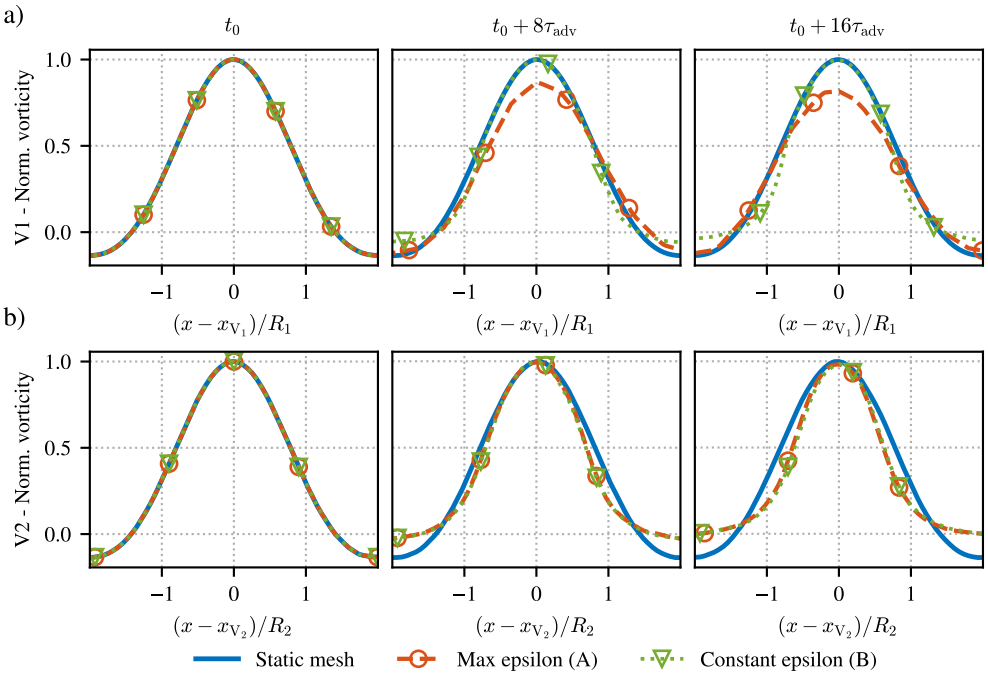


FIGURE 4.18 – Profils normalisés de la vorticité le long d'une ligne traversant le centre des vortex à différents instants de la convection pour les deux vortex : V1, faible et grand (a) ; V2, fort et petit (b). Comparaison entre les différentes méthodes de calcul du senseur de détection du vortex en AMR et le calcul sur maillage statique de référence. La vorticité est normalisée par rapport à $\omega_{peak}(t_0)$, la valeur maximale de la vorticité initiale au centre de chaque tourbillon. La coordonnée spatiale est la distance au centre du vortex x_V, normalisée par le rayon du vortex correspondant.

une méthode générique de détection de vortex permettant la résolution de tous les vortex ayant un impact significatif sur la structure de la flamme.

Dans l'expression de l'Eq. (4.11), ϵ agit comme une coupure par rapport à l'échelle de temps caractéristique du vortex τ_v. Un vortex est détecté par le senseur si, pour toute position $\hat{r}$, $\Psi(\hat{r}) \geq \Psi^{lim}$. Comme Ψ est maximal au centre du vortex ($\Psi(\hat{r} = 0) = \Psi^{lim}$), une relation entre l'échelle de temps caractéristique limite $\tau_{v,limit}$, Ψ^{lim} et ϵ peut être établie pour le vortex dont l'intensité se situe au niveau de la coupure. En injectant cette expression dans l'Eq. (4.11), la relation suivante est obtenue :

$$\epsilon \tau_{v,limit}^2 = \frac{2(1 - \Psi^{lim})}{\Psi^{lim}}. \tag{4.17}$$

Cette relation détermine quelle valeur de ϵ doit être utilisée pour que le cas limite, c'est-à-dire le vortex avec la plus faible intensité capable d'interagir avec la flamme, soit au

niveau du seuil de détection Ψ^{lim} et soit donc détecté. La question qui se pose alors est quelle valeur de référence, pour ϵ, utiliser pour la sélection des vortex. Pour cela, il faut définir la valeur de $\tau_{\text{v,limit}}$, *i.e* le temps caractéristique du vortex de plus faible intensité ayant un impact sur la flamme, pour résoudre l'Eq. (4.17). Dans une perspective d'interaction flamme-vortex, l'objectif est de détecter correctement toutes les structures de vortex susceptibles d'avoir un impact sur la flamme, c'est-à-dire d'induire un changement significatif de surface de flamme et donc de dégagement de chaleur total. Ce problème a été largement étudié dans la littérature, car il est à la base des théories d'interaction flamme/turbulence. Des diagrammes spectraux d'interaction flamme-vortex ont été construits à l'aide de simulations numériques [103] et de techniques expérimentales [111], montrant des tendances qualitatives cohérentes. L'effet des vortex sur la flamme va varier et dépend du rayon du vortex, R, et de sa vitesse, Γ/R. Sur ces diagrammes, un seuil de coupure [53] peut être identifié, correspondant à des vortex provoquant un changement du taux de réaction total d'environ 5%. Ce seuil de coupure est lié au nombre de Reynolds du vortex Re_{v}, défini comme suit :

$$Re_{\text{v}} = \left(\frac{\Gamma/R}{s_{\text{L}}^0}\right)\left(\frac{R}{\mathcal{F}\delta_{\text{L}}^0}\right) = \left(\frac{R}{\mathcal{F}\delta_{\text{L}}^0}\right)^2 \frac{\tau_{\text{c}}}{\tau_{\text{v}}} = \left(\frac{R}{\mathcal{F}\delta_{\text{L}}^0}\right)^2 Da_{\text{v}}^{-1}. \tag{4.18}$$

Cette expression relie Re_{v}, l'échelle de temps caractéristique du vortex τ_{v} et l'échelle de temps chimique de la flamme épaissie τ_{c}, pour un vortex donné de rayon R et d'intensité Γ. Le temps caractéristique de la flamme dans l'Eq. (4.18) correspond au temps caractéristique de la flamme épaissie $\mathcal{F}\delta_{\text{L}}^0/s_{\text{L}}^0$ car seules les grandeurs résolues sont pertinentes dans le contexte de la LES, les effets sous-maille étant gérés par des modèles dédiés. La DNS correspond au cas limite où $\mathcal{F} = 1$. Da_{v} représente le nombre de Damköhler du vortex (Eq. (4.19)), c'est-à-dire le rapport entre l'échelle de temps caractéristique du vortex τ_{v} et l'échelle de temps chimique de la flamme épaissie τ_{c} :

$$Da_{\text{v}} = \frac{\tau_{\text{v}}}{\tau_{\text{c}}} = \frac{\tau_{\text{v}}}{\mathcal{F}\delta_{\text{L}}^0/s_{\text{L}}^0} = \left(\frac{s_{\text{L}}^0}{\Gamma/R}\right)\left(\frac{R}{\mathcal{F}\delta_{\text{L}}^0}\right). \tag{4.19}$$

En utilisant les diagrammes spectraux précédemment mentionnés de la littérature, l'ordre de grandeur du nombre de Reynolds limite du vortex à partir duquel les vortex n'ont plus d'impact significatif sur la flamme, peut être approximativement évalué : Poinsot

et al. [103] estiment numériquement le seuil de coupure à $Re_{\mathrm{v,limit}} \approx 13$; Roberts et al. [111] présentent, eux, une évaluation expérimentale du seuil de coupure correspondant à $Re_{\mathrm{v,limit}} = 2,5$. Par conséquent, l'ordre de grandeur retenu ici pour ce paramètre est $Re_{\mathrm{v,limit}} = 10$ comme présenté en Fig. 4.19. Cela fixe une limite pour les vortex qui doivent

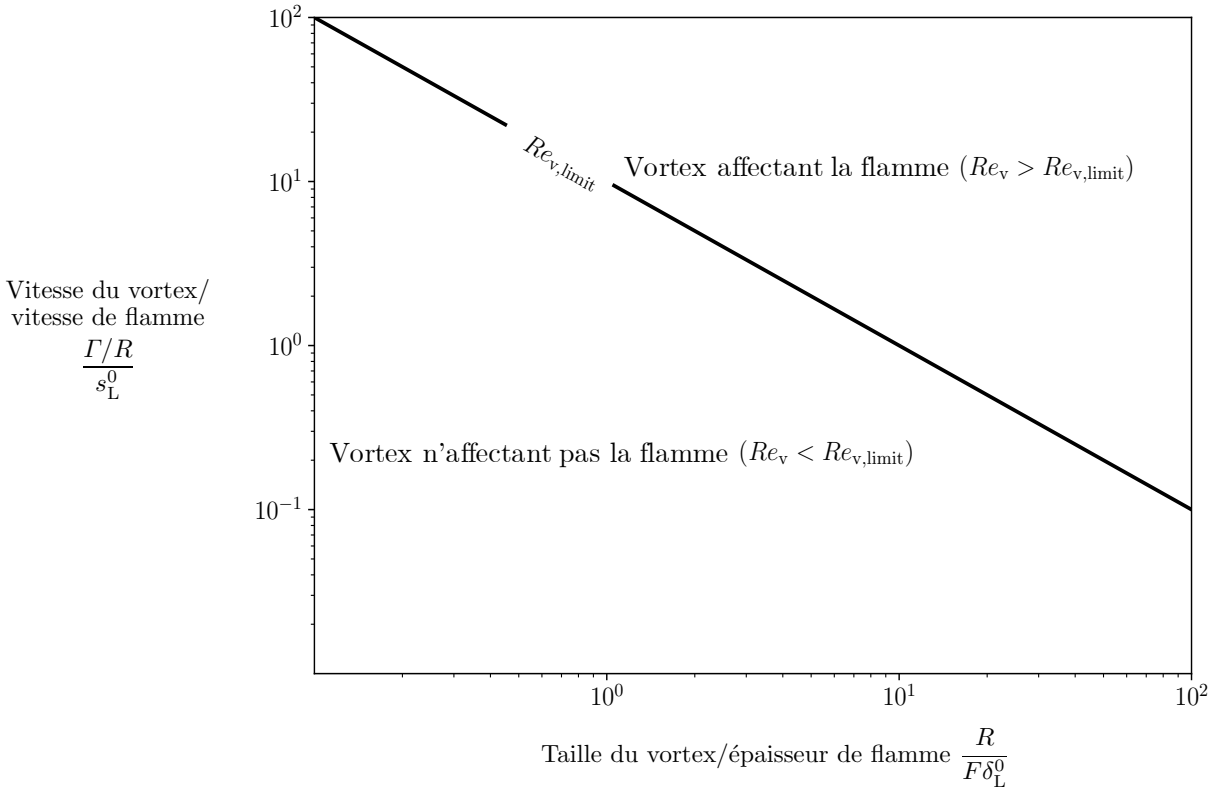


FIGURE 4.19 – Illustration de la valeur de $Re_{\mathrm{v,limit}}$ dans un diagramme spectral simplifié de l'interaction flamme-vortex.

être détectés par l'AMR et qui doivent être résolus sur une zone de maillage raffinée. De plus, les échelles de vortex qui peuvent être résolues dans une simulation donnée seront également limitées : d'un côté par la résolution du maillage Δ_x ; de l'autre par la plus grande dimension caractéristique dans la géométrie simulée L. Ces limites sont illustrées dans la Fig. 4.20.

En utilisant l'Eq. (4.18), la valeur de $\tau_{\mathrm{v,limit}}$ (Eq. (4.20)) à utiliser pour la sélection des vortex peut être déterminée en fonction de $Re_{\mathrm{v,limit}}$ pour une échelle spatiale donnée R, ici définie comme la plus grande dimension caractéristique de la géométrie simulée L :

$$\tau_{\mathrm{v,limit}} = \left(\frac{L}{\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0}\right)^2 Re_{\mathrm{v,limit}}^{-1}\tau_{\mathrm{c}} = Da_{\mathrm{v,limit}}\tau_{\mathrm{c}}. \tag{4.20}$$

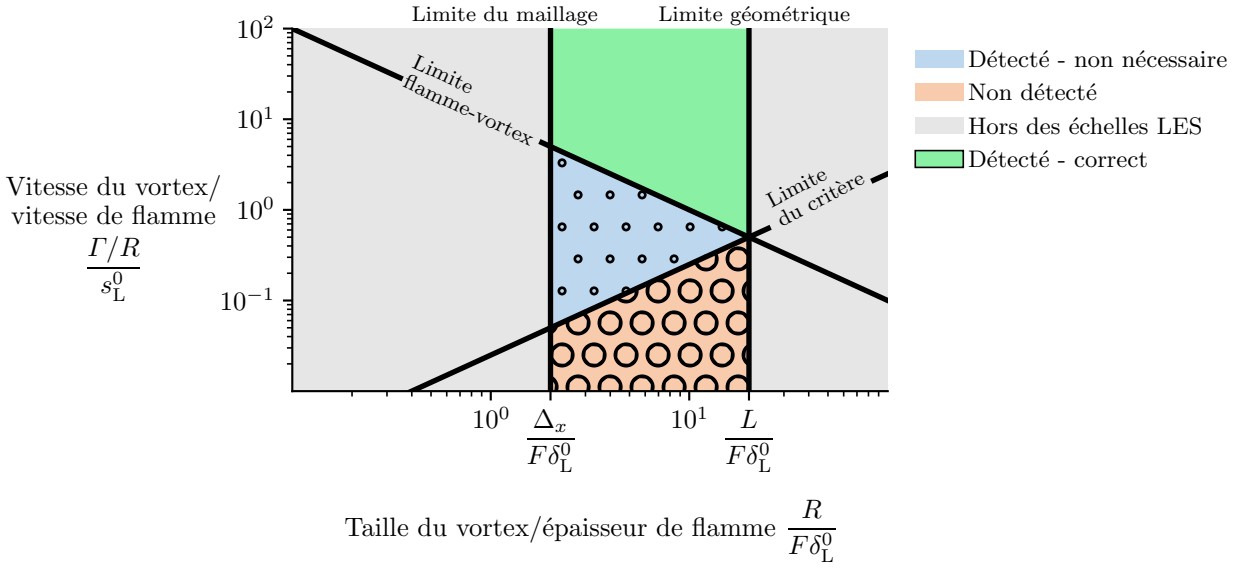


FIGURE 4.20 – Diagramme spectral simplifié de l'interaction flamme-vortex. Les zones colorées représentent respectivement : en bleu la plage de vortex non ciblés mais détectés ; en vert la plage de vortex ciblés et détectés ; en orange la plage de vortex non ciblés et non détectés ; en gris les zones exclues par les échelles de taille de maille et géométriques.

La Fig. 4.20 résume le principe du critère de sélection de vortex. Dans le diagramme, la sélection en fonction de la valeur de $\tau_{\mathrm{v,limit}}$ est représentée à travers la courbe $Da_{\mathrm{v,limit}}$. On y montre la correspondance entre $Re_{\mathrm{v,limit}}$ et $Da_{\mathrm{v,limit}}$ à l'échelle spatiale sélectionnée L. Comme la plus grande dimension caractéristique dans la géométrie simulée L est choisie pour être conservatrice, la sélection de vortex garantit que tous les vortex au-dessus du seuil de coupure sont détectés, mais entraine également la détection de certains vortex qui n'auront pas impact significatif sur la flamme. Enfin, ϵ (Eq. (4.21)) peut être écrit en fonction du nombre de Reynolds limite du vortex à l'échelle caractéristique la plus grande L, en injectant l'Eq. (4.20) dans l'Eq. (4.17) :

$$\epsilon = \frac{2(1-\Psi^{\mathrm{lim}})}{\Psi^{\mathrm{lim}}} \frac{\left(s_{\mathrm{L}}^0 \mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0\right)^2}{L^4} Re_{\mathrm{v,limit}}^2. \tag{4.21}$$

ϵ dépend donc directement des propriétés de la flamme laminaire épaissie (s_{L}^0 et $\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0$) et des résultats issus de la littérature pour l'interaction flamme-vortex ($Re_{\mathrm{v,limit}}$). Dans le cas d'une déflagration, l'accélération de flamme conduit à des augmentations locales de pression et de température qui modifient s_{L}^0 et $\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0$, ce qui doit être pris en compte dans l'évaluation du nombre de Reynolds du vortex. Il faut donc connaître la dépendance de s_{L}^0 et $\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0$ en fonction de la pression et de la température. En ce qui concerne $\mathcal{F}\delta_{\mathrm{L}}^0$, la

valeur de l'épaisseur de flamme 'épaissie' est maintenue constante, car le modèle DTFLES est utilisé [34] (Eq. (3.35)). C'est donc la dépendance à la pression et à la température de s_{L}^0, décrite en Section 3.2.5, qui va avoir un impact sur l'évaluation du nombre de Reynolds tourbillon. Pour obtenir un critère conservatif, la vitesse laminaire initiale, qui est plus la plus faible, peut être retenue. Dans le cas d'un mélange initial non homogène, il conviendrait donc de prendre la valeur la plus basse de s_{L}^0.

Finalement, la formulation générale proposée (Eq. (4.22)) est obtenue en injectant l'Eq. (4.21) dans l'Eq. (4.6) :

$$\Psi = \frac{\|\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{F}}^2}{\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}^2 + \|\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{F}}^2 + \dfrac{2(1-\Psi^{\mathrm{lim}})}{\Psi^{\mathrm{lim}}} \dfrac{\left(s_{\mathrm{L}}^0 \mathcal{F} \delta_{\mathrm{L}}^0\right)^2}{L^4} Re_{\mathrm{v,limit}}^2}. \tag{4.22}$$

Cette expression combine la formulation générale de détection des vortex avec un critère de sélection conservateur pour l'interaction flamme-vortex. Le dernier paramètre dont la valeur doit être fixée est le seuil Ψ^{lim}. Étant donné que l'objectif est de détecter uniquement les parties de l'écoulement où la rotation prédomine, la valeur de Ψ^{lim} peut être définie de telle sorte qu'un vortex isentropique en 2D, pour lequel $\tau_{\mathrm{v}} \ll \tau_{\mathrm{v,limit}}$, soit détecté jusqu'à son rayon R, ce qui se traduit par $\Psi(\hat{r}) \geq \Psi^{\mathrm{lim}}$ pour $\hat{r} \in (0, 1)$. En appliquant cette condition à l'Eq. (4.11) et en injectant l'expression de ϵ de l'Eq. (4.21), on obtient l'expression suivante (Eq. (4.23)) :

$$\Psi^{\mathrm{lim}} = \Psi\left(\hat{r} = 1, \frac{\tau_{\mathrm{v,limit}}}{\tau_{\mathrm{v}}} \gg 1\right) = \frac{1}{2}. \tag{4.23}$$

Cette valeur est cohérente avec le critère choisi par Liu et al. [87].

Pour résumer, la formulation proposée est sans dimension et capable de capturer toute région où la rotation l'emporte sur la déformation. C'est une quantité locale bornée entre zéro et un. Avec l'estimation proposée pour le paramètre ϵ, elle n'est plus mal définie dans les régions sans gradients de vitesse (*i.e* $\epsilon \neq 0$), évitant un bruit numérique sur la quantité. Enfin, elle permet de préserver tous les vortex susceptibles d'avoir un impact sur la flamme, sur la base de grandeurs caractéristiques de la flamme connues *a priori* : tous les coefficients sont liés à la physique du problème, avec des estimations conservatrices (Table 4.5), et ne reposent pas de paramètres dépendant de l'utilisateur.

TABLE 4.5 – Résumé des paramètres d'entrée nécessaires pour le calcul de ϵ dans un cas réactif.

ϵ (s^{-2})	s_L^0 (m/s)	δ_L^0 (m)	$\mathcal{F}$ (−)	L (m)	$\Psi^{\lim}$ (−)	$Re_{v,\text{limit}}$ (−)
Eq. (4.21)	Propriété de flamme	Propriété de flamme	Propriété de flamme	Issu de la géometrie	$\frac{1}{2}$	10 (Théorie flamme-vortex)

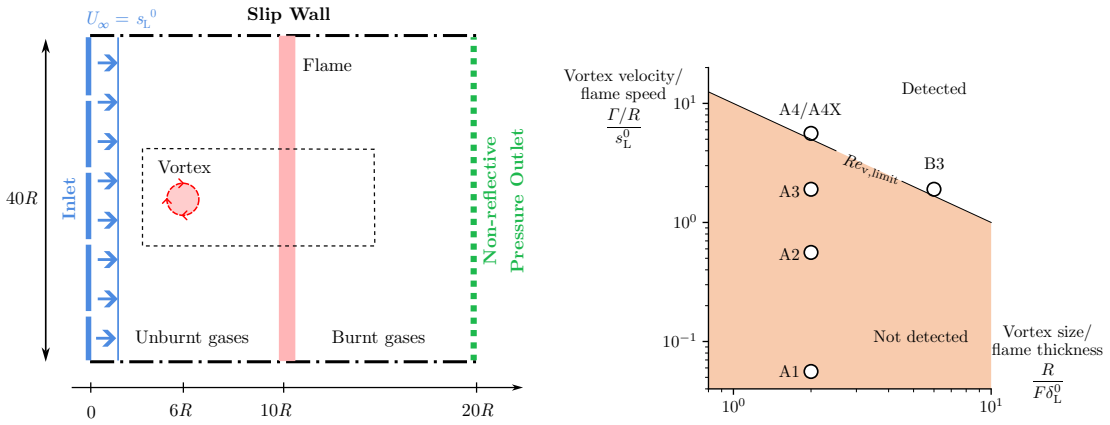
4.4.4 Application et validation sur un cas d'interaction flamme épaissie/vortex 2D

Pour valider la formulation précédemment développée pour ϵ et illustrer la combinaison des critères de flamme et de vortex dans le cadre de l'AMR, plusieurs simulations d'interaction flamme épaissie/vortex sont effectuées. Cet exercice a trois objectifs :

1. Démontrer la capacité des simulations AMR à retrouver les résultats d'une simulation de référence sur un maillage fin statique et homogène, pour un coût de calcul moindre.
2. Évaluer l'importance du nombre de Reynolds pour vortex, $Re_{v,\text{limit}}$, qui détermine si un vortex impacte fortement une flamme
3. Démontrer que la formulation pour ϵ dans les cas réactifs s'adapte automatiquement aux caractéristiques de la flamme et garantit que les vortex ayant un impact significatif sur la flamme sont bien détectés.

La configuration utilisée est présentée dans la Fig. 4.21a. Un vortex 2D isentropique et incompressible (comme dans la Section 4.4.2) est advecté vers une flamme plane méthane-air épaissie (comme dans la Section 4.3.4, mais en 2D). La vitesse d'advection du vortex est fixée à $U_\infty = s_L^0 = 0.282\,\text{m/s}$ de sorte que la flamme reste fixe dans le domaine, avant l'interaction avec le vortex. Le rayon initial du vortex est fixé à $R = 51.6\,\text{mm}$. Le temps d'advection de référence est défini comme $\tau_{\text{adv}} = R/U_\infty = 183\,\text{ms}$. Les caractéristiques de la flamme sont indiquées dans la Table 4.2. La cinétique chimique et la procédure d'initialisation sont identiques à celles utilisées dans la Section 4.3.4. L'épaisseur thermique de la flamme épaissie est résolue en utilisant 5 cellules ($N_c = 5$ dans l'Eq. (3.35)) dans chaque cas. Les équations de Navier-Stokes réactives instationnaires sont résolues sur un domaine 2D représenté dans la Fig. 4.21a, en utilisant le schéma TTG4A [33], comme

dans la Section 4.4.2. Les conditions aux limites utilisent le formalisme NSCBC [101].



(a) Schéma du domaine de calcul pour le cas d'interaction flamme-vortex.

(b) Cas d'étude sur un diagramme spectral du cas d'interaction flamme-vortex.

FIGURE 4.21 – Configuration de la simulation d'interaction flamme-vortex et différents cas d'étude.

Six cas différents sont utilisés pour ce test et sont résumés dans la Table 4.6. Pour chaque cas, une simulation sur maillage statique homogène est d'abord réalisée et sert de calcul de référence pour la comparaison avec les simulations AMR. Dans les simulations AMR, la transition des régions fines aux régions grossières est régie par un de taux de croissance maximal de 20%. La formulation de ϵ résumée dans la Table 4.5 est utilisée, en indiquant les caractéristiques de flamme et en sélectionnant $L = R$, puisqu'un seul vortex est présent dans cette configuration simplifiée. Les cas de test sont séparés en deux groupes. Les cas A1/A2/A3/A4/A4X partagent la même flamme, avec un facteur d'épaississement $\mathcal{F} = 60$. La force du vortex Γ augmente progressivement, de sorte que le nombre de Reynolds du vortex Re_v augmente également, suivant l'Eq. (4.18). Selon la littérature sur l'interaction flamme-vortex présentée dans la Section 4.4.3, l'impact des vortex sur la flamme résolue devrait augmenter avec Re_v et devenir non négligeable pour des valeurs de $Re_{v,limit} \geq 10$. On s'attend à ce que l'AMR détecte uniquement les vortex avec $Re_v \geq Re_{v,limit} = 10$, qui devraient avoir un impact significatif sur la structure de la flamme (cas A4). Dans le cas A4X, la détection du vortex est délibérément désactivée pour montrer les conséquences de la non-détection d'un vortex qui a un fort impact sur le front de flamme. Le deuxième groupe de cas de test comprend les cas A3/B3. Ils partagent le même vortex, avec une force $\Gamma = 2.7\times10^{-2}$ m^2/s. L'épaississement de la flamme $\mathcal{F}$ est réduit de 60 (A3) à 20 (B3), de sorte que le nombre de Reynolds du vortex Re_v augmente, suivant l'Eq. (4.18).

La flamme plus fine (B3) devrait être plus sensible au vortex que la plus épaisse (A3), et la détection du vortex devrait s'adapter automatiquement en conséquence. Tous les cas sont placés dans le diagramme d'interaction flamme-vortex présenté dans la Fig. 4.21b. Pour évaluer l'impact du vortex sur la flamme, la vitesse de consommation normalisée en fonction du temps réduit t/τ_{adv} est utilisée. Étant donné que la vitesse de consommation est directement proportionnelle au taux de consommation total, l'augmentation de la vitesse de consommation normalisée correspondant au seuil de coupure mentionné dans la Section 4.4.3 est également d'environ 5%. Si la vitesse de consommation d'une flamme augmente, lors de son interaction avec le vortex, de plus de 5%, le vortex est considéré comme significatif pour l'interaction avec la flamme et doit être capturé par l'AMR. Les simulations sont effectuées jusqu'à ce que le vortex ait fini de traverser le front de flamme, c'est-à-dire jusqu'à ce que $t/\tau_{\text{adv}} = 5$. Pour effectuer ces simulations réactives avec

TABLE 4.6 – Résumé des cas d'interaction flamme-vortex

Cas	$\mathcal{F}$ [−]	Re_{v} [−]	Γ $[m^2/s]$	R $[mm]$	Δ_x $[mm]$	ϵ $[s^{-2}]$ (Eq. (4.21))	Vortex détecté	Impact attendu
A1	60	0.11	8.1×10^{-4}	51.6	5.16	1500	✗	✗
A2	60	1.1	8.1×10^{-3}	51.6	5.16	1500	✗	✗
A3	60	3.3	2.7×10^{-2}	51.6	5.16	1500	✗	✗
A4	60	11	8.1×10^{-2}	51.6	5.16	1500	✓	✓
A4X	60	11	8.1×10^{-2}	51.6	5.16	–	✗ - imposé	✓
B3	20	11	2.7×10^{-2}	51.6	1.72	165	✓	✓

détection de vortex, le masque de métrique combiné est construit de manière additive à partir des senseurs de flamme et de vortex, comme schématisé dans la Fig. 4.22. Il est défini à $M = 1$ si l'un des critères de flamme ou de vortex est satisfait (Eq. (4.2) et 4.8). De plus, suivant le raisonnement présenté dans la Section 4.3.1, puisque l'interaction flamme-vortex se produit principalement du côté des gaz frais, le champ de masque de métrique est fixé à zéro du côté des gaz brûlés, même si des vortex sont détectés. L'adaptation du maillage est déclenchée lorsqu'une des conditions des Eq. (4.4) et 4.16 est satisfaite. La taille du maillage fin est la même pour les deux QoI (la flamme et les structures tourbillonnaires). Cela est fait pour éviter les erreurs de commutation spatiale et temporelle [93, 97] dans le cadre LES présent. En effet, avoir une taille de cible différente entre la métrique de flamme et celle des vortex entraînerait une incohérence entre la taille de filtre du modèle de combustion et la taille de filtre de l'écoulement LES, ce qui nécessiterait une adaptation des modèles sous-maille [93].

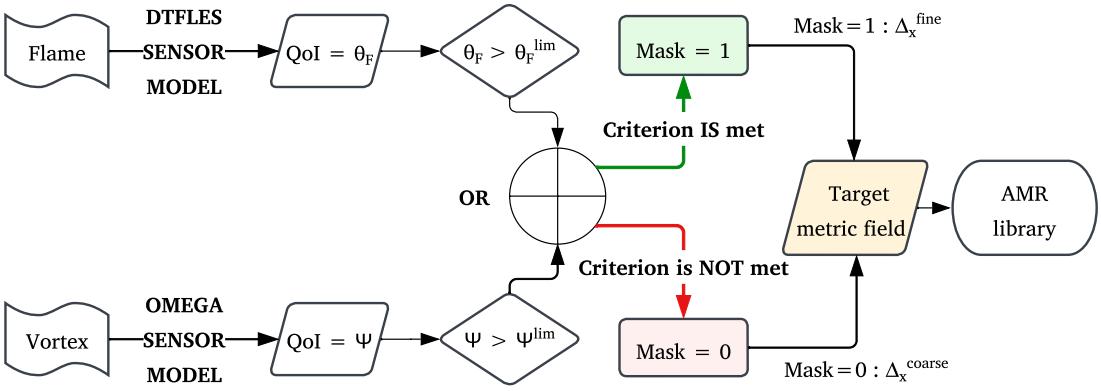


FIGURE 4.22 – Construction du champ de masque de métrique combiné pour un cas turbulent réactif.

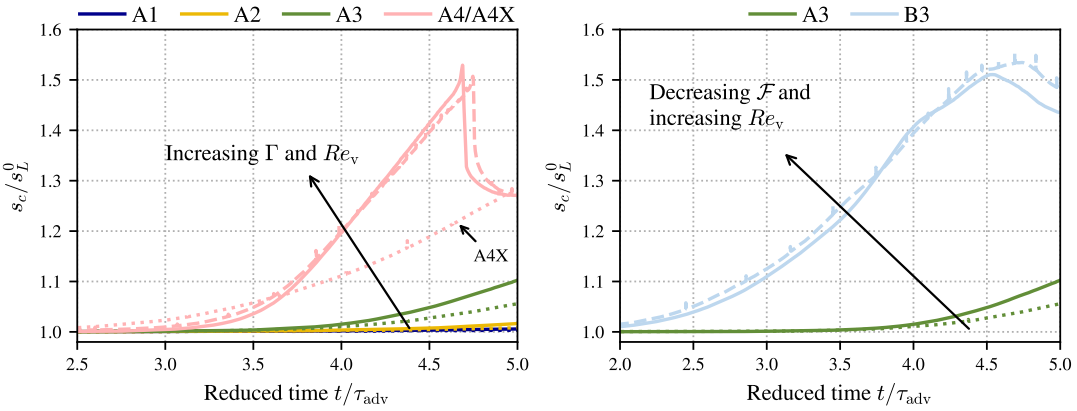
Les résultats des différentes simulations sont présentés dans la Fig. 4.23. Le premier groupe de cas (A1/A2/A3/A4/A4X) est présenté dans la Fig. 4.23a. Comme prévu, plus Re_v est élevé, plus la flamme est affectée par le vortex et plus l'augmentation de la vitesse de consommation est importante. Dans les cas A1 et A2, la variation de la vitesse de consommation est presque négligeable, inférieure à la limite de 5% : ces vortex ($Re_\mathrm{v} = 0.11$ et $1.1 < Re_{\mathrm{v,limit}}$) n'ont pas d'impact majeur sur la flamme. C'est la raison pour laquelle, même si les vortex ne sont pas détectés en AMR, les résultats restent très similaires à ceux des cas de référence effectués sur un maillage statique. Pour le cas A3 ($Re_\mathrm{v} = 3.3 < Re_{\mathrm{v,limit}}$), la flamme commence à être affectée par le vortex ($s_\mathrm{c}/s_\mathrm{L}^0 \approx 110\%$) et la simulation AMR ne récupère pas les mêmes résultats que la simulation de référence, car le vortex n'est pas détecté. La valeur de $Re_{\mathrm{v,limit}} = 10$ étant une estimation approximative tirée de la littérature (passant de $Re_{\mathrm{v,limit}} = 2.5$ [111] à $Re_{\mathrm{v,limit}} = 13$ [103]), des différences sont observées pour les cas où $Re_{\mathrm{v,limit}}$ est proche du seuil. Néanmoins, ces résultats confirment que la littérature donne des ordres de grandeur pour ce paramètre qui conduisent à des résultats raisonnables. Enfin, le cas A4 ($Re_\mathrm{v} = 11 > Re_{\mathrm{v,limit}}$) montre un impact fort sur la flamme, comme prévu ($s_\mathrm{c}/s_\mathrm{L}^0 \approx 150\%$). Le vortex est détecté avec succès dans la simulation AMR et l'évolution de la simulation de référence est correctement récupérée. Le cas A4X illustre l'importance de détecter correctement les vortex ayant un impact fort sur la flamme. Dans ce cas, la détection du vortex est désactivée, et l'impact

de l'interaction flamme-vortex n'est pas correctement pris en compte. La variation de la vitesse de consommation est deux fois moins importante que celle observée sur le cas de référence.

Les simulations de référence et AMR sont comparées plus en détail pour les cas A4 et A4X dans la Fig. 4.24. Dans le cas A4, la flamme et le vortex sont détectés simultanément dans la simulation AMR, récupérant ainsi la même évolution que le cas de référence. Le vortex est advecté vers la flamme et ses niveaux de vorticité sont préservés. La perturbation de vitesse créée par le vortex induit un fort plissement de la flamme jusqu'à ce que le vortex entre dans les gaz brûlés, où la viscosité plus élevée le dissipe rapidement. Dans la simulation AMR A4X, puisque le vortex n'est pas détecté, il évolue sur un maillage très grossier et est fortement dissipé avant même d'interagir avec la flamme. En conséquence, le vortex n'est plus à même de plisser la flamme et une nette sous-estimation de la vitesse de consommation de la flamme est observée.

Pour montrer la capacité de la méthode de détection des vortex à s'adapter aux caractéristiques de la flamme, les résultats des cas A3/B3 sont présentés dans la Fig. 4.23b. Ces deux cas ont en commun un vortex avec les mêmes caractéristiques, mais l'épaisseur de la flamme épaissie est très différente (3 fois plus faible dans le cas B3). Comme anticipé, dans le cas B3, avec une épaisseur moindre ($Re_\mathrm{v} = 11 > Re_\mathrm{v,limit}$), la flamme est plus fortement impactée par le tourbillon. L'impact est similaire à celui du cas A4, pour lequel le Re_v est identique ($s_\mathrm{c}/s_\mathrm{L}^0 \approx 150\%$). Cela confirme que le paramètre Re_v est bien représentatif de l'effet d'un vortex sur une flamme. Dans les deux cas, la valeur de ϵ s'adapte automatiquement au changement de $\mathcal{F}$, ce qui permet aux simulations AMR de reproduire correctement l'évolution obtenue sur le cas de référence.

Finalement, les conclusions issues de la littérature sont bien retrouvées ici. Pour des vortex intenses ($Re_\mathrm{v} > 10$), la flamme est fortement affectée lors de son interaction. La méthode AMR parvient à reproduire les résultats obtenus par des simulations de référence sur des maillages statiques homogènes, pour des coûts de calcul beaucoup plus faible. Par exemple, la simulation AMR du cas A4 permet de réduire de 74% le coût de calcul par rapport au cas de référence. Dans le cas où la résolution du maillage de référence est encore plus faible (cas B3), des gains de 88% avec l'AMR, par rapport au cas de référence, sont observés. Pour chaque cas, le coût dû au remaillage est négligeable ($< 1\%$) pour des



(a) Cas avec $\mathcal{F} = 60$ et des forces de vortex variables Γ (A1/A2/A3/A4/A4X).

(b) Cas avec $\Gamma = 2.7 \times 10^{-2}$ m/s et des épaississements de flamme variables $\mathcal{F}$ (A3/B3).

FIGURE 4.23 – Évolution temporelle de la vitesse de consommation de la flamme pendant l'interaction flamme-vortex. Lignes continues : simulations avec maillage statique ; lignes en tirés : simulations AMR où le vortex est détecté/raffiné ; lignes en pointillés : simulations AMR où le vortex n'est pas détecté/raffiné.

raisons similaires aux cas test précédents.

4.4.5 Conclusions intermédiaires

La méthode TFP-AMR, développée dans ce chapitre, a été validée pas-à-pas sur des cas canoniques, en 2-D et en 3-D. Elle a démontré ses capacités en termes de précision et de performance, permettant de retrouver des résultats proches de ceux obtenus sur des maillages statiques homogènes équivalents, pour des coûts beaucoup plus faibles (entre -75% et -94%). Cette méthode possède un aspect générique en étant basée au maximum sur la physique, sans ajustement de paramètre entre les différentes configurations étudiées. Elle devra cependant être adaptée dans des cas avec des phénomènes physiques différents (phénomène de couche limite en tube lisse, DDT, mélanges hétérogènes) pour suivre et résoudre les grandeurs physiques spécifiques jouant un rôle important. Enfin, certains paramètres ont été fixés arbitrairement et doivent être étudiés afin d'obtenir une meilleure compréhension de leur impact sur la précision et le coût des calculs. De plus, le coût de calcul total et le coût de l'algorithme AMR ne sont pas représentatifs de ceux pouvant être obtenus sur des configurations 3-D complexes. Ainsi, la méthode TFP-AMR va être appliquée sur une configuration plus complexe d'explosion dans une chambre obstruée et

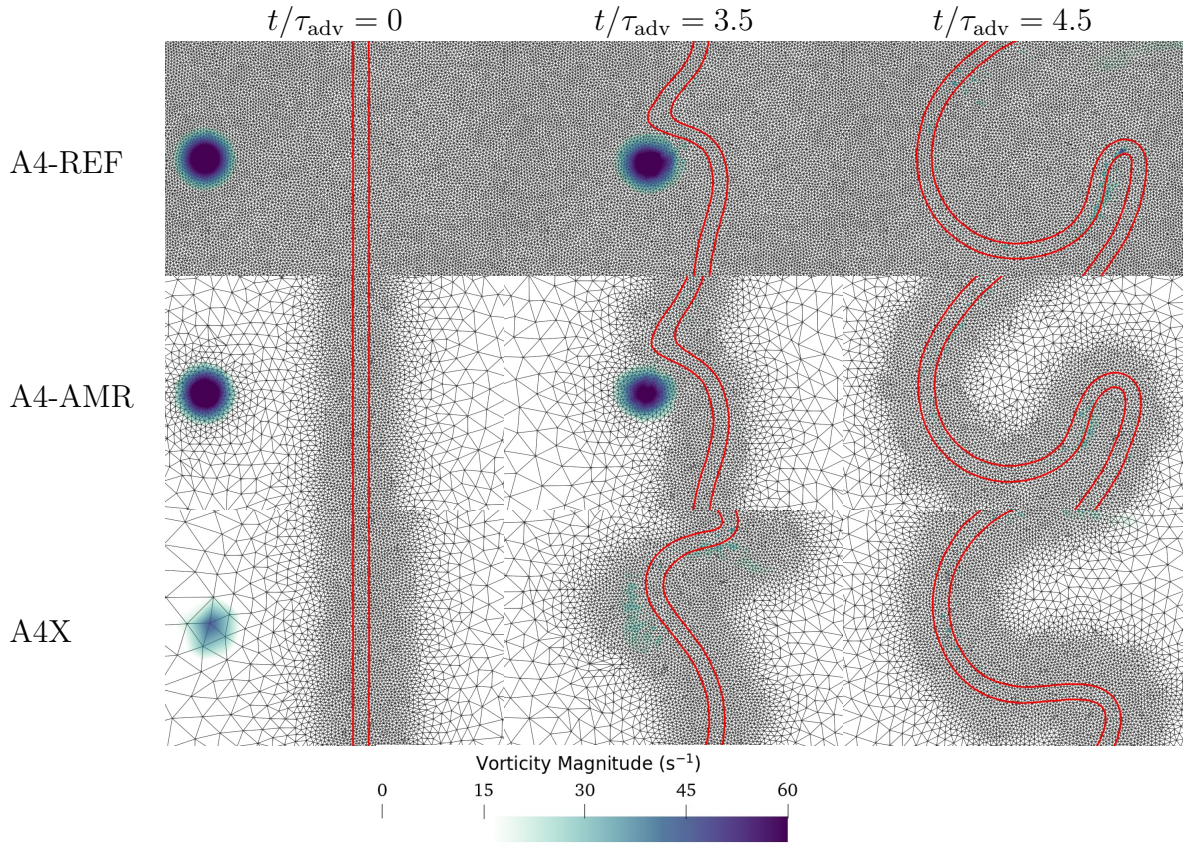


FIGURE 4.24 – Évolution du maillage à trois instants (en colonnes). Comparaison entre les cas avec $\mathcal{F} = 60$, $\Gamma = 2.7 \times 10^{-2}$ m^2/s et $Re_{\mathrm{v}} = 11$ (en lignes) : (A4-REF) simulation avec maillage statique de référence ; (A4-AMR) simulation AMR avec détection de vortex activée ; (A4X) simulation AMR avec détection de vortex désactivée. Le champ de vorticité (échelle de bleus) et les iso-contours de variable de progrès ($c = 0.1$ et 0.9) identifient respectivement le vortex et la flamme.

semi-confinée en Chapitre 5, afin d'être validée.

Chapitre 5

Application de la méthode AMR pour un scénario de déflagration dans une configuration à échelle réduite

Pour valider la méthodologie TFP-AMR présentée dans le Chapitre 4, une série de LES d'explosions sont réalisées dans une chambre semi-confinée et obstruée. L'objectif est de valider la méthodologie AMR développée dans le chapitre précédent (Chap. 4). La stratégie de validation repose sur la comparaison des résultats obtenus en utilisant la méthodologie AMR par rapport à des simulations sur maillages statiques homogènes. La robustesse et la capacité de généralisation de la méthodologie AMR sont évaluées en réalisant des variations de paramètres géométriques et de carburant. Les différents travaux menés par le passé sur la configuration étudiée dans ce chapitre ont montré l'importance et la sensibilité à la bonne reproduction des mécanismes d'interaction flamme/structures tourbillonnaires pour prédire l'accélération de flamme et retrouver les signaux expérimentaux avec précision [107, 124, 126]. La capacité de la LES à reproduire des scénarios d'explosions dans des géométries obstruées, en utilisant une modélisation appropriée, pour différents mélanges et géométries, a été validée et offre aujourd'hui un outil précis pour simuler ces phénomènes numériquement. De par cette forte sensibilité, ce cas permet donc d'évaluer la robustesse et la précision de la méthode sur un cas représentatif d'un scénario de déflagration.

5.1 Description de la configuration

La configuration expérimentale étudiée est une explosion dans une chambre, à une échelle typique d'expérience en laboratoire (géométrie avec une échelle de l'ordre de la dizaine de centimètres), de l'Université de Sydney [76, 89]. Il s'agit d'une chambre semi-confinée avec un nombre variable d'obstacles où la propagation de déflagrations pour différents mélanges est étudiée. La chambre est remplie d'un mélange air-combustible

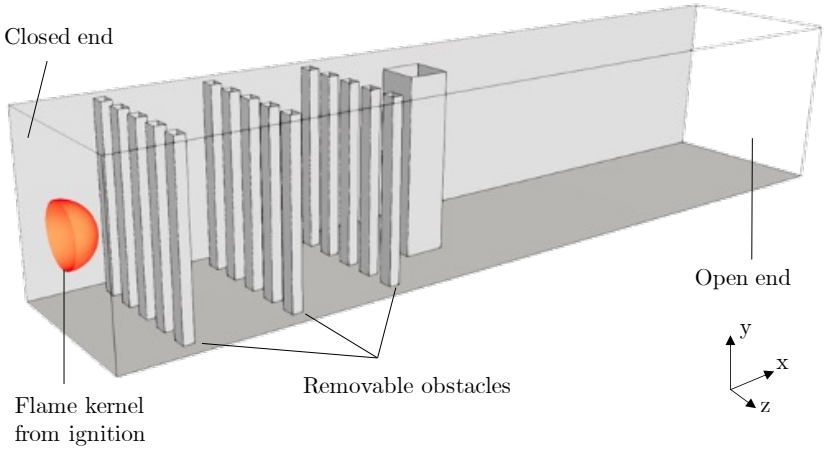
parfaitement prémélangé et est allumée à l'extrémité gauche qui est fermée (Fig. 5.1a). Les obstacles sont répartis en trois grilles amovibles qui peuvent être positionnées à différentes distances de la source d'allumage, suivies d'un obstacle central fixe avec une section transversale carrée. Le nombre d'obstacles pilote le niveau de turbulence générée lorsque la flamme se propage dans la chambre. Cette configuration est très adaptée pour démontrer la validité de la méthode TFP-AMR et sa capacité à se transposer d'une configuration à l'autre :

1. La base de données expérimentale comprend différents points de fonctionnement avec des variations géométriques, ce qui permet d'évaluer la polyvalence de l'approche AMR proposée.
2. Des travaux antérieurs ont montré la capacité de la LES à reproduire la physique de tels phénomènes [124, 126] en utilisant des maillages statiques et homogènes, constituant ainsi une large base de comparaison pour l'évaluation des résultats AMR.

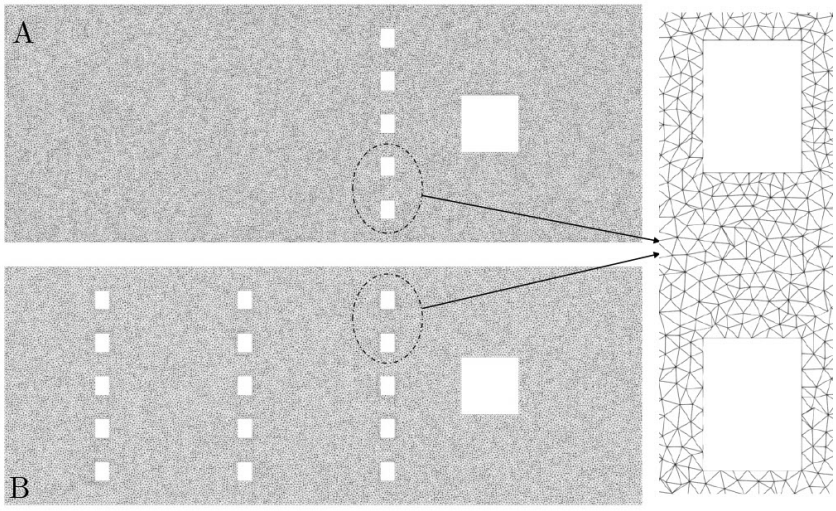
TABLE 5.1 – Matrice des cas considérés sur la configuration Masri

Cas	Géométrie	Nombre de grilles d'obstacles	Combustible	s_L^0 (m/s)	Type de chimie
A-C_3H_8	A	1	C_3H_8	0.383	Global
B-C_3H_8	B	3	C_3H_8	0.383	Global
B-H_2	B	3	H_2	1.27	Squelettique

Pour ce travail, trois configurations sont retenues, comme résumé dans la Table 5.1. Deux géométries différentes sont étudiées. La première géométrie (notée A) correspond à une chambre avec 1 grille d'obstacles suivie d'un obstacle central (Fig. 5.1b en haut). La deuxième (notée B) correspond à une chambre avec 3 grilles d'obstacles suivies d'un obstacle central (Fig. 5.1b en bas). De plus, deux mélanges inflammables sont considérés : un mélange propane-air à une richesse de $\phi = 1$ et un mélange hydrogène-air à une richesse de $\phi = 0.7$. Les caractéristiques initiales de flamme laminaire, pour ces deux mélanges, sont résumées dans la Table 5.2. La vitesse de flamme laminaire est environ quatre fois plus élevée dans le cas de l'hydrogène. Étant donné que la vitesse de propagation du front de flamme augmente avec la vitesse de flamme laminaire, une déflagration plus rapide et donc plus sévère est attendue dans le cas de l'hydrogène.



(a) Schéma de la chambre d'explosion correspondant à la géométrie B.



(b) Vue en coupe dans le plan médian dans l'axe des barres d'obstacle, pour les géométries A (en haut) et B (en bas) avec des maillages statiques de référence. Un zoom sur le maillage à proximité des obstacles est également montré.

FIGURE 5.1 – Configurations de la chambre d'explosion de l'Université de Sydney.

TABLE 5.2 – Caractéristiques principales des flammes et des conditions de fonctionnement : combustible, richesse ϕ, vitesse de flamme laminaire s_{L}^0, épaisseur de flamme laminaire δ_{L}^0, température des gaz frais T_{u}, température des gaz brûlés T_{b} et pression initiale p_0.

Combustible	ϕ	s_{L}^0 (m/s)	δ_{L}^0 (mm)	T_{u} (K)	T_{b} (K)	p_0 (Pa)
C_3H_8	1	0.383	0.341	300	2300	101325
H_2	0.7	1.27	0.311	300	2009	101325

Seuls les niveaux de surpression, résultants de la déflagration et relevés expérimentalement à l'aide d'un capteur de pression placé au centre de l'extrémité fermée de la chambre, près du système d'allumage (Fig. 5.1a) sont comparés. Plusieurs résultats expérimentaux sont regroupés et permettent d'obtenir une enveloppe expérimentale.

L'objectif principal de toute simulation est donc de récupérer l'évolution expérimentale de la surpression. Dans le cas de l'AMR, l'objectif est de reproduire les résultats du cas de maillage statique de référence (REF) pour un coût de calcul moindre.

5.2 Configuration numérique

La configuration numérique de la LES est proche de celle décrite dans Vermorel et al. [124]. Le domaine de calcul comprend une chambre et un plénum, situé à sa sortie, qui modélise l'atmosphère. Les murs de la chambre et des obstacles sont modélisés comme des parois sans glissement (vitesse nulle). Les conditions aux limites du plénum sont définies par un traitement de sortie à pression atmosphérique, en utilisant le formalisme NSCBC [101]. Le schéma numérique TTGC [33] est utilisé ici, et la turbulence à l'échelle de sous-maille est modélisée par le modèle WALE [98]. Le modèle de combustion DTFLES est utilisé avec la formulation d'efficacité de Colin et al. [34]. Un schéma cinétique simplifié de 6 espèces à 2 étapes est utilisé pour la combustion propane-air [108]. Pour l'hydrogène, l'étude précédente de Vermorel et al. [124] utilisait un schéma chimique simplifié en 1 étape. Pour augmenter la précision de la modélisation chimique et montrer la validité de l'AMR en utilisant un schéma cinétique plus complexe, le schéma de mécanisme réduit pour la combustion de l'hydrogène de l'Université de San Diego [21] (9 espèces, 42 réactions) est utilisé dans cette étude. En raison de la nature plus complexe du schéma chimique, le senseur de flamme algébrique de l'Eq. (3.36), qui est basé sur une seule réaction, n'est plus applicable. Le senseur de Jaravel [68] décrit par l'Eq. (3.42), basé sur une équation de transport, est utilisé de cas spécifique de chimie complexe. Bien que la formulation du senseur soit différente, le champ de senseur résultant θ_{F} peut être utilisé de façon analogue comme une QoI pour l'AMR.

Comme évoqué précédemment, la stratégie de validation de l'AMR repose sur une comparaison des résultats obtenus par les simulations avec AMR à des simulations sur

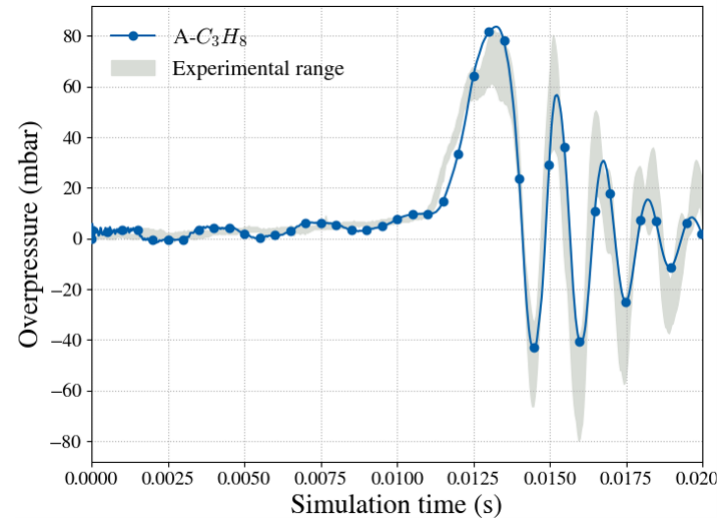
maillages statiques homogènes. Ces simulations dites de référence sont effectuées pour chacune des configurations. Les maillages des différentes configurations ont tous une résolution homogène $\Delta_x = 0.5\ mm$ dans la chambre, correspondant à un épaississement $F_{\max} = 7.3$ pour les cas propane et $F_{\max} = 8.0$ pour le cas hydrogène, avec un déraffinement progressif dans le plénum.

Les solutions initiales des simulations sont obtenues à partir de profils de flamme 1-D calculés à l'aide du solveur de cinétique chimique Cantera [51]. La solution de flamme plane est projetée sur un hémisphère qui représente le noyau de flamme initial, d'un rayon de 10 mm imposé à $t = 0$ (Fig. 5.1a). Le reste de la chambre est rempli par le prémélange combustible-air correspondant au cas étudié, comme résumé en Table 5.2. Le plénum est lui rempli d'air dans des conditions atmosphériques ambiantes.

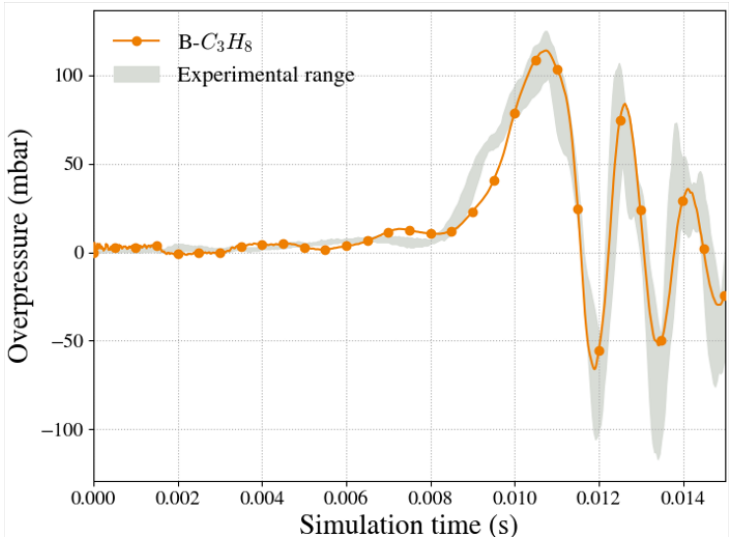
5.3 Validation des résultats de référence sur maillage statique homogène

Une comparaison des résultats entre la simulation et les résultats expérimentaux est présentée en Fig. 5.2. Pour chaque cas, un recalage temporel du signal a été effectué pour faire coïncider les instants du premier pic de surpression, obtenus d'un côté par les expérimentations et de l'autre par les simulations. Cette pratique est très courante dans les simulations de ce type de phénomènes, le référentiel temporel utilisé lors des expérimentations étant peu précis [112, 124]. De plus, la procédure numérique d'initialisation du noyau de flamme ne reproduit pas les premiers instants du noyau de flamme après le claquage de la bougie.

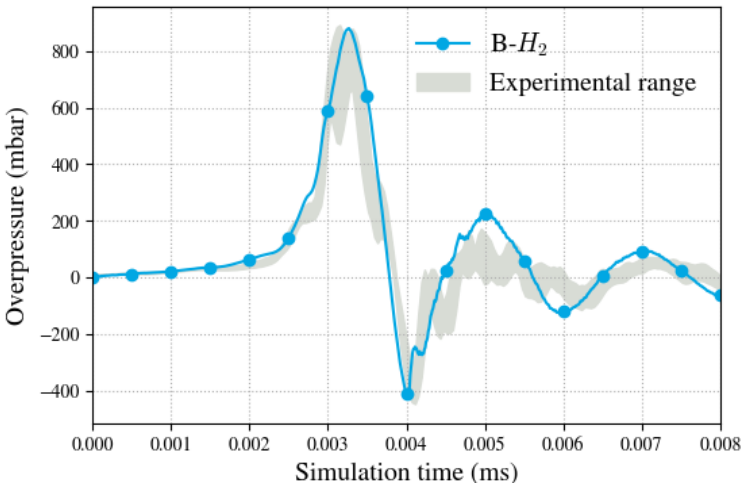
Les résultats obtenus par les simulations permettent de reproduire de façon satisfaisante les signaux de surpression observés expérimentalement, avec un accord comparable par rapport aux travaux utilisant la même approche numérique [107, 124]. Dans cette configuration semi-confinée, les niveaux de surpressions sont dépendants de la compétition entre le taux de réaction de la flamme et le débit sortant par l'évent, comme rappelé en Eq. (2.53). Ainsi, une reproduction satisfaisante des signaux de surpression nécessite une modélisation satisfaisante de la dynamique de la flamme et de l'écoulement. Le premier pic, dû à la forte augmentation de la vitesse de consommation, et les pics suivants,



(a)



(b)

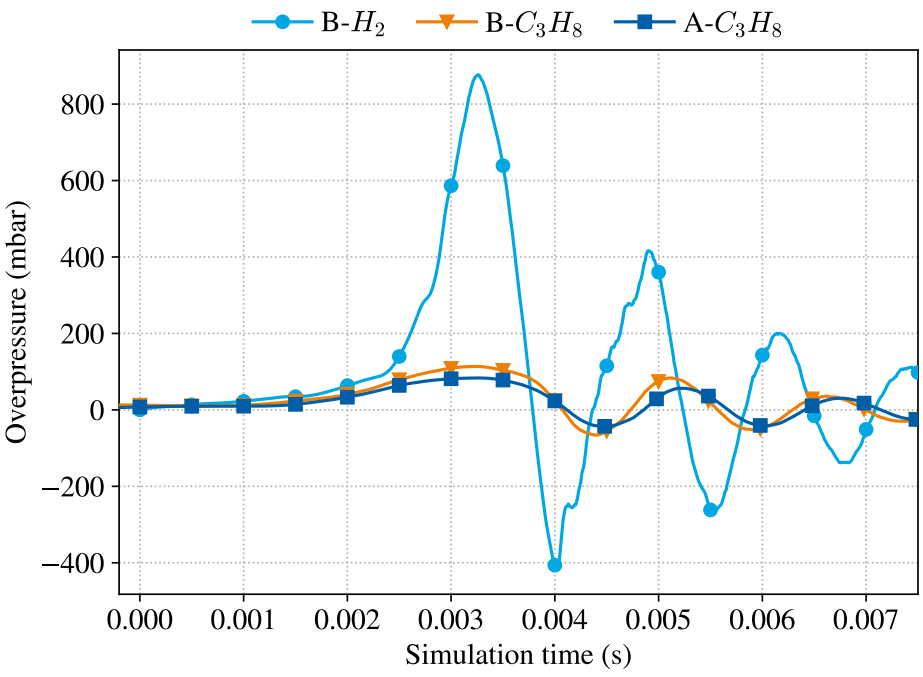


(c)

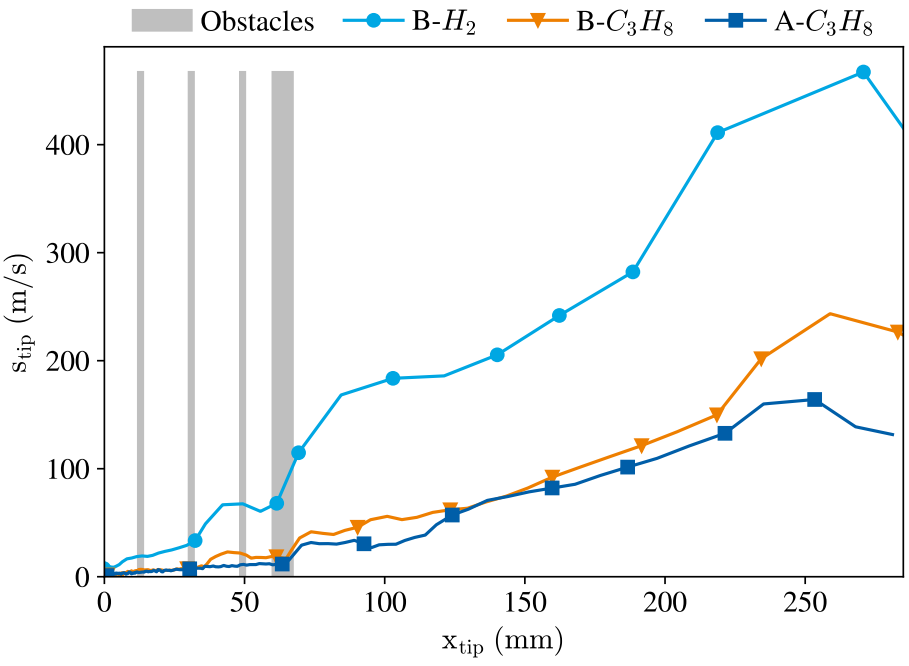
FIGURE 5.2 – Évolution temporelle des surpressions pour les cas sur maillages statiques et comparaison avec les résultats expérimentaux pour A-C_3H_8(a), B-C_3H_8(b) et B-H_2(c).

causés par l'excitation du premier mode acoustique longitudinal de la chambre, comme montré par Quillatre [107], sont correctement reproduits pour chaque cas. Ces résultats permettent également de montrer la robustesse de la modélisation utilisée ici et conservée à l'identique pour les trois différents cas, à l'exception de la modélisation chimique. Les signaux de surpression de chaque cas sont superposés en Fig. 5.3a et l'évolution de la vitesse absolue du front de flamme est présentée en Fig. 5.3b.

Une augmentation de la surpression est observée du cas A-C_3H_8 ($\approx$ 82 kPa) au cas B-C_3H_8 ($\approx$ 113 kPa), puis du cas B-C_3H_8 au cas B-H_2 ($\approx$ 861 kPa). Pour comprendre ces montées en pression, il faut se ramener aux mécanismes décrits en Section 2.4 : le processus d'accélération progressive de la flamme est le résultat d'une boucle de rétroaction dans laquelle le taux de consommation total de carburant augmente aussi fortement. L'expansion des gaz brûlés devient très rapide, de sorte qu'elle n'est plus compensée par l'évacuation de gaz frais en sortie de chambre. C'est ce déséquilibre qui conduit à l'augmentation abrupte de la pression de chambre à partir d'un certain stade. Afin de donner une première vision qualitative du phénomène, des champs instantanés des différentes simulations sont présentées en Fig. 5.4, à différents instants.



(a)



(b)

FIGURE 5.3 – Comparaisons (a) des signaux de surpression (b) des vitesses absolues (s_{tip}) du front de flamme par rapport à sa position (x_{tip}) (Les deux premiers obstacles ne sont pas présents dans le cas A-C_3H_8).

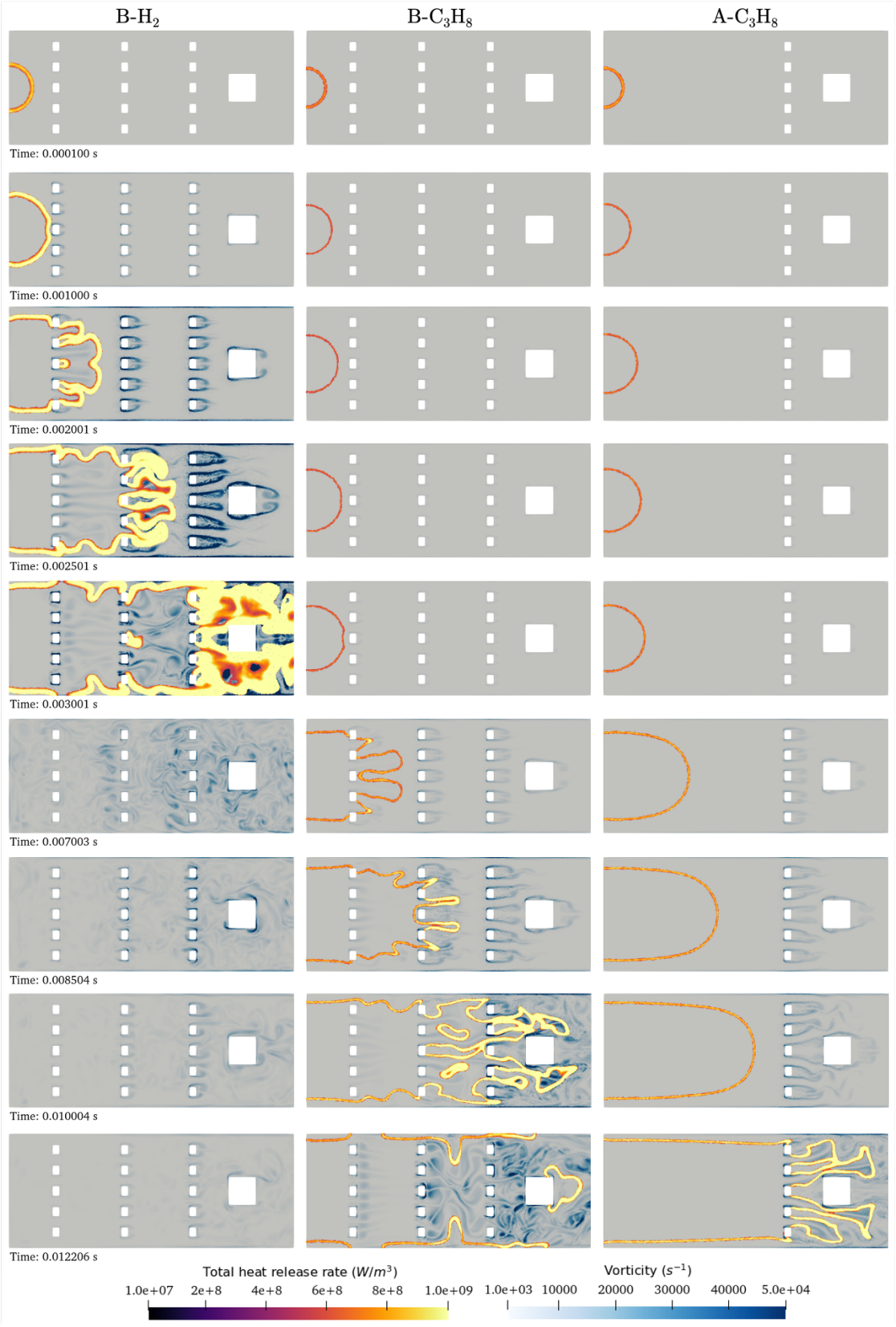


FIGURE 5.4 – Comparaison du taux de dégagement de chaleur (HRR) et de la norme de vorticité entre les cas de référence sur maillage statique A-C_3H_8 (gauche), B-C_3H_8 (milieu) et B-H_2 (droite), pour les trois cas de la Table 5.1 à différents instants et à différentes positions, dans le plan (x,z).)

Dans la phase laminaire sphérique, le front de flamme se déplace à une vitesse égale au produit de la vitesse de flamme laminaire et du rapport d'expansion des gaz à travers la flamme (Eq. (2.54)). Ainsi, pour les cas de déflagration au propane, les flammes avancent dans les premiers instants à la même vitesse. La flamme hydrogène-air a une vitesse de flamme laminaire 3.3 fois supérieure (Fig. 5.3) et arrive donc au niveau des premiers obstacles dans un délai plus court (t = 1 ms en Fig. 5.4, contre 3 ms pour le cas B-C_3H_8). Les trois flammes subissent toutes une accélération causée par l'interaction entre l'expansion des gaz brûlés et le confinement latérale du noyau de flamme durant cette phase laminaire, mécanisme décrit dans la Section 2.4. Durant cette phase, le taux de dégagement de chaleur n'augmente que très légèrement, car la flamme n'est pas plissée. Une fois que la flamme d'hydrogène-air traverse la première rangée d'obstacles (t = 2 ms), cette dernière est plissée et divisée en plusieurs branches qui vont chacune interagir avec les structures tourbillonnaires, peu intenses, formées autour et en aval des obstacles, la plissant légèrement. Cette augmentation de surface de flamme va augmenter la vitesse de consommation totale. Cela augmente la force du piston perméable résultant de l'expansion des gaz brûlés, ce qui augmente les niveaux de vitesses et d'intensité des structures tourbillonnaires de l'écoulement. Un mécanisme de rétro-action se met alors en place, la flamme accélérant davantage sous l'effet de structures tourbillonnaires de plus en plus fortes en aval de chaque obstacle (à t = 2.5 ms puis t = 3 ms), jusqu'au passage du dernier obstacle. La flamme d'hydrogène-air atteint alors des niveaux de vitesse absolue élevés ($s_{\text{tip}} \approx 100$ m/s) et génère une forte surpression (≈ 0.9 bar). Pour les flammes de propane-air, la vitesse absolue atteinte par la flamme est moindre comme dans le cas B-C_3H_8, où la surpression est beaucoup plus faible que pour le cas B-H_2. Les structures tourbillonnaires générées derrière la première rangée d'obstacles sont alors beaucoup moins énergétiques, comme illustré en Fig. 5.4 (t = 3 ms). Les champs de vorticité au niveau du premier obstacle sont notamment comparés pour les cas B-C_3H_8 et B-H_2 en Fig. 5.5, pour une même position de flamme. La flamme va alors moins se plisser (Fig. 5.4, t = 7 ms) et sa vitesse de consommation totale ne va subir qu'une légère augmentation. Cependant, la vitesse absolue de la flamme, lors de son passage au niveau de la deuxième rangée d'obstacles (Fig. 5.4, t = 8.5 ms), va générer une forte turbulence autour de la troisième rangée d'obstacles, qui va venir la plisser fortement (Fig. 5.4, t = 10 ms) et ainsi l'accélérer fortement. Les niveaux

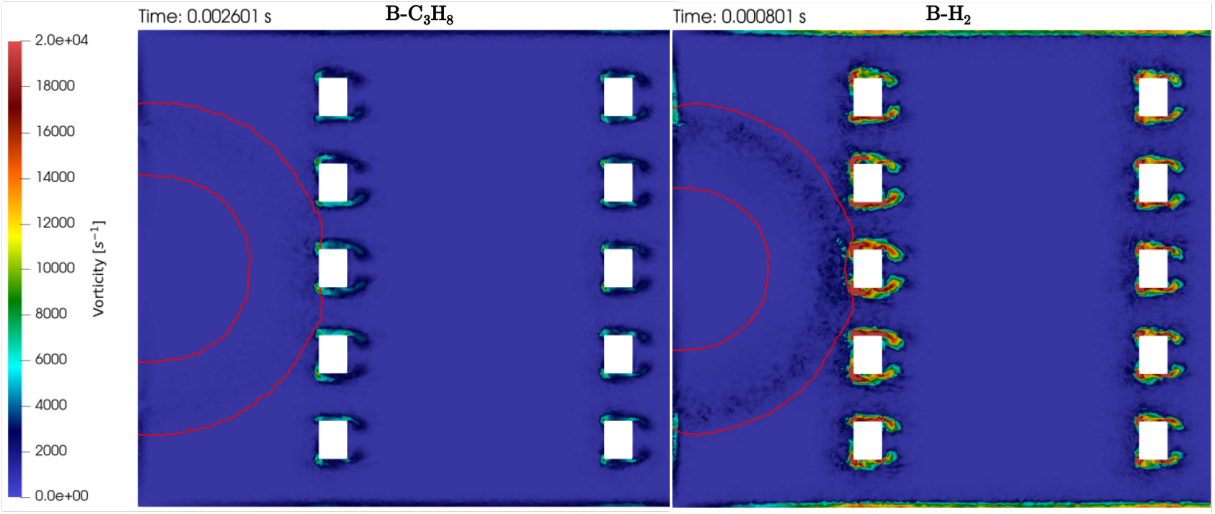


FIGURE 5.5 – Comparaison des niveaux de norme de vorticité autour des deux premières rangées d'obstacles pour les cas B-C_3H_8 (gauche) et B-H_2 (droite). Comparaison à iso-position de flamme, représentée par un contour rouge.

de vitesse absolue étant moins élevés, le signal de surpression observé est alors beaucoup plus faible que pour le mélange d'hydrogène-air. Enfin, dans le cas A-C_3H_8, la flamme va rester laminaire jusqu'à la dernière rangée d'obstacle où, elle aussi, va finir par être plissée lors de son interaction avec la forte turbulence générée (Fig. 5.4, t = 12.2 ms), et va ainsi accélérer. Le pic de surpression est cependant plus faible que pour le cas à trois rangées d'obstacles.

Les résultats obtenus sur maillages homogènes statiques ont permis de valider la configuration numérique en reproduisant la physique de la déflagration pour chaque cas. Dans les différents cas, les principaux mécanismes d'accélération de flamme ont été identifiés et dépendent principalement de l'interaction entre la flamme et les structures tourbillonnaires autour et en aval des obstacles.

Ces résultats satisfaisants confirment la pertinence de l'approche AMR retenue, qui s'appuie sur des métriques basées sur la compréhension physique des phénomènes d'interaction en jeu dans les mécanismes d'accélération de déflagrations dans des environnements obstrués. La méthode AMR a été validé dans le chapitre précédent sur des cas idéalisés d'interaction des phénomènes, il convient donc de l'évaluer dans cette configuration représentative, ce qui est l'objet de la prochaine section.

5.4 Évaluation de la méthode AMR par comparaison aux cas de référence

Les simulations effectuées sur des maillages statiques seront désignées par REF dans la suite du chapitre. Pour les simulations AMR, la résolution cible, dans les grandeurs d'intérêt, est égale à celle du maillage statique pour assurer une comparaison équitable. En dehors, la résolution cible est fixée à 2.5 mm, correspondant à un rapport maximum $\Delta_x^{\text{coarse}}/\Delta_x^{\text{fine}}$ de 5. Ce rapport est imposé par des contraintes géométriques, car une résolution minimale de deux cellules est nécessaire dans les espaces de 5 mm entre deux obstacles pour maintenir l'intégrité de la discrétisation de la géométrie. La transition du maillage fin au maillage grossier est régie par un rapport de taux de croissance maximal de 10%. La résolution du maillage du côté du plénum n'est, elle, pas modifiée durant toute la simulation.

Une comparaison qualitative des champs d'écoulement entre les simulations AMR et REF est présentée dans la Fig. 5.6 pour chacun des cas de la Table 5.1. Pour les trois cas, la physique de la flamme et de l'écoulement de la simulation de référence sur des maillages homogènes et statiques est parfaitement reproduite par les simulations AMR. La forme de la flamme et les niveaux de dégagement de chaleur sont visuellement identiques. Ce résultat est d'autant plus satisfait que la forme de flamme et l'écoulement induit en amont sont le résultat de l'historique de l'ensemble du processus de l'accélération de flamme depuis les premiers instants. La correspondance entre les simulations AMR et REF confirme que l'historique complet du scénario de déflagration a été correctement capturé. Les niveaux de vorticité sont très proches, et la forme du sillage autour des obstacles est également correctement reproduite avec l'AMR. Cela confirme la validité des critères conservatifs de sélection de vortex développés dans la Section 4.4.3.

De plus, les évolutions de la vitesse absolue du front de flamme (s_{tip}) et du taux de dégagement de chaleur moyen sur le domaine sont correctement reproduits comme illustré en Fig. 5.7. Toutes ces quantités physiques extraites indiquent la bonne reproduction des mécanismes physiques essentiels d'accélération de flamme de la méthode TFP-AMR, et sa robustesse à des variations de paramètres de la configuration (géométriques et chimiques).

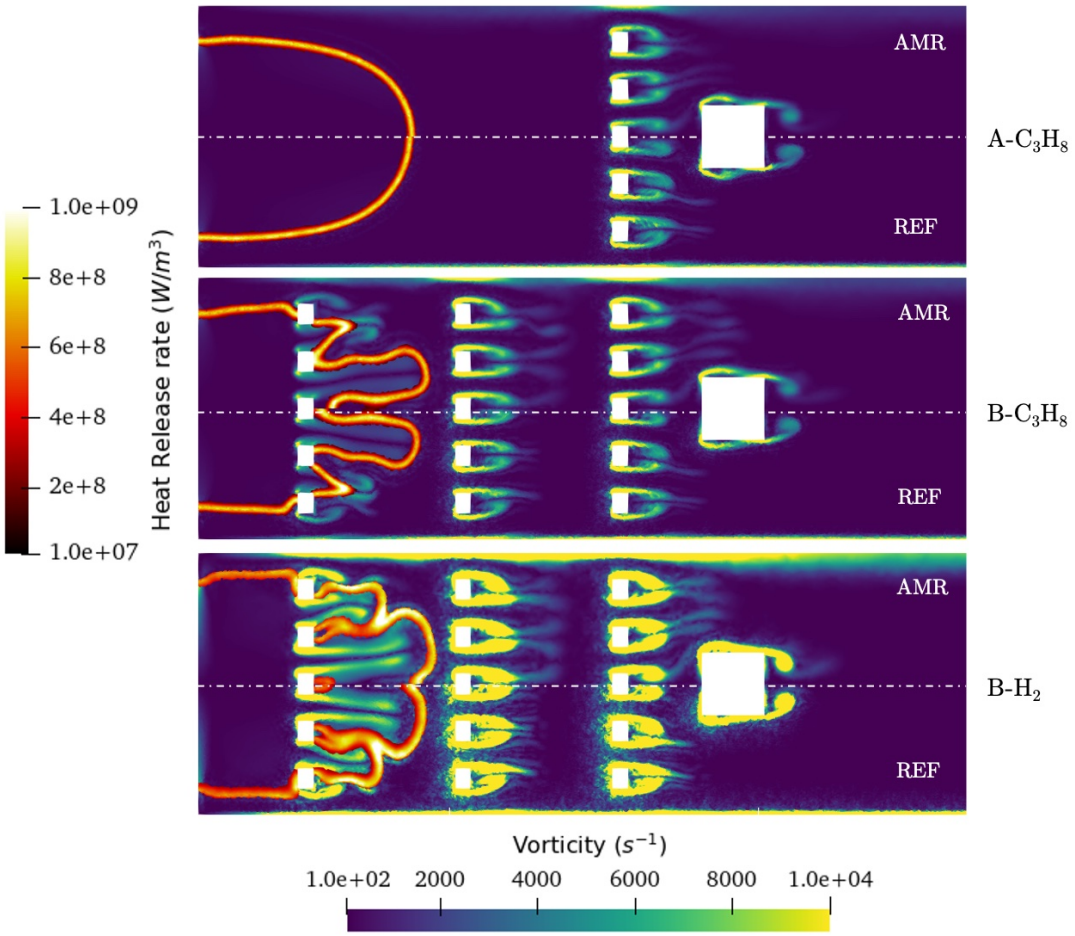


FIGURE 5.6 – Taux de dégagement de chaleur au niveau du front de flamme et champ de la norme de vorticité. Comparaison entre les simulations AMR et REF pour les trois cas de la Table 5.1. Tous les cas sont comparés approximativement à la même position de l'extrémité de la flamme, correspondant à l'arrivée de la flamme à la deuxième rangée d'obstacles dans la géométrie B.

Afin d'analyse le comportement de l'adaptation du maillage pendant la propagation de la flamme, l'évolution de la surpression et du nombre de cellules dans le maillage sont montrés en Fig. 5.8. Au tout début des simulations, le nombre d'éléments dans les cas AMR est environ 8 fois inférieur à celui du cas REF correspondant, pour les trois cas. Cela correspond à la phase laminaire, où la flamme n'est pas encore plissée et la surpression n'augmente que très légèrement. Ensuite, une forte augmentation du nombre de cellules est d'abord observée. Elle correspond à la détection de structures tourbillonnaires de fortes intensités, que la flamme génère par effet piston en poussant les gaz frais à travers les obstacles. Cette augmentation est suivie d'une augmentation progressive, au fur et à mesure que la flamme se propage, jusqu'à atteindre un maximum d'environ 80% de la

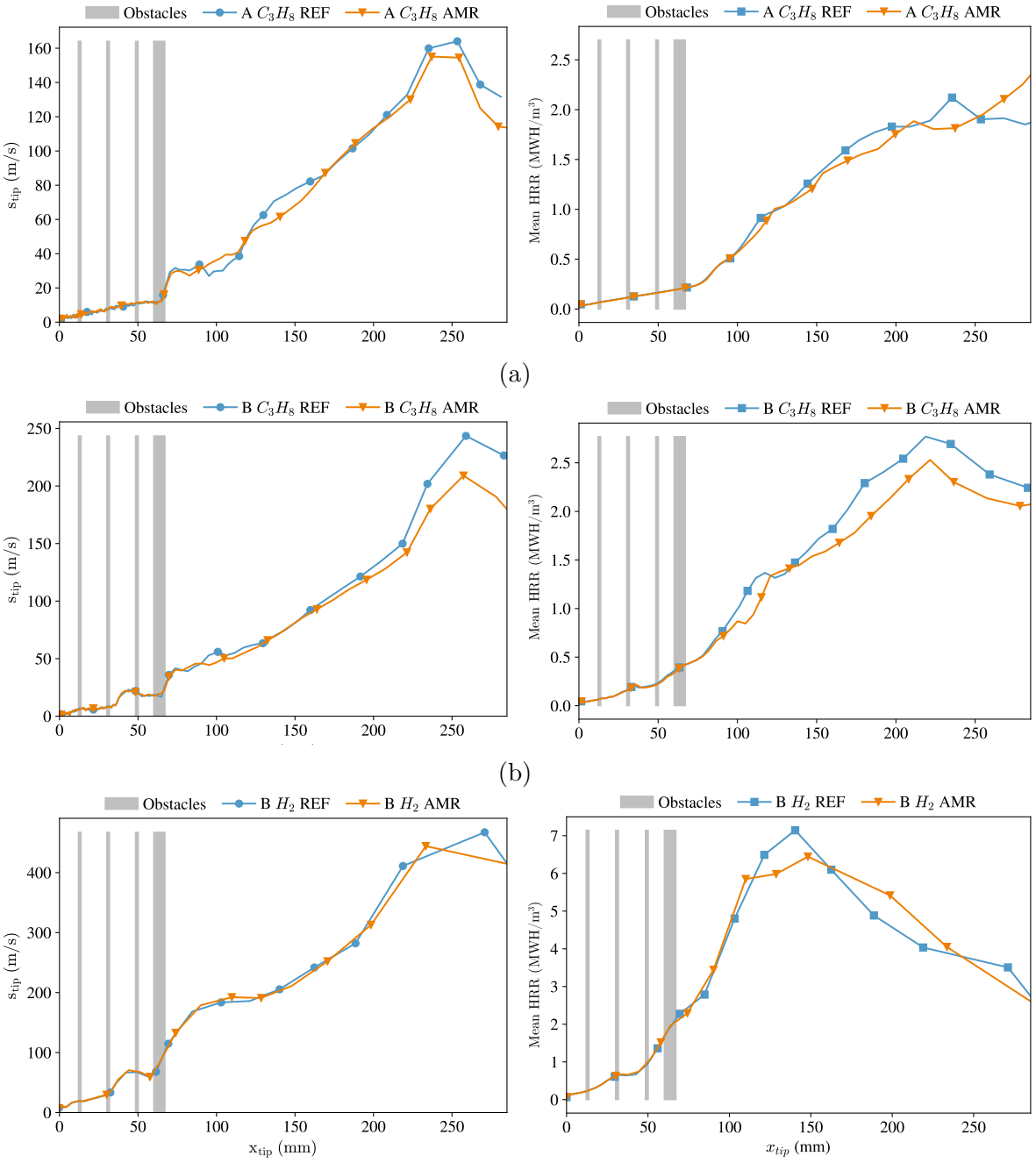


FIGURE 5.7 – Comparaisons entre les cas REF et AMR : (gauche) de l'évolution de la vitesse absolue du front de flamme (s_{tip}) (droite) de l'évolution du taux de dégagement de chaleur moyen dans la chambre en fonction de la position du front de flamme (x_{tip}), pour les trois cas (a) A-C_3H_8, (b) B-C_3H_8 et (c) B-H_2.

taille du maillage statique. Ce pic de nombre de mailles survient au même instant que le pic de surpression, et correspond au moment où la flamme sort de la chambre vers le plénum. À ce moment-là, la flamme est présente dans une grande partie de la chambre, ce qui explique la taille conséquente du maillage. Ces mêmes conclusions sont obtenues en examinant visuellement l'évolution des champs de masques qui déterminent l'évolution du maillage adapté. Ils sont représentés, pour le cas B-H_2, dans la Fig. 5.9. Initialement, lorsque l'écoulement est laminaire, seul le noyau de gaz brûlés hémisphérique est détecté et raffiné. Lorsque la flamme commence à se propager, des structures tourbillonnaires sont détectées autour des obstacles par le senseur. Cela conduit à une première augmentation du nombre de cellules, montrée dans la Fig. 5.8. Comme le cas A-C_3H_8 comporte moins d'obstacles, le nombre total de cellules est légèrement inférieur à celui des deux autres. Par la suite, la flamme accélère progressivement et occupe une fraction de plus en plus importante de l'espace dans la chambre, augmentant le volume de la zone raffinée et, par conséquent, la taille du maillage. Cette occupation importante de l'espace est d'autant plus importante que la flamme est épaissie. Le champ de masque suit l'évolution de la flamme ainsi que celles des tourbillons générés et advectés dans le sillage des obstacles. Dans en fin de propagation, l'ensemble des obstacles est entouré de gaz brûlés et le front de flamme est proche de l'extrémité de la chambre. C'est dans cette phase que le nombre de cellules atteint un maximum correspondant à 80% de la taille du maillage statique. Dans la dernière phase de propagation, la flamme quitte la chambre et le nombre de cellules diminue en conséquence.

5.5 Évaluation et analyse du coût de calcul

Pour une simulation AMR, le coût de calcul total correspond à la somme du coût du solveur et du coût des adaptations de maillage. Pour chacun des cas, le coût du solveur du cas REF, le coût du solveur AMR et le coût de l'adaptation du maillage AMR sont comparés en Fig. 5.10. Les coûts sont évalués de l'allumage à l'instant correspondant au troisième pic de surpression dans la simulation REF. Dans le cas A-C_3H_8, par exemple, les coûts des simulations REF et AMR sont comparés pour un temps physique de 0 à 16.7 ms. Les réductions de coût de calcul les plus importantes sont observées pour le cas

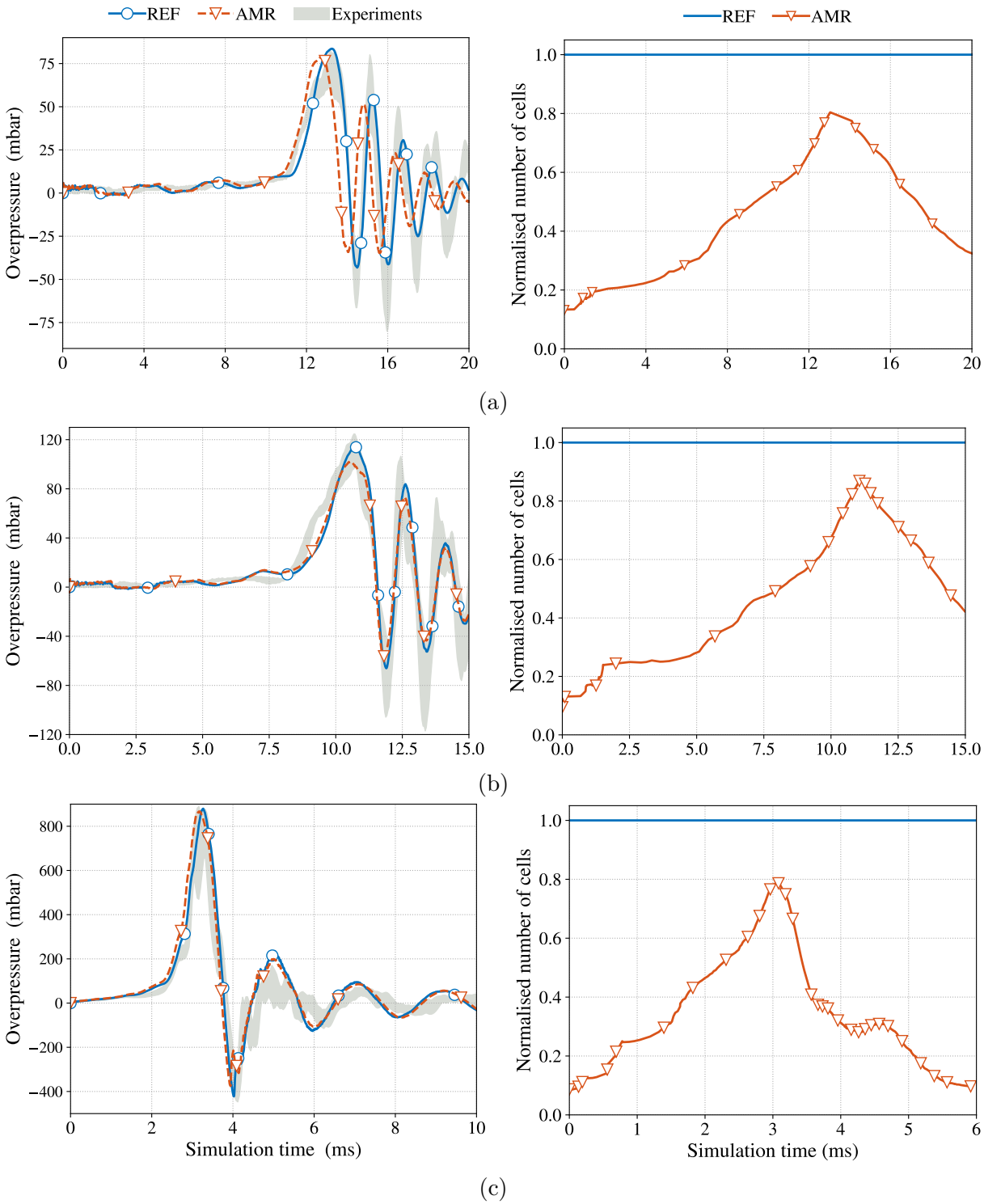


FIGURE 5.8 – Évolution temporelle de la surpression au point d'allumage (colonne de gauche) et évolution temporelle du nombre total de cellules du maillage (colonne de droite) : les symboles sont placés toutes les 10 adaptations de maillage. Comparaison entre les simulations AMR et REF pour les trois cas (a) cas A-C_3H_8, (b) B-C_3H_8 et (c) B-H_2 (lignes).

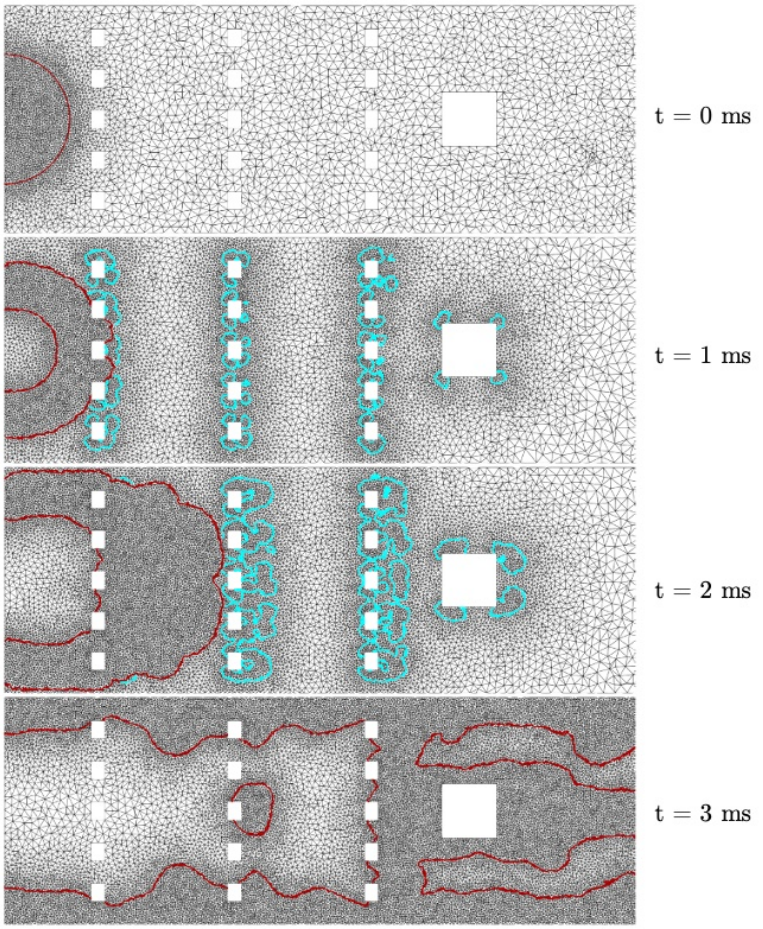


FIGURE 5.9 – Instantanés du maillage adapté dans le cas B-H_2 à différents instants. Iso-contours $M = 1$ des masques pour chaque métrique : le masque de flamme est indiqué en rouge et le masque de vortex en bleu.

A-C_3H_8 (-64,0%), suivi du cas B-C_3H_8 (-45,3%) et enfin du cas B-H_2 (-31,7%). Ce résultat est le résultat de dynamiques différentes pour la flamme et la turbulence dans chacun des cas. En effet, la Fig. 5.8 illustre le fait que, dans le cas A-C_3H_8, la simulation AMR met environ 10 ms pour atteindre 50% du nombre de cellules du cas REF, ce qui représente 59% du temps physique simulé car la flamme est plus lente. De plus, les obstacles sont moins nombreux et situés plus en aval dans la chambre, ce qui regarde la génération de structures turbulentes. En comparaison, ce nombre de cellules est atteint après 7.5 ms (58% du temps physique simulé) pour le cas B-C_3H_8 et 2.5 ms 36% du temps physique simulé) pour le cas B-H_2. Cela peut s'expliquer en examinant les résultats des simulations sur la géométrie A. Dans cette géométrie, la flamme met beaucoup plus de temps à atteindre les premiers obstacles (64% du temps physique simulé), restant laminaires, et donc plus lente, pendant une plus longue période. Cela permet une plus grande réduction du nombre

de cellules, car la flamme ne couvre qu'une petite partie du domaine de calcul pendant plus longtemps. Dans la géométrie B, la flamme d'hydrogène-air est beaucoup plus rapide et atteint les premiers obstacles beaucoup plus vite (13% du temps physique simulé) que le cas propane (26% du temps physique simulé). Par conséquent, la flamme traverse les obstacles beaucoup plus rapidement, déclenchant des adaptations du maillage à un rythme plus élevé. Cela conduit également à une augmentation significative de l'impact relatif du coût d'adaptation du maillage.

Les gains en termes de coût de calcul dépendent fortement du type de configuration étudiée. Dans les expériences de Sydney, la flamme occupe rapidement une grande partie de la chambre. Des économies plus importantes seraient observées dans des configurations plus favorables, avec une plus grande disparité d'échelle, où la flamme est plus compacte spatialement et où les vortex sont très localisés dans des régions limitées du domaine, comme ça serait typiquement le cas dans des configurations de très grande échelle faiblement encombrées. Le choix de la résolution cible impacte également le gain en termes de coût de calcul. En allant vers des résolutions plus fines (et donc des facteurs d'épaississement moins importants), on augmente la disparité d'échelle entre la flamme et la géométrie. La flamme occupant alors un volume moins important (car moins épaisse), on s'attend à un ratio volume de chambre sur volume de flamme plus important, et donc des gains plus significatifs avec l'AMR.

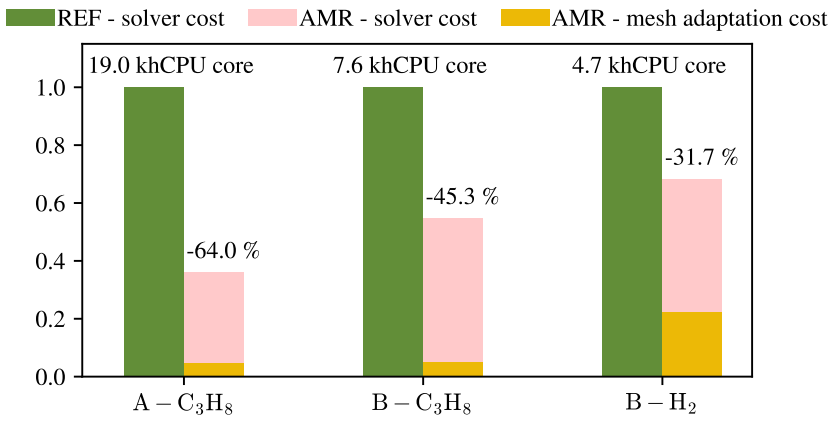


FIGURE 5.10 – coût de calcul normalisé pour le cas A-C_3H_8 (208 adaptations de maillage), le cas B-C_3H_8 (222 adaptations de maillage) et le cas B-H_2 (243 adaptations de maillage).

5.6 Sensibilité aux paramètres de la méthode AMR

Bien que la robustesses la méthode AMR à différents paramètres géométriques et chimiques ait été démontrée dans la section précédente, certains paramètres ont été choisis arbitrairement en entrée, comme le nombre de cellules de masque de métrique unitaire dilatées (Section 4.3.3), ou obtenus grâce à des hypothèses conservatives basées sur des arguments théoriques, comme le paramètre $Re_{\mathrm{v,limit}}$ (Section 4.4.3). Afin de quantifier leurs effets sur le coût et la précision de la simulation, des études paramétriques ont été menées sur la configuration de Masri et sont présentées dans la suite de ce chapitre (Section 5.6.1 et 5.6.2).

5.6.1 Influence du nombre de cellules de dilatation du masque de métrique

Comme expliqué dans la Section 4.3.3, le nombre de cellules par lequel le masque est dilaté permet d'optimiser le coût de calcul, avec un optimum qui résulte d'un compromis entre taille des maillages et fréquence de remaillage : des zones raffinées plus larges entraînent des maillages plus lourds, mais moins d'adaptations de maillage car les physiques d'intérêt peuvent parcourir une plus grande distance avant le déclenchement une nouvelle adaptation. On s'attend cependant à ce que les résultats de simulation restent indépendants de ce choix, puisque la méthode garantie par construction que la physique d'intérêt est discrétisée à tout instant sur une zone de maillage fin.

Ainsi, l'objectif de cette section est de vérifier que les résultats AMR obtenus sont bien indépendants de ce paramètre, et d'identifier la valeur optimale du nombre de cellules de dilatation pour ce cas. Dans cet objectif, une étude paramétrique est réalisée sur le cas B-H_2. Dix simulations ont été réalisées en variant à la fois le nombre de cellules $N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{flame}}$ par lesquelles le masque de flamme est dilaté et son équivalent pour le masque de vortex $N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{vort}}$. Neuf simulations représentent toutes les combinaisons possibles pour $N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{flame}}$ et $N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{vort}}$ allant de 1 à 3. Une dixième simulation avec $N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{flame}}$ et $N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{vort}}$ égaux à 10 est également réalisée pour illustrer le comportement d'un cas de bord moins défavorable. Les évolutions temporelles des signaux de surpression, pour chacune des simulations, sont

présentées dans la Fig. 5.11. Les courbes de surpression pour les différents cas forment une

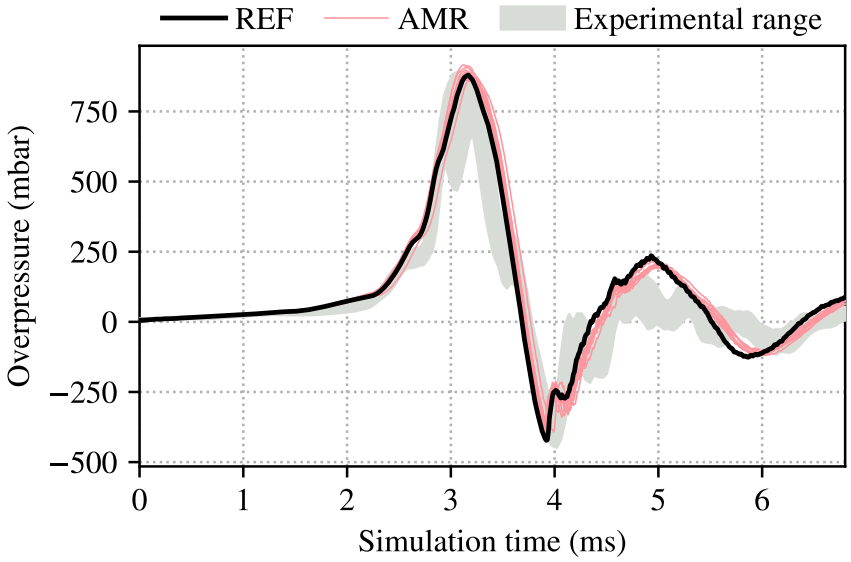


FIGURE 5.11 – Influence de la largeur des dilatations des masques sur le signal de surpression. Les 10 cas AMR sont représentés ici et superposés à l'enveloppe expérimentale pour le cas B-H_2.

enveloppe avec une largeur très étroite. La variabilité observée est la combinaison de la nature stochastique de la physique turbulente simulée ainsi que de l'erreur cumulative sur la prédiction du phénomène transitoire. Elle reste cependant très inférieure à la variabilité expérimentale. Cela valide la robustesse de la construction de la méthode AMR avec une prédiction largement indépendante de ce paramètre. Cela montre également la robustesse de la stratégie de déclenchement de l'adaptation du maillage pour maintenir les grandeurs d'intérêt sur une région fine du maillage. Les coûts totaux des simulations sont comparés dans la Fig. 5.12. Les coûts sont normalisés par rapport au coût total du cas de référence AMR présenté dans la Section 5.4 ($N_c^{\text{flame}} = N_c^{\text{vort}} = 1$). La variation relative est faible, avec un maximum de 13% pour le cas extrême $N_c^{\text{flame}} = N_c^{\text{vort}} = 10$. Le coût de calcul total le plus faible correspond à une dilatation de trois cellules pour le masque de flamme et deux pour le masque de vortex. Aucune tendance claire n'apparaît pour le coût de calcul total, à l'exception du cas extrême qui montre qu'un nombre trop élevé peut conduire à une dégradation significative des performances de la simulation.

La répartition des différents coûts est présentée dans la Fig. 5.13. Aucune tendance claire n'émerge de la Fig. 5.13b pour le coût du solveur. En pratique, le coût du solveur

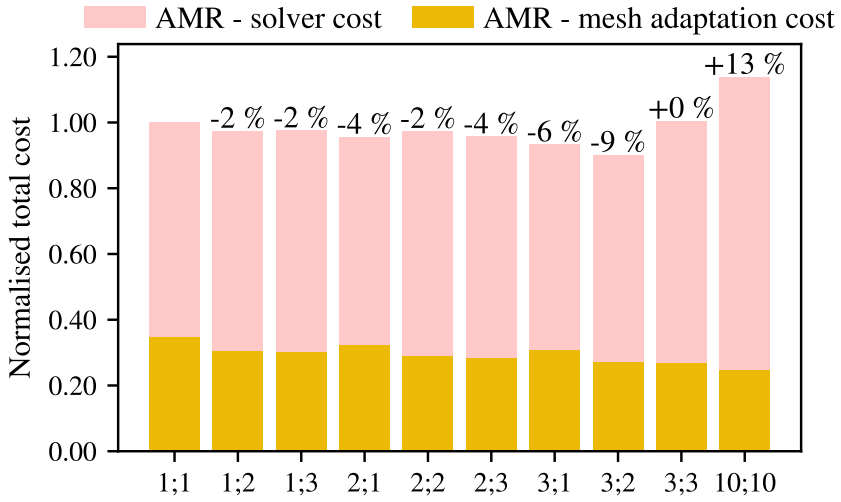
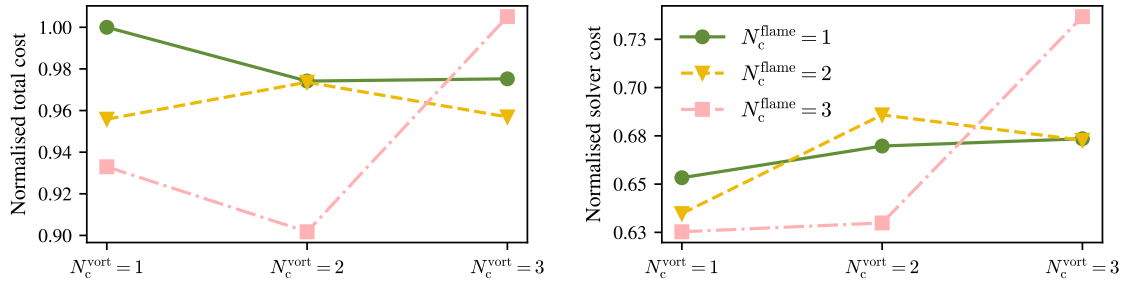


FIGURE 5.12 – Coût total de la simulation (adaptation du maillage et solveur) pour les différents cas de test. Les chiffres sous chaque barre représentent les valeurs du couple $N_c^{\text{flame}}; N_c^{\text{vort}}$. Par exemple, 2 ;1 représente une dilatation de 2 cellules pour le masque de flamme et 1 cellule pour le masque de vortex. Les coûts sont normalisés par le coût total du cas avec une dilation de 1 cellule pour les masques de flamme et de vortex.

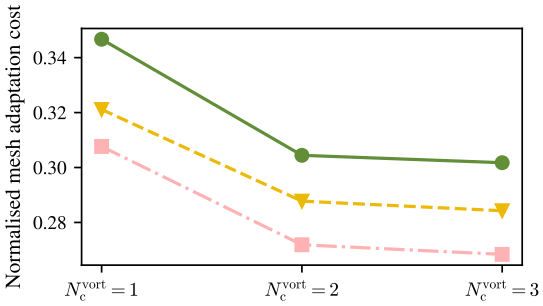
dépend directement de la combinaison taille du maillage et de pas de temps de l'itération temporelle, ce dernier étant étroitement lié à la taille minimale de cellule via la condition de stabilité CFL ou Fourier. S'il est clair qu'augmenter N_c^{flame} ou N_c^{vort} augmente la taille du maillage, l'évolution du pas de temps minimal n'est pas prévisible précisément, car la taille minimale de la cellule du maillage non structuré n'est pas strictement imposée lors du processus d'adaptation. Contrairement aux coûts totaux et de solveur, la variation du coût de l'adaptation du maillage, présentée dans la Fig. 5.13c, suit une tendance claire. À mesure que N_c^{flame} ou N_c^{vort} augmente, le coût de l'adaptation du maillage diminue. Ce résultat est la conséquence directe d'une diminution du nombre d'adaptations de maillage (voir la Fig. 5.13d) : plus le champ de masque est dilaté, moins les adaptations de maillage sont fréquentes.

En résumé, cette étude paramétrique montre que le choix des paramètres N_c^{flame} et N_c^{vort} n'influence pas la précision des résultats et ne compromet donc pas la généricité de la méthode. L'influence sur le temps de calcul est également très limitée, à condition d'éviter les valeurs extrêmes. Le choix initial $N_c^{\text{flame}} = N_c^{\text{vort}} = 1$ semble raisonnable, et peut servir de valeur de départ à optimiser si un grand nombre de cas doit être simulé dans une configuration similaire.

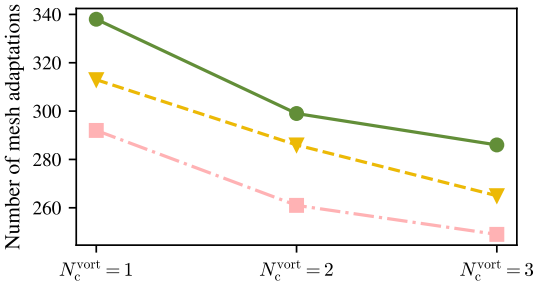


(a) Coût total.

(b) Coût du solveur



(c) Coût de l'adaptation du maillage.



(d) Nombre d'adaptations du maillage

FIGURE 5.13 – Influence du paramètre de dilatation des masques de flamme et de tourbillon sur les coûts de calculs. Le cas extrême où $N_c^{flame} = N_c^{vort} = 10$ n'est pas montré. Les coûts sont normalisés par le coût total du cas avec une dilation de 1 cellule pour les masques de flamme et de vortex.

5.6.2 Étude de l'impact du paramètre Reynolds vortex limite sur le coût de calcul et la précision

Le choix de la valeur de $Re_{v,limit}$ est tiré d'estimation de la littérature, avec l'objectif d'avoir une approche conservative. Le critère est construit pour l'interaction entre un front de flamme et un vortex isolé, pour lequel la valeur choisie permet de retrouver avec précision les conclusions obtenues expérimentalement pour des cas canoniques (Section 4.4.4). Sa validité sur un cas représentatif de déflagration n'est pas garantie : l'écoulement turbulent qui en résulte comporte une cascade d'échelles tourbillonnaires, qui s'éloigne du cas canonique du vortex qui ne comporte qu'une seule échelle de temps et d'espace. Pour quantifier l'impact de ce paramètre, une étude paramétrique est réalisée dans cette section sur la configuration Masri B – H_2. Différentes valeurs de $Re_{v,limit}$ sont utilisées ($\{1, 10, 100\}$), et leur impact sur l'accélération de la flamme est comparé. Des instantanés de la simulation sont extraits à trois instants représentatifs pour une comparaison qualitative des résultats. La Fig. 5.14 montre l'instant où la flamme approche

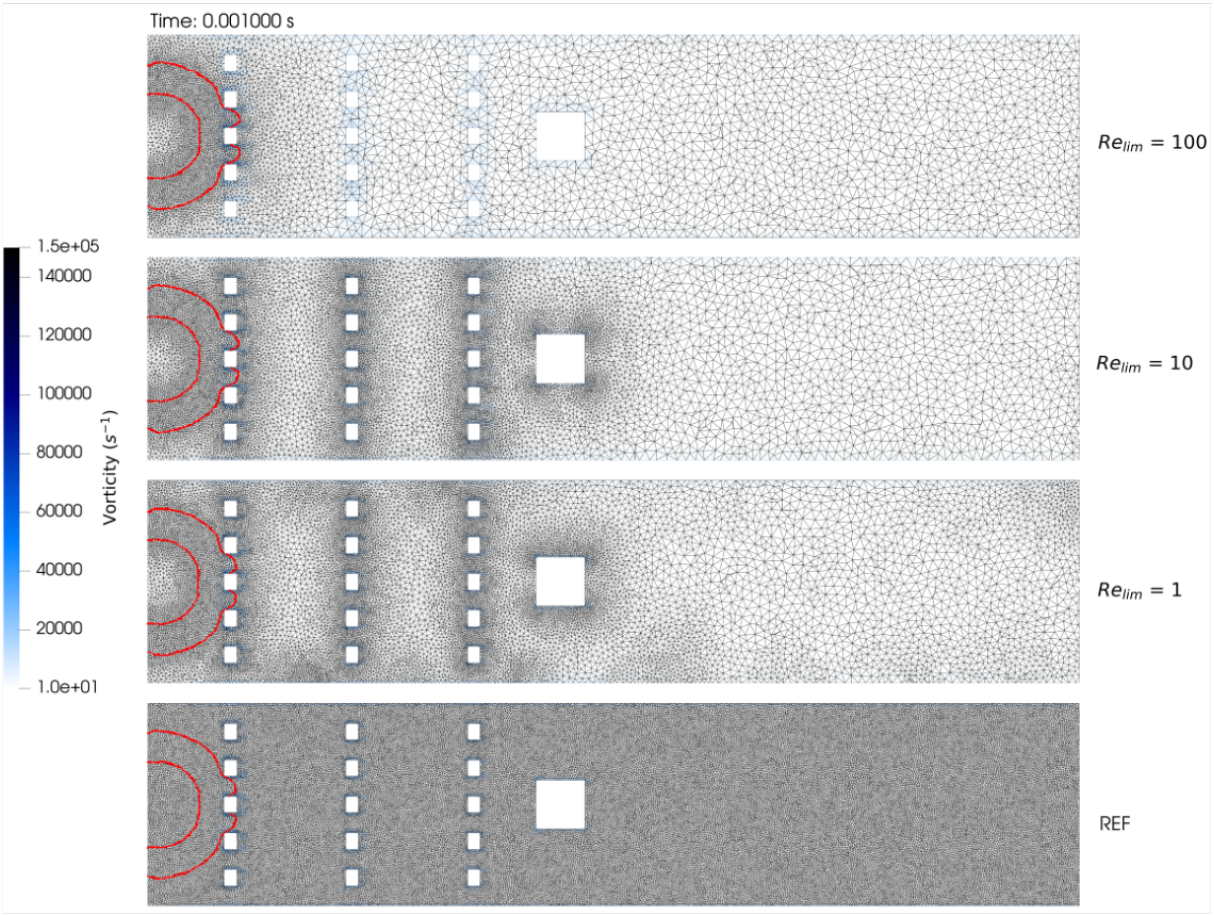


FIGURE 5.14 – Comparaison des champs de vorticité et des maillages à $t = 1$ ms pour les cas avec $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{1, 10, 100\}$ et la simulation de référence sur un maillage statique. Les iso-contours rouges représentent la flamme.

de la première rangée d'obstacles (Fig. 5.14, t = 1 ms). Pour le cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 100$, aucune structure tourbillonnaire n'est détectée à ce moment, conduisant potentiellement à une mauvaise estimation de la génération de surface de flamme turbulente. En revanche, pour les cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 1, 10$, des structures tourbillonnaires sont détectées et les maillages résultants sont très similaires.

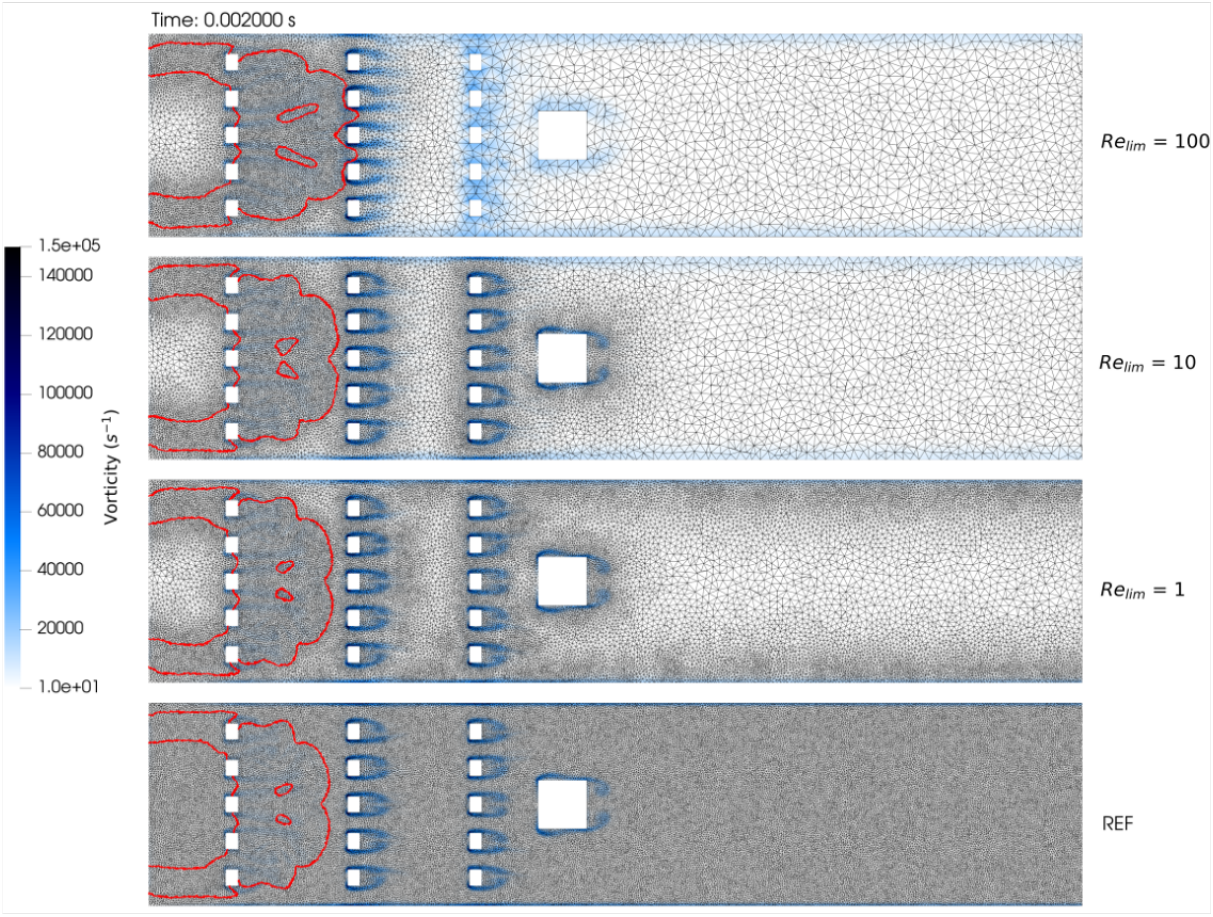


FIGURE 5.15 – Comparaison des champs de vorticité et des maillages à $t = 2$ ms pour les cas avec $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{1, 10, 100\}$ et la simulation de référence sur un maillage statique. Les contours rouges représentent la flamme.

Quand la flamme atteint la deuxième rangée d'obstacles (Fig. 5.15), les structures turbulentes détectées pour le cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 100$ sont moins nombreuses. Le déficit de structures tourbillonnaires peut affecter la prédiction de l'accélération de flamme, et donc la précision des résultats. Pour le cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 1$, de nombreux vortex proches des parois sont détectés, ce qui augmente drastiquement le coût de calcul, sans avoir un impact significatif sur l'accélération de flamme. Cette détection est notamment due à la très faible valeur du seuil de détection de vortex d'intérêt et à la création de zones tourbillonnaires

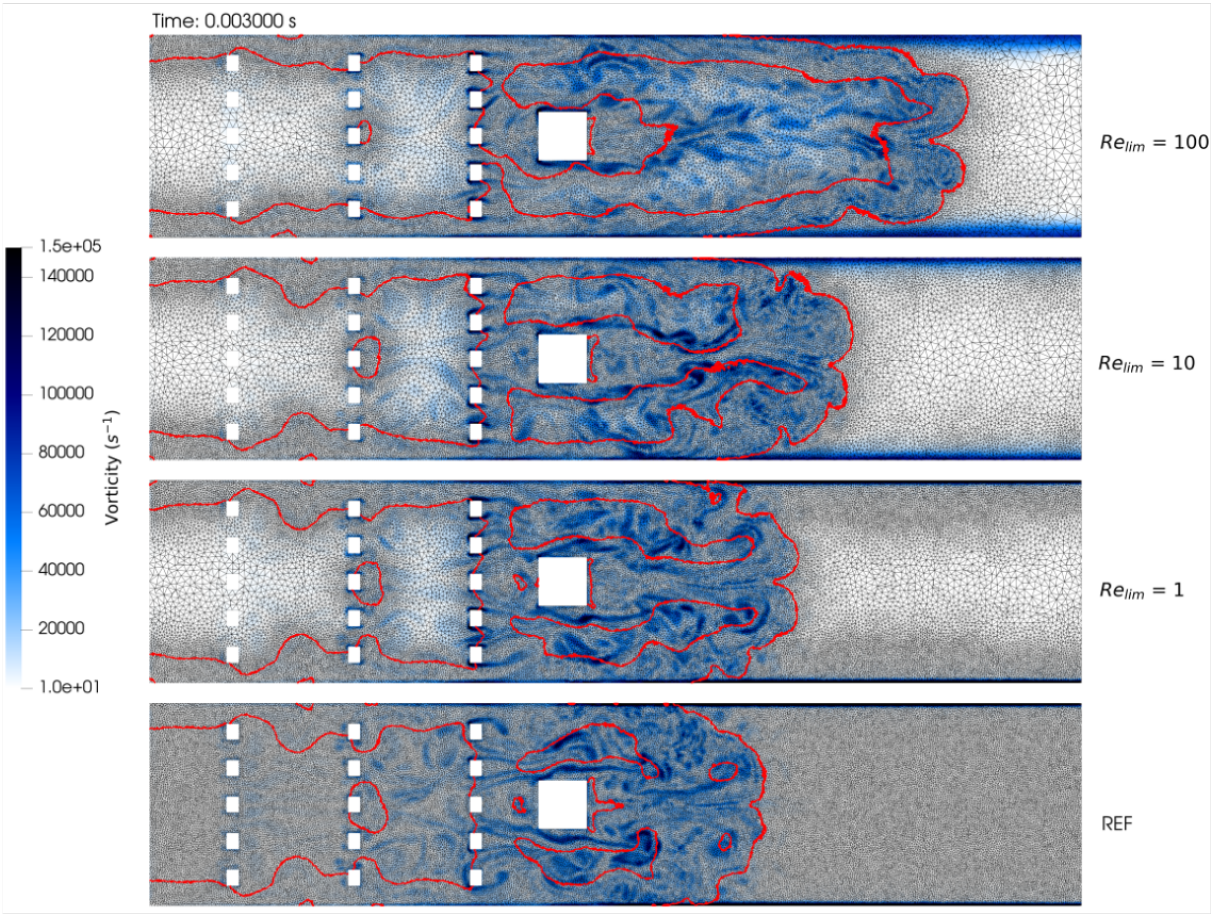


FIGURE 5.16 – Comparaison des champs de vorticité et des maillages à $t = 3$ ms pour les cas avec $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{1, 10, 100\}$ et la simulation de référence sur un maillage statique. Les contours rouges représentent la flamme.

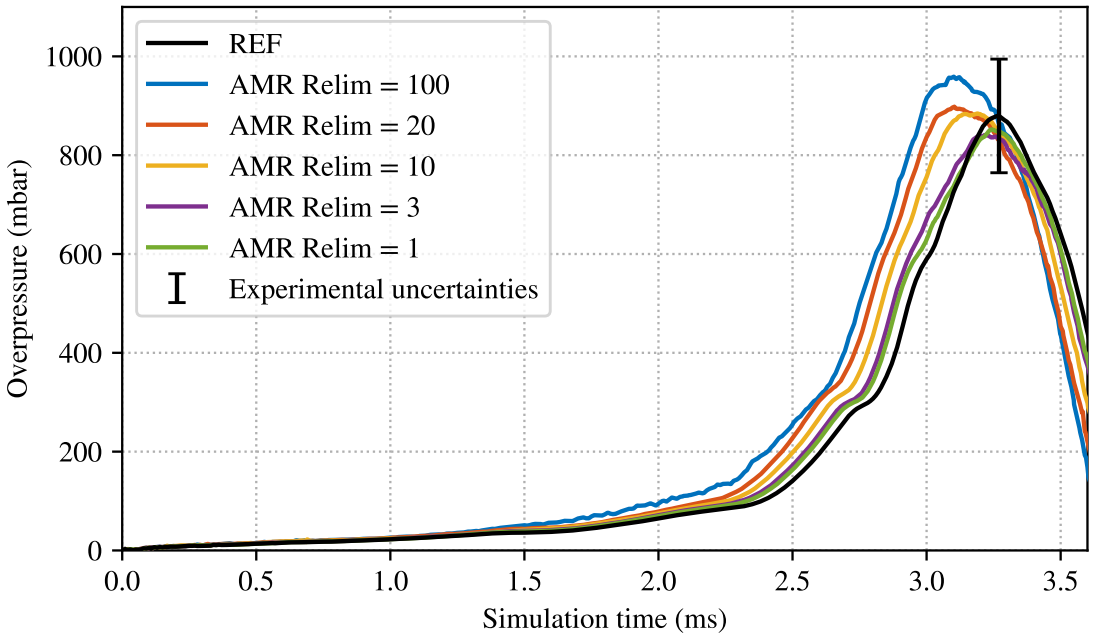


FIGURE 5.17 – Comparaison des signaux de surpression pour $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{1, 3, 10, 20, 100\}$, avec le cas de référence. L'enveloppe des incertitudes expérimentales est également tracée.

au niveau de la couche limite turbulente. Au moment où la flamme quitte le domaine (Fig. 5.16), le cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 100$ conduit à une flamme beaucoup plus rapide.

La surpression dans la chambre est tracée pour toutes les valeurs de $Re_{\mathrm{v,limit}}$ dans la Fig. 5.17 et comparée à la référence. La surpression maximale augmente avec $Re_{\mathrm{v,limit}}$ en raison de l'augmentation de la vitesse de flamme causée par la moins bonne résolution des structures tourbillonnaires énergétiques en aval des obstacles. Les résultats commencent à s'écarter de la précision pour $Re_{\mathrm{v,limit}} = 10$, mais restent dans l'enveloppe des incertitudes expérimentales, ce qui prouve une bonne robustesse de la méthode tant que les paramètres donnés en entrée restes proches des hypothèses conservatrices de la méthode.

Les coûts de calcul, présentés en Fig. 5.18, montrent une diminution du coût de calcul total entre 25% et 50%. par rapport au cas REF, en fonction de la valeur de $Re_{\mathrm{v,limit}}$.

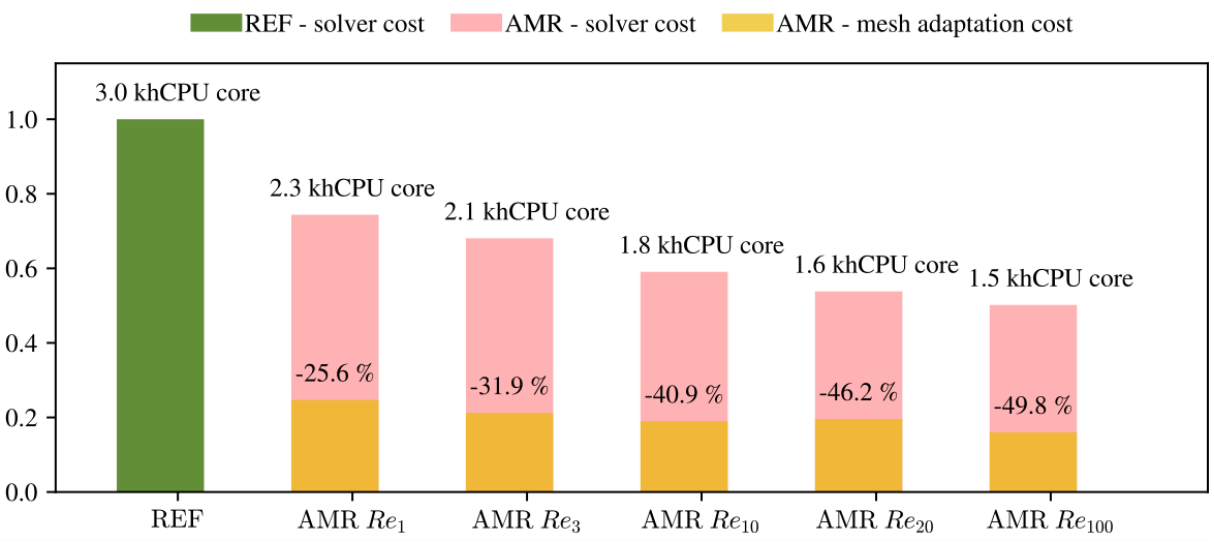


FIGURE 5.18 – Comparaison des coûts de calculs totaux pour $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{1, 3, 10, 20, 100\}$, avec le cas de référence. Pour les cas AMR, le coût de calcul total est décomposé en coût du solveur LES et coût des adaptations de maillage.

L'adaptation du maillage représente environ 30% du coût total dans chaque cas. L'augmentation de $Re_{\mathrm{v,limit}}$ se traduit par une diminution du coût de calcul total, car moins de structures tourbillonnaires (seulement les plus fortes) sont détectées, ce qui conduit à des maillages plus légers et donc des coûts de simulation réduits. Bien que les gains en termes de coût de calcul soient significatifs pour des valeurs hautes de ce paramètre, cela affecte également la précision de la simulation, qui s'en trouve dégradée. Il convient donc d'optimiser ce paramètre avec prudence. Dans ce cas d'étude, la valeur $Re_{\mathrm{v,limit}} = 10$ semble être une valeur satisfaisante, car elle offre un bon compromis entre les gains, en termes de coût de calcul, et la précision. Cependant, cette valeur peut être ajustée en fonction des ressources disponibles et de la précision recherchée.

5.7 Conclusions intermédiaires

Une série de simulations d'explosions dans une chambre obstruée et semi-confinée a été réalisée, avec des variations de géométrie et de propriétés chimiques du carburant. La méthode TFP-AMR a été testée et validée sur différentes configurations, permettant de

retrouver les résultats expérimentaux tout en réduisant les coûts de calcul. Les avantages de la méthode peuvent être résumés en plusieurs points :

- **Robustesse de la méthode AMR :** La méthode TFP-AMR montre une robustesse face aux variations de la géométrie de la chambre et des propriétés chimiques du carburant. Aucun ajustement de paramètres n'était nécessaire.
- **Influence de la dilatation :** L'impact du nombre de cellules dilatées dans le masque de métrique sur la précision et les coûts est jugé non significatif, confirmant que la dilatation n'affecte pas notablement les performances et la précision du calcul.
- **Influence du nombre de Reynolds limite :** L'étude du paramètre $Re_{\mathrm{v,limit}}$ montre que ce dernier a une influence notable sur la précision des résultats et les coûts de calcul, entraînant des variations importantes, mais que la valeur issue de la littérature offre un bon compromis.
- **Gains en termes de coûts de calcul :** La méthode AMR permet de réduire les coûts de calcul de 32% à 64% par rapport aux maillages statiques homogènes, bien que les gains soient inférieurs à ceux obtenus précédemment, en raison du coût de l'algorithme AMR et de la configuration spécifique de la simulation.
- **Perspectives de gains en termes de coûts de calcul :** Les facteurs d'épaississement utilisés ici sont relativement grands et tendent à épaissir la flamme, l'amenant donc à occuper une plus grande partie du domaine. Or, plus la flamme occupe une partie importante du domaine, moins les gains en termes de coûts de calcul sont importants. En ciblant des facteurs d'épaississement plus faible (*i.e* des résolutions plus fines), les gains obtenus seraient plus importants par rapport à des maillages homogènes équivalents. De plus, pour réaliser des simulations précises, le maillage doit être assez fin pour rester dans les plages de validité des modèles. Ainsi, pour des configurations d'échelle industrielles, l'utilisation de l'AMR pour des simulations LES pourrait offrir des gains significativement plus grands.

Chapitre 6

Application de la méthode AMR sur un cas de déflagration rapide à échelle intermédiaire

Afin de valider la méthode TFP-AMR, développée dans le Chapitre 4, sur des configurations de géométries et d'échelles différentes, cette dernière a été appliquée dans le canal d'explosion GraVent de l'Université Technique de Munich [15]. Cette expérience vise à représenter un scénario de fuite d'hydrogène dans un environnement confiné avec un allumage retardé. Contrairement à la configuration de la chambre de Masri (Chapitre 5), ce canal est entièrement clos et son volume est 150 fois plus grand. De plus, la flamme atteint des niveaux de vitesse deux fois plus importants ($\approx$ 1000 m/s), générant ainsi des niveaux de surpression beaucoup plus élevés. Enfin, la configuration comporte une forte disparité d'échelle, le front de flamme est très localisé dans le domaine au cours de sa propagation, laissant ainsi présager des gains de coût de calcul plus grands en utilisant l'AMR par rapport au cas Masri à petite échelle du chapitre précédent.

6.1 Description de la configuration

La configuration est un canal fermé avec un rapport d'aspect élevé comportant des obstacles identiques et uniformément espacés. Plusieurs configurations géométriques sont disponibles. La chambre BR30hS300 est étudiée ici et présentée en Fig. 6.1. Ses dimensions sont L x l x H = 5400 x 300 x 60 mm, ce qui correspond à un volume total de 97.2 L. Elle comprend un total de sept obstacles rectangulaires, avec un rapport de blocage de 30%. Le canal est initialement rempli d'un mélange homogène d'hydrogène-air à température et pression ambiantes. Le mélange est enflammé à l'extrémité gauche du canal. Selon la condition opératoire choisie, plusieurs scénarios d'accélération de la flamme peuvent être observés. Pour les mélanges les plus réactifs, une DDT peut se produire comme le montre la Fig. 6.2, où la vitesse de flamme au niveau du dernier obstacle est tracée en fonction

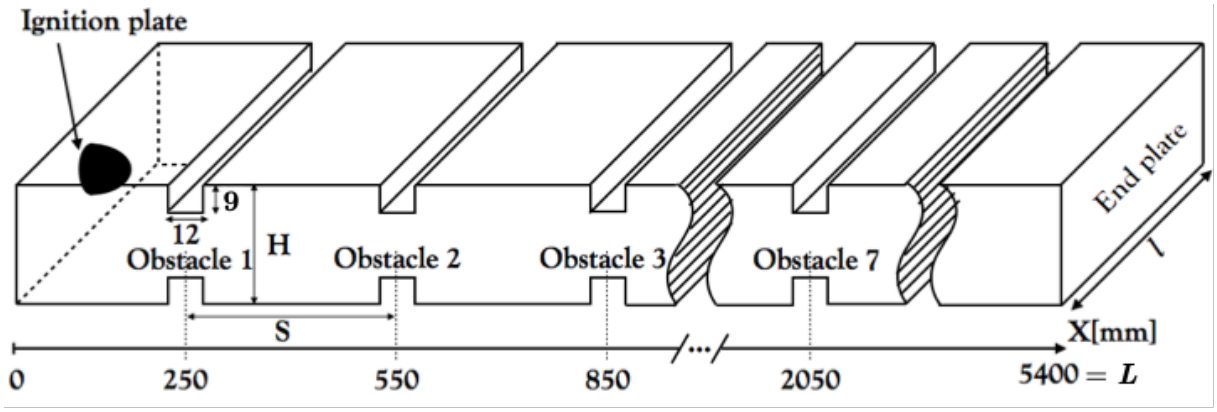


FIGURE 6.1 – Schéma du canal GraVent BR30hS300. Adapté de [42].

de la concentration volumique d'hydrogène.

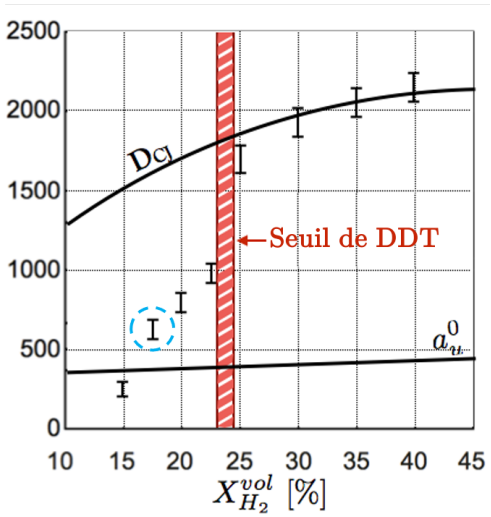


FIGURE 6.2 – Évolution expérimentale de la vitesse absolue du front de flamme au passage du dernier obstacle en fonction de la concentration volumique initiale en hydrogène du mélange. D_{CJ} représente la vitesse limite de Chapman-Jouguet [30] d'une détonation établie. La concentration retenue pour le cas simulée est entourée et vaut $X^{\text{vol}}_{H_2} = 17.5\%$ Adapté de [14]

La configuration expérimentale complète de l'Université technique de Munich est illustrée dans la Fig. 6.3. Une grande base de données est disponible [15], comprenant des techniques de mesure conventionnelles (photodiodes et capteurs de pression) ainsi que des techniques de visualisation optique (shadowgraphie et OH-PLIF à haute vitesse).

Comme rappelé en Figure. 6.2, des données sont disponibles pour une grande plage de concentrations initiales. Pour cette étude, le cas retenu correspond à une concentration initiale en volume $X^{\text{vol}}_{H_2} = 17.5\%$, ce qui correspond à un cas déflagration rapide (vitesse

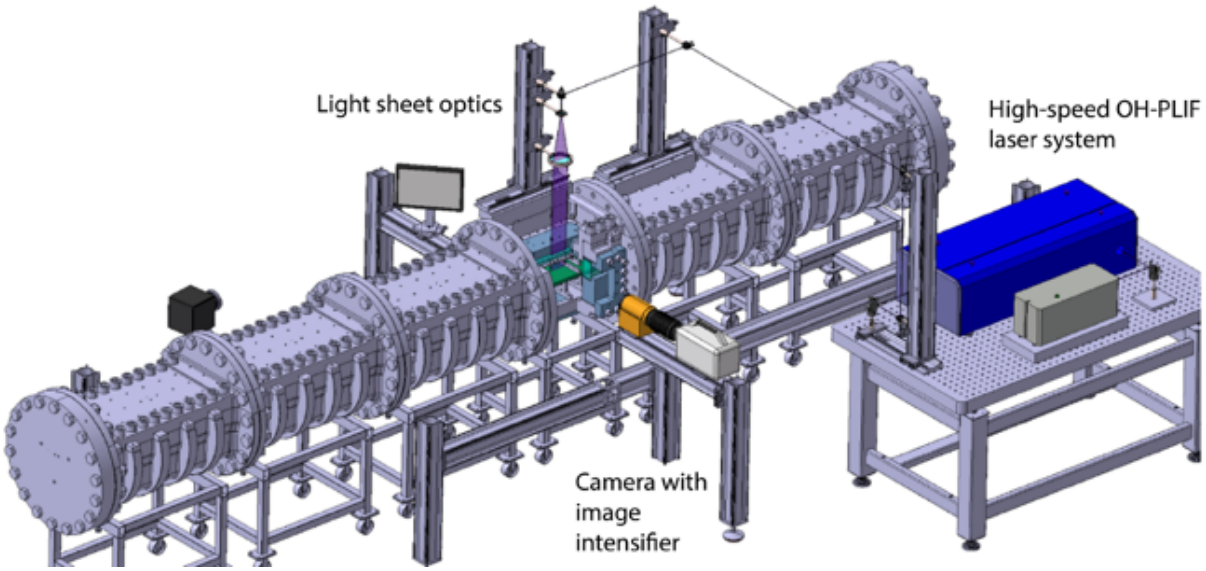


FIGURE 6.3 – Configuration expérimentale complète de GraVent. Adapté de [15]

au niveau du dernier obstacle de l'ordre de 600 m/s) sans transition à la détonation. Les principales propriétés du mélange hydrogène-air correspondant sont données en Table 6.1.

TABLE 6.1 – Caractéristiques principales de la flamme et des conditions de fonctionnement : carburant, richesse ϕ, vitesse de flamme laminaire s_L^0, épaisseur de flamme laminaire δ_L^0, température des gaz frais T_u, température des gaz brûlés T_b et pression initiale p_0.

Carburant	s_L^0 (m/s)	δ_L^0 (mm)	ϕ	T_u (K)	T_b (K)	p_0 (Pa)
H_2	0.61	0.195	0.52	300	1684	101325

Une démarche similaire au chapitre précédent est adoptée pour évaluer la précision et les gains obtenus avec la méthode AMR. Une simulation de référence est réalisée sur un maillage statique, déjà utilisé par Dounia [42] dans une précédente étude, composé de 120M d'éléments (appelé "120M" par la suite) et présenté en Fig. 6.4. Sur ce maillage, une résolution plus fine est appliquée au niveau des obstacles pour correctement capturer les effets de la contraction de l'écoulement sur la dynamique de la flamme. Cette approche pragmatique basée sur l'expertise utilisateur permet de conserver un maillage de taille raisonnable, tout en permettant de reproduire correctement le phénomène principal d'accélération de flamme dans ce type de configuration [42, 70]. Une approche plus directe qui consisterait à mailler uniformément l'intégralité de la chambre à la résolution la plus fine mènerait à un maillage plus conséquent de plusieurs centaines de millions d'éléments.

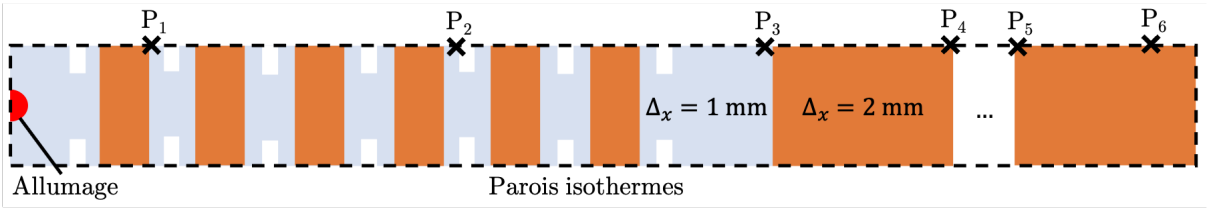


FIGURE 6.4 – Schéma des tailles cibles du maillage statique utilisé. Le maillage a une résolution de 1 mm avant le premier obstacle, puis au niveau de chaque nouvel obstacle, et une résolution de 2 mm entre deux obstacles consécutifs. Les six capteurs de pression utilisés pour mesurer la surpression sont notés $P_{\{1-6\}}$ et sont respectivement placés en x = {0.4, 1.4, 2.3, 3.2, 4.1, 5.0} m.

Le mélange hydrogène-air pauvre a un nombre de Lewis effectif inférieur à 1, ce qui complexifie sa modélisation. En effet, comme rappelé dans la Section 3.2.3, dans des cas où le nombre de Lewis du carburant $Le_c < 1$ comme c'est le cas pour l'hydrogène, on observe des effets thermodiffusifs qui augmentent la réactivité de la flamme et sa surface, comme expliqué en Section 2.2.4. Ces effets ne peuvent pas être résolus sur un maillage LES et ont été observés expérimentalement pour certaines conditions de mélanges pauvres dans le canal GraVent [74], comme illustré en Fig. 6.5. On observe la formation de structures liées au mécanisme d'instabilité thermo-diffusive qui augmentent le plissement de la flamme et donc la consommation totale de combustible. De plus, la création de ces structures thermodiffusives augmentent localement la réactivité du mélange par effets d'étirement. Cet effet de réactivité contribue également à augmenter la consommation totale. Ces deux effets doivent donc être modélisés. Le modèle présenté en Section 2.2.4 [10] est retenu pour les modéliser. À partir de l'équation Eq. (3.34), on obtient un facteur multiplicatif $E_{lam} = 2.77$, qui est très légèrement plus élevé que celui observé expérimentalement sur cette configuration, à l'aide de visualisations OH-PLIF de la flamme visant à estimer la part de surface de flamme due aux instabilités thermodiffusives. ($E_{lam} = 2.38$) [74]. De façon similaire au cas étudié dans le Chapitre 5, une correction des nombres de Lewis réalistes (Le_{Re}), nommée Le_{Adapt}, est également nécessaire pour prendre en compte les effets du facteur d'épaississement de la flamme sur sa réponse à l'étirement résolu, comme décrit en Section 3.2.3. Les vitesses de flamme laminaire et les températures des gaz brulés obtenus par le schéma 1-étape utilisé ici correspondent à celles obtenues par un schéma plus complexe, comme présenté en Table 6.2. De plus, la méthode de tabulation présentée

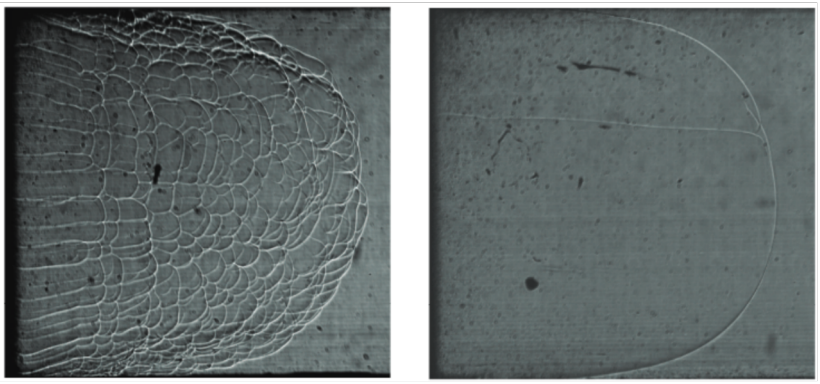


FIGURE 6.5 – Visualisation de la flamme par shadowgraphie, pour un mélange d'hydrogène-air très pauvre (gauche) et pour un mélange stœchiométrique (droite). Issu de [74].

TABLE 6.2 – Comparaison des caractéristiques principales de la flamme entre le schéma simplifié 1-étape et le schéma de mécanisme réduit San Diego [21] utilisé en Chapter 5.

$s^0_{\mathrm{L},1-\mathrm{etape}}$ (m/s)	$s^0_{\mathrm{L,SD}}$ (m/s)	$\delta^0_{\mathrm{L},1-\mathrm{etape}}$ (mm)	$\delta^0_{\mathrm{L,SD}}$ (mm)	$T_{\mathrm{b},1-\mathrm{etape}}$ (K)	$T_{\mathrm{b,SD}}$ (K)
0.61	0.61	0.1964	0.364	1688	1675

en Section 3.2.5 et utilisée ici sur le schéma chimique 1-étape permet de retrouver une réponse similaire à l'augmentation de la vitesse de flamme laminaire du schéma de San Diego lors d'une montée en pression (considérée isentropique) dans le domaine comme montré en Fig. 6.6, ce qui montre le bon comportement de la modélisation chimique.

6.2 Résultats de référence et validation AMR

L'objectif de la comparaison entre le cas AMR et le cas référence est de vérifier la capacité de la méthode AMR de reproduire correctement les différents mécanismes d'accélérations, permettant de retrouver une évolution précise de la vitesse de la flamme et de la surpression générée par rapport au cas de référence et aux données expérimentales disponibles. Dans un premier temps, les différentes modélisations possibles sont évaluées sur la phase de propagation laminaire. Trois approches de modélisations ont été testées et sont présentées en Table 6.3 : Les vitesses absolues du front de flamme sont comparées pour chaque modélisation en Fig. 6.7. La vitesse absolue du front de flamme, s_{tip} est largement surévaluée lorsque les effets de l'épaississement de la flamme sur sa réponse à l'étirement

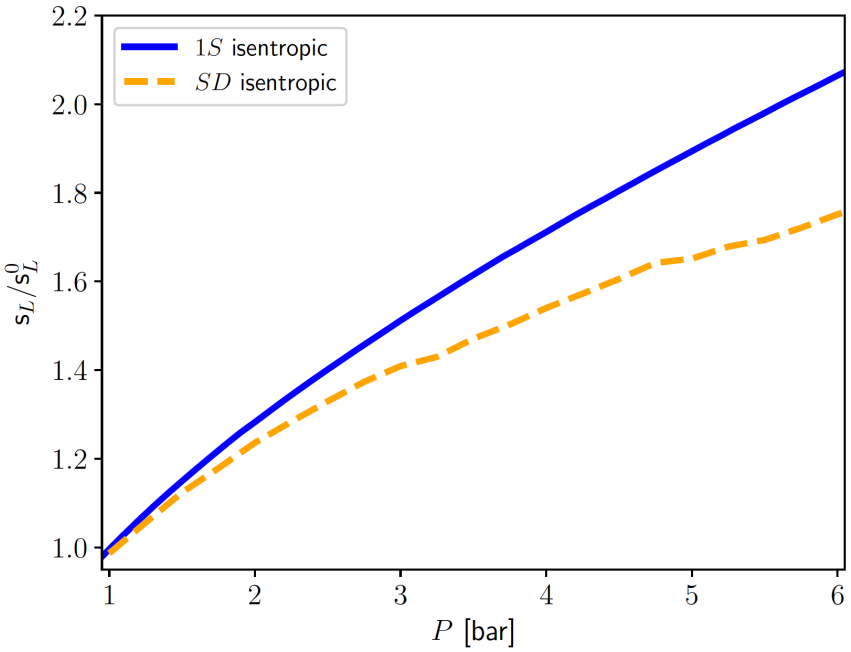


FIGURE 6.6 – Réponse de la vitesse de flamme laminaire normalisée à la montée en pression dans le domaine (de 1 à 6 bars), pour le schéma cinétique 1-étape et le schéma simplifié de San Diego [21].

TABLE 6.3 – Résumé des approches de modélisations évaluées dans la phase de propagation laminaire de la flamme

Modélisation des effets thermodiffusifs uniquement	Modélisation des effets de réponse à l'étirement résolu uniquement	Modélisations des deux effets
$Le_{Re} + E_{lam}$	Le_{Adapt}	$Le_{Adapt} + E_{lam}$

résolu sont surestimés, comme expliqué en Section 3.2.3 (cas $Le_{Re} + E_{lam}$). Au contraire, lorsque les effets des instabilités thermodiffusives ne sont pas modélisés, la vitesse de flamme est sous-évaluée (Le_{Adapt}). Dans le cas où la réponse à l'étirement résolu est correctement reproduite et l'effet thermo-diffusif correctement modélisé ($Le_{Adapt} + E_{lam}$), la vitesse absolue du front de flamme atteint des niveaux proches de ceux observés expérimentalement au niveau du premier obstacle, ce qui est un indicateur de la pertinence de l'approche, bien qu'elle soit basée sur des hypothèses simplificatrices. D'autres travaux de thèse sont en cours au CERFACS, pour tenter d'affiner les prédictions pour ces conditions de mélange.

Suite à la validation de la reproduction de la physique de flamme durant la phase laminaire, les résultats de la simulation complète sur maillage statique et avec AMR sont

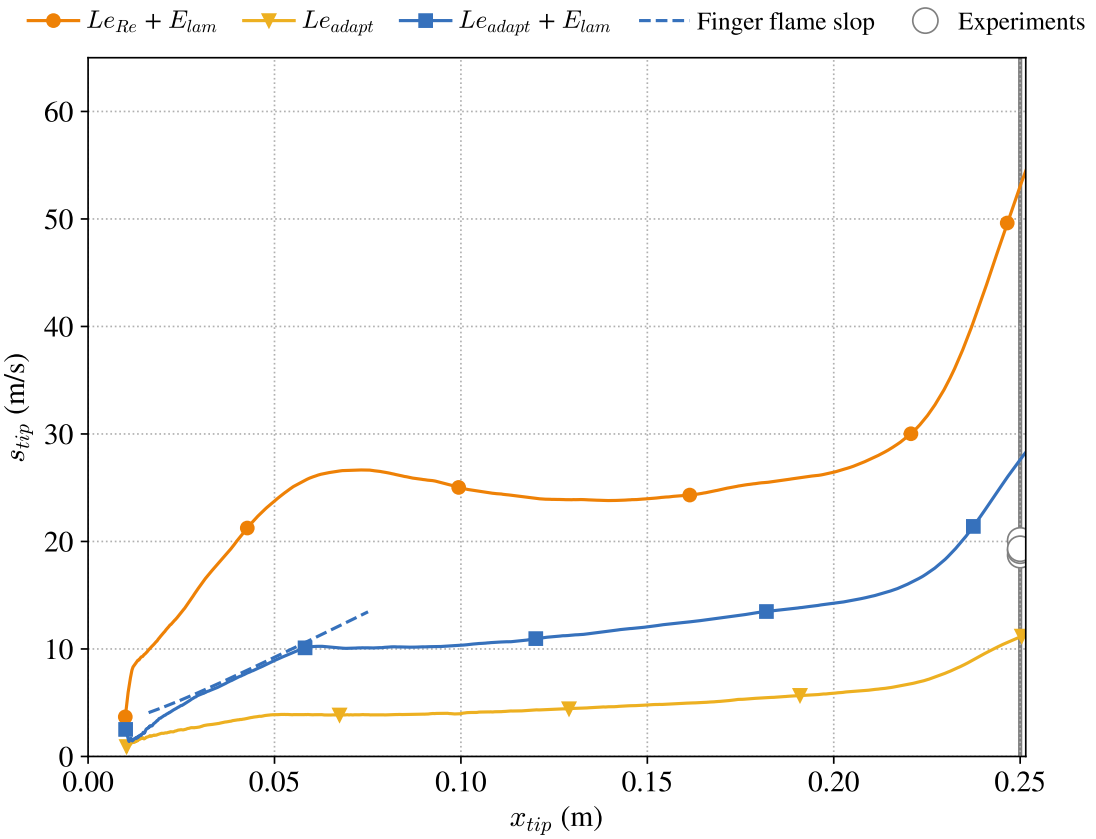


FIGURE 6.7 – Évolution de la vitesse absolue du front de flamme s_{tip} en fonction de sa position x_{tip}. Comparaison entre les trois approches de modélisation décrites en Table 6.3 et plusieurs résultats expérimentaux. Le premier obstacle est représenté par une barre verticale en $x = 250\ mm$. La pente théorique [20] de la première phase d'accélération "finger flame" (Section 2.4) est tracée pour la modélisation retenue.

présentés en Fig. 6.8 et 6.9.

On retrouve un très bon accord entre le cas de référence et l'AMR. En effet, le signal de vitesse absolue du front de flamme est presque superposé dans les deux cas (Fig. 6.8). Cela montre que l'AMR parvient à reproduire la physique de l'écoulement et de la flamme. On observe cependant des différences entre les signaux expérimentaux et les résultats des simulations. Des fluctuations de vitesse apparaissent dans les simulations alors que le signal expérimental est beaucoup plus régulier, avec une augmentation progressive de la vitesse absolue du front de flamme. Cela est notamment dû à la faible discrétisation spatiale des photodiodes permettant de mesurer le temps d'arriver de la flamme et ainsi de mesurer sa vitesse. Les signaux numériques sont eux obtenus à chaque itération et à chaque point du maillage, et correspondent donc à un signal beaucoup mieux discrétisé.

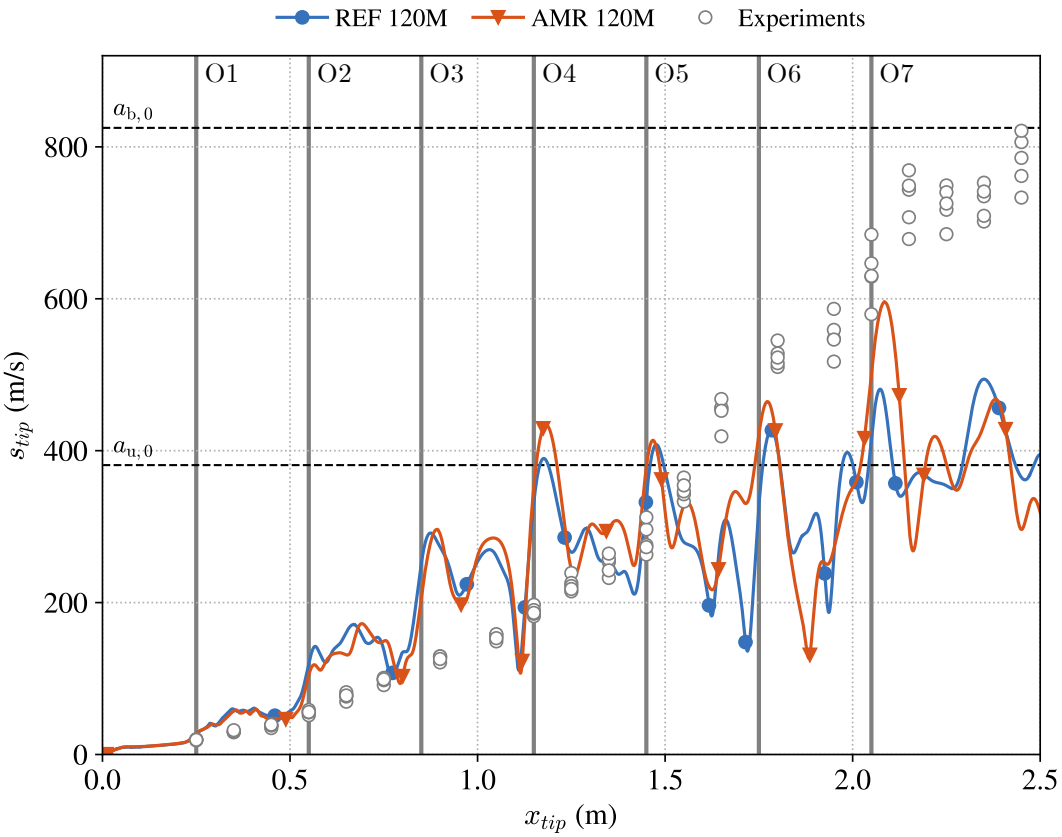


FIGURE 6.8 – Évolution de la vitesse absolue du front de flamme s_{tip} par rapport à sa position x_{tip} et comparaison avec les mesures expérimentales.

Les signaux de surpressions donnent, eux aussi, des résultats très similaires entre le cas de référence et le cas AMR, mais parviennent également à retrouver les résultats obtenus expérimentalement (Fig. 6.9). Pour interpréter les évolutions de la vitesse absolue du front de flamme et de la surpression, il faut se concentrer sur la structure de la flamme à différents instants (Fig. 6.10).

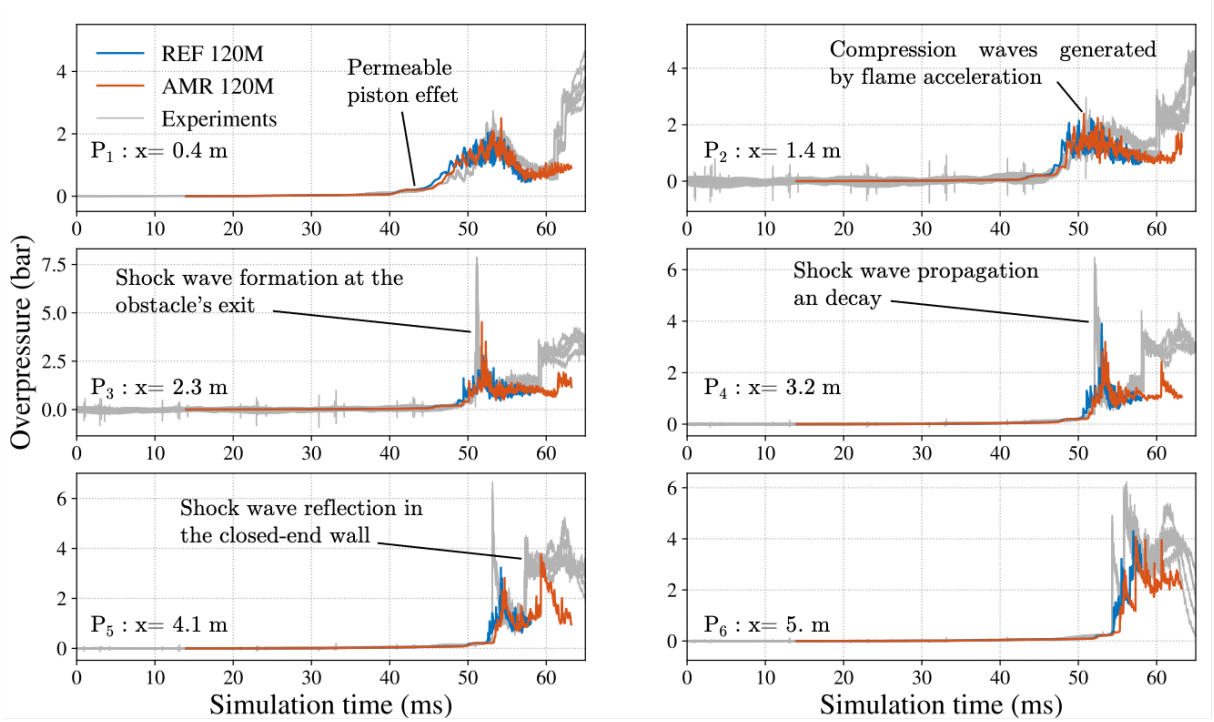
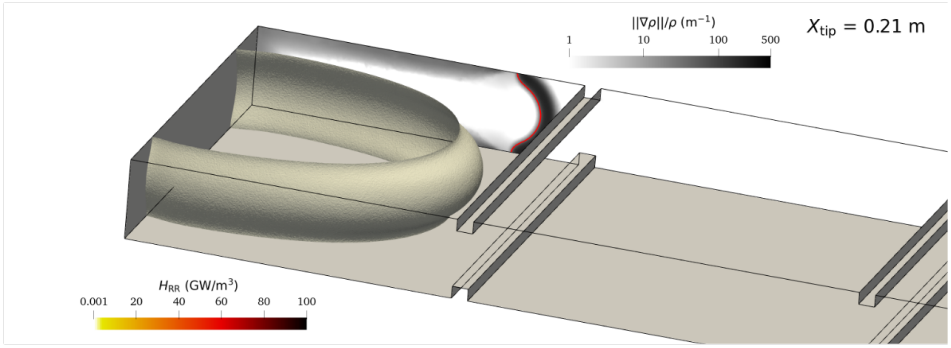
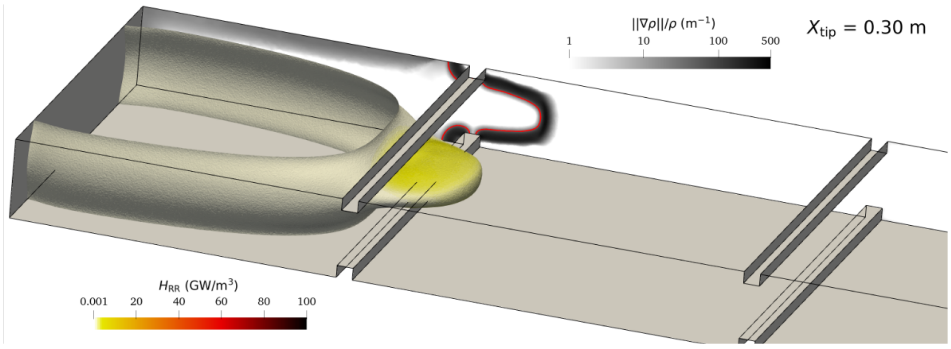


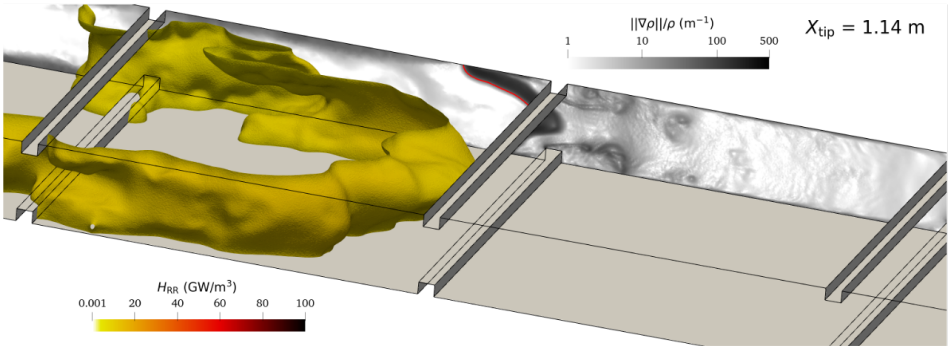
FIGURE 6.9 – Évolution de la surpression au niveau des capteurs de pressions (P_{1-6}) et comparaison avec les mesures expérimentales. Les mécanismes responsables des différentes augmentations de pression sont annotés.



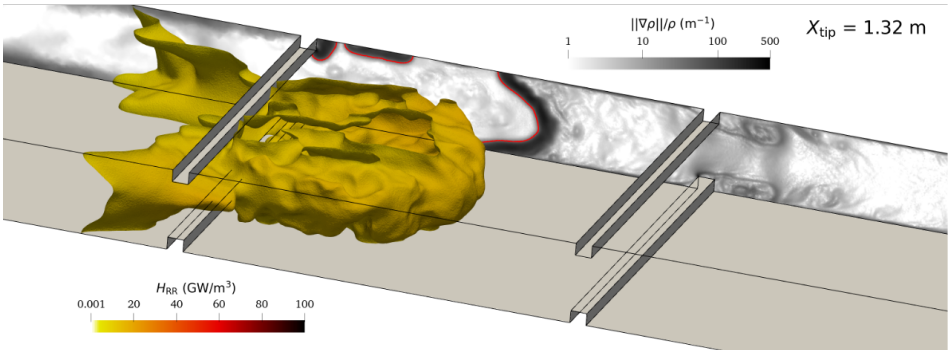
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 6.10 – Instantanés d'une iso-surface de flamme colorée par le taux de dégagement de chaleur à différentes positions : (a) lorsque la flamme arrive au niveau du premier obstacle, (b) lorsque la flamme subit une première contraction et s'étire, (c) lorsqu'elle arrive au niveau du quatrième obstacle (d) lorsqu'elle interagit avec la turbulence en aval du sixième obstacle. Le Schlieren numérique correspondant au plan médian est reporté sur la paroi du fond.

Avant le premier obstacle, la flamme est laminaire et principalement accélérée par l'effet "finger shape" (Fig. 6.10a) détaillé en Section 2.4. La flamme accélère jusqu'à ce qu'elle touche la paroi. Elle agit alors comme un piston perméable et augmente légèrement la suppression dans le canal. Lorsqu'elle arrive au niveau du premier obstacle (Fig. 6.10b), sa vitesse absolue augmente légèrement. Cela correspond au moment où la flamme subit la contraction de l'écoulement à travers la restriction de section, qui vient l'aspirer et l'étirer longitudinalement, mécanisme précédemment décrit en Section 2.4. Ce type d'accélération génère des ondes de compressions lors de l'expansion de la flamme. Cette dernière interagit ensuite avec les zones de recirculation et de sillage et se plisse légèrement et conserve une vitesse quasi constante jusqu'au niveau du deuxième obstacle. À ce moment-là, une deuxième contraction de l'écoulement l'accélère de nouveau, mais la vitesse d'arrivée au niveau du second obstacle est plus grande qu'au niveau du premier. Ainsi, l'accélération est plus forte et la flamme atteint de très hauts niveaux de vitesses ($>$ 100 m/s), comme l'illustre la Fig. 6.11 où les niveaux d'accélération normalisés de la flamme, lors de sa propagation dans la section de passage, sont présentés pour les cinq premiers obstacles. Plus la flamme arrive vite, plus son accélération est élevée car les gradients de pression à travers les obstacles sont de plus en plus importants. Il résulte de ces accélérations successives de fortes ondes de compressions, notamment au niveau du capteur de pression P_2, comme observé en Fig. 6.9. À partir du moment où la flamme passe le deuxième obstacle, les structures tourbillonnaires générées autour et en aval des obstacles sont suffisamment énergétiques pour plisser significativement la surface de flamme (Figs. 6.10c et 6.10d). L'interaction entre la flamme et les structures tourbillonnaires dans le sillage des obstacles permet alors de maintenir des niveaux de vitesse élevés entre deux contractions de l'écoulement, *i.e* entre deux obstacles, comme le montre la Fig. 6.12a.

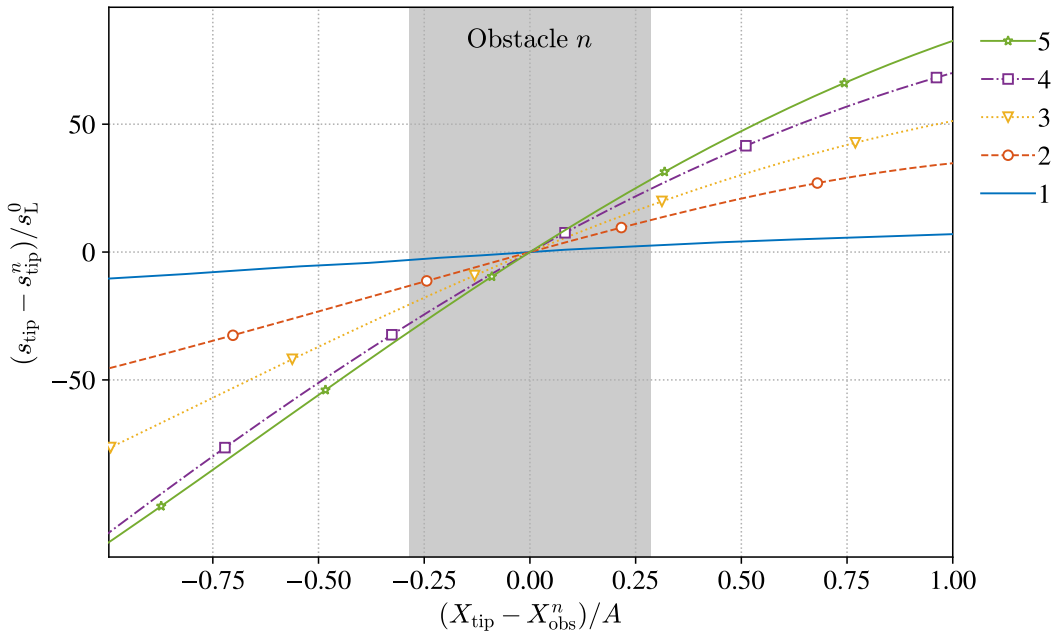
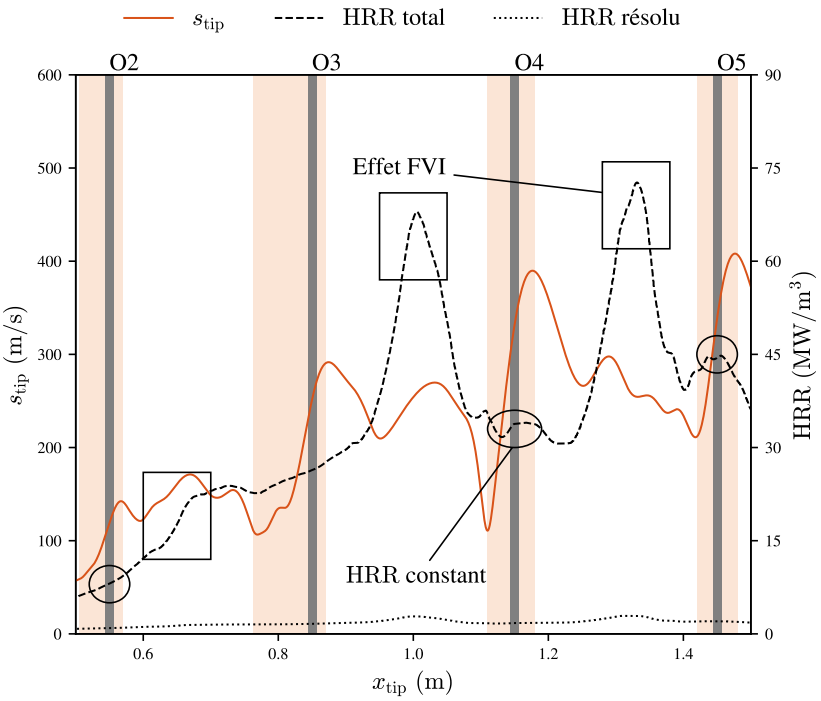
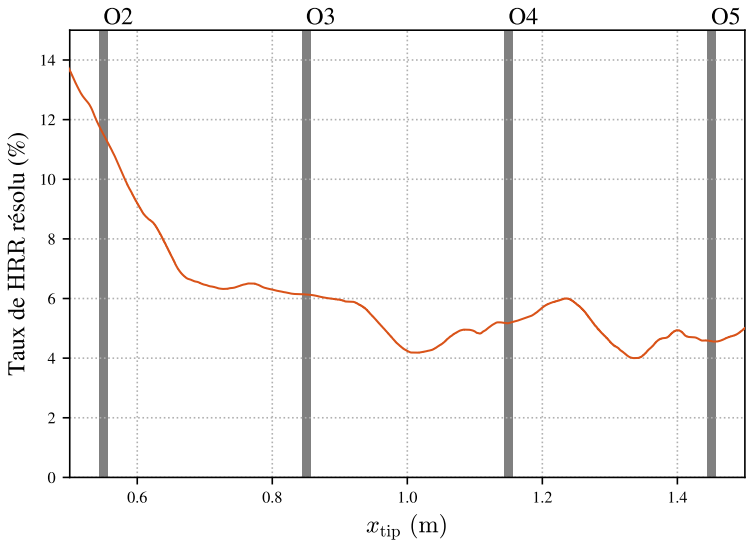


FIGURE 6.11 – Vitesse absolue du front de flamme en fonction de sa position autour des 5 premiers obstacles n. s^n_{tip} représente la vitesse absolue du front de flamme au centre de l'obstacle n. X^n_{obs} correspond à la position de l'obstacle n. A correspond à la distance qui sépare l'obstacle du haut à l'obstacle du bas (m).



(a)



(b)

FIGURE 6.12 – (a) Évolution de la vitesse absolue du front de flamme, s_{tip} (axe de gauche) et du taux de dégagement de chaleur total (axe de droite) et (b) évolution de la part résolue du taux de dégagement de chaleur total en fonction de la position de la flamme, x_{tip}. Les obstacles sont représentés par des barres verticales et nommés par leur position, O{2-5}. Les zones ombrées correspondent à une forte accélération du front, causée par la contraction de l'écoulement. Les ovales représentent les instants où le taux de dégagement de chaleur moyen est presque constant et les rectangles les zones où la flamme est accélérée par l'interaction flamme-vortex (Fig. 6.10d).

Ces phases d'oscillations de vitesse entre les obstacles ne sont pas observées expérimentalement, à cause de la faible discrétisation spatiale des photodiodes. Une succession de contraction de l'écoulement et d'interaction flamme-vortex vont continuer d'accélérer la flamme jusqu'au cinquième obstacle. Jusqu'à cette position, les résultats expérimentaux en termes de vitesse absolue du front sont correctement reproduits. Cependant, à partir de ce point, la vitesse absolue du front de flamme chute entre les obstacles et les phases de contraction de l'écoulement qui en découle sont alors trop faibles pour ramener la vitesse absolue du front de flamme aux niveaux observés expérimentalement. Cette chute survient quand le niveau de pression dans le canal commence à augmenter suite aux fortes ondes de compression générées, et mène à une mauvaise reproduction du niveau de vitesse absolue du front de flamme au niveau du dernier obstacle, ainsi qu'une sous-estimation par rapport au signal expérimental du niveau de surpression induit par le choc formé par le raidissement des ondes de compression. Une explication possible pour cette sous-estimation vient de la topologie du maillage utilisée ici. En effet, ce dernier est plus grossier hors des zones de contraction de l'écoulement. Or, comme illustré en Fig. 6.12a, l'interaction flamme-vortex, qui a lieu sur ce maillage moins raffiné, joue un rôle important dans la conservation des niveaux de vitesse entre les contractions de l'écoulement successives. Ainsi, pour prédire correctement l'interaction flamme-vortex et les niveaux de vitesse de flamme qui en résultent, une résolution similaire à celle appliquée au niveau des obstacles est nécessaire. De plus, comme rappelé en Section 4.4.4, la source de la mauvaise reproduction des signaux de vitesse absolue de front flamme pourrait être due au type de maillage utilisé ici. En effet, lorsqu'une flamme épaissie évolue sur un maillage de résolution différente de celui sur lequel évoluent les structures turbulentes, il y a alors une incohérence dans le modèle d'efficacité TFLES (Section 3.2.2) entre la taille de filtre utilisé pour la flamme et celle du filtre utilisé pour la turbulence, ce qui conduit à la création d'erreurs et fausse l'estimation de l'effet de la turbulence sur la flamme [93]. Dès lors, la prédiction du taux de consommation de la flamme, et ainsi sa vitesse, sont impactées. Pour évaluer l'impact de ce changement de résolution, un maillage homogène dans tout le canal peut être considéré, ou de façon équivalente une méthode AMR avec une taille cible constante, ce qui est l'objet de la Section 6.3.

6.3 Effet du raffinement du maillage

Afin de s'affranchir du coût de calcul important d'une simulation sur un maillage fin uniforme dans toute la zone d'obstacles, dont les tailles des mailles correspondantes sont présentées en Fig. 6.13, seules des simulations utilisant la méthode AMR sont présentées avec la résolution cible correspondante dans les zones d'intérêt. Le maillage statique équivalent à cette résolution cible comporterait un total de 380M d'éléments et les simulations AMR prenant pour cible ce niveau de résolution sont notées "380M" dans la suite du chapitre. Pour rappel, les simulations ciblant la résolution présentée en Fig. 6.4 sont notées "120M".

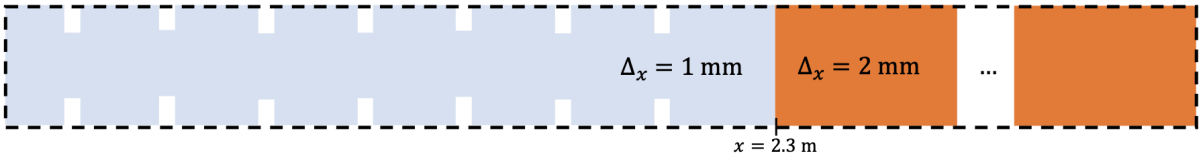


FIGURE 6.13 – Illustration du maillage cible pour une résolution homogène dans la zone d'obstacle, *i.e* jusqu'à $x = 2.3$ m.

Les résultats des simulations AMR, sur ces deux maillages respectifs, sont présentés en Fig. 6.14 et 6.15.

On observe un bon accord entre le cas AMR 380M et les relevés expérimentaux. L'évolution de la vitesse absolue du front de flamme est très similaire dans les deux cas jusqu'au cinquième obstacle (Fig. 6.14). Cependant, contrairement au cas AMR 120M, la flamme parvient à conserver sa vitesse entre les obstacles 5 et 6 dans le cas AMR 380M. Elle est alors soumise à une phase d'accélération plus forte lors de la contraction de l'écoulement au niveau du sixième obstacle et, ainsi, de retrouver des niveaux de vitesse cohérents avec les résultats expérimentaux dans cette zone. On observe cependant un écart avec les résultats expérimentaux après que la sortie du front de flamme de la zone des obstacles. Cet écart peut s'expliquer par le changement de taille de maille qui opère à $x = 2.3$ m (Fig. 6.13). Les structures turbulentes sont alors rapidement dissipées et la flamme est moins plissée. Les signaux de surpressions (Fig. 6.15) sont également correctement reproduits et parviennent à capturer les niveaux de surpressions, causés par le choc, observés expérimentalement. La différence, lors du passage du cas AMR 120M au cas AMR 380M,

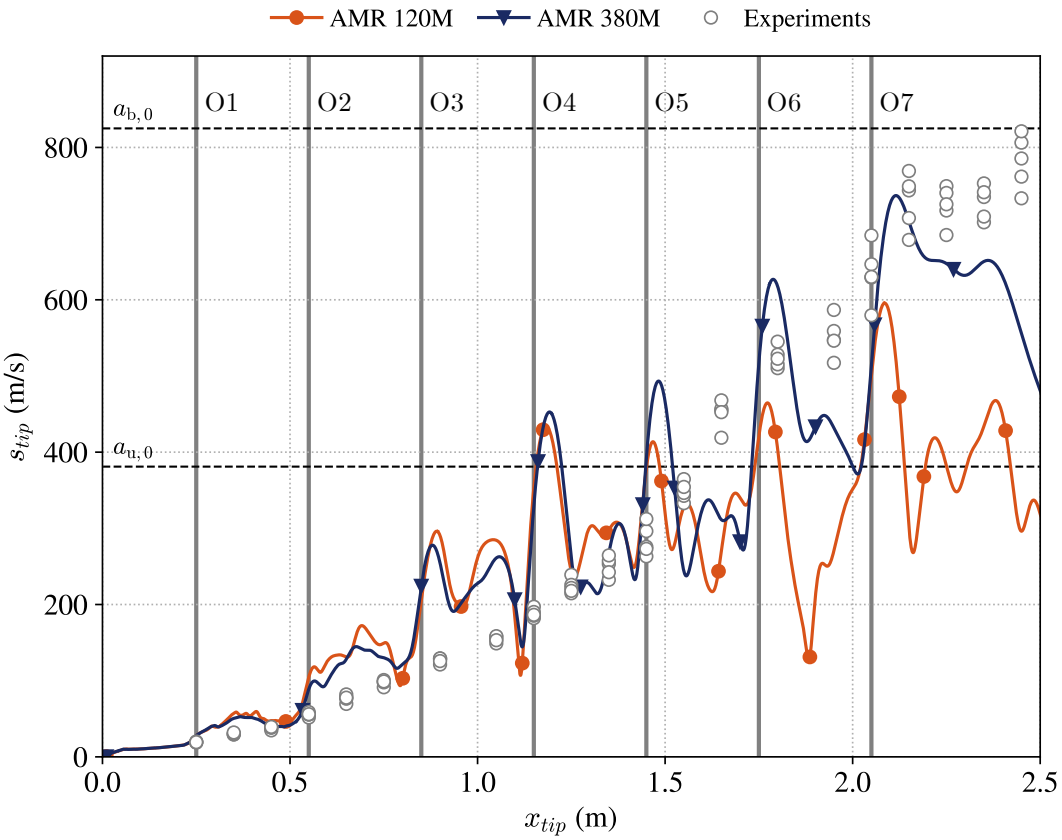


FIGURE 6.14 – Évolution de la vitesse absolue du front de flamme s_{tip} par rapport à sa position x_{tip}, pour les cas AMR 120M et AMR 380M ciblant respectivement les maillages des figures Fig. 6.4 et 6.13, et comparaison avec les mesures expérimentales.

peut notamment être expliquée par l'augmentation du taux de dégagement de chaleur total, présentée en Fig. 6.16a. Ce dégagement de chaleur pilote directement la vitesse de flamme entre deux obstacles consécutifs, comme présenté en Fig. 6.12a, et inversement. Or, dans le cas avec le maillage plus raffiné, AMR 380M, la flamme est moins épaissie dans ces zones et peut donc être davantage courbée, augmentant ainsi sa surface résolue et sa consommation de combustible. Le rapport entre la partie résolue et la partie modélisée du taux de dégagement de chaleur reste lui très proche entre les deux cas Fig. 6.16b. Cela pourrait être dû à l'augmentation de pression plus grande dans le cas AMR 380M, qui résulte à avoir une flamme moins épaisse et donc des niveaux d'épaississement plus grand, ce qui diminue la partie résolue du dégagement de chaleur alors même que le maillage est plus fin. Ainsi, la vitesse absolue de la flamme est ici entretenue par le dégagement de chaleur entre les obstacles consécutifs, contrairement au cas AMR 120M.

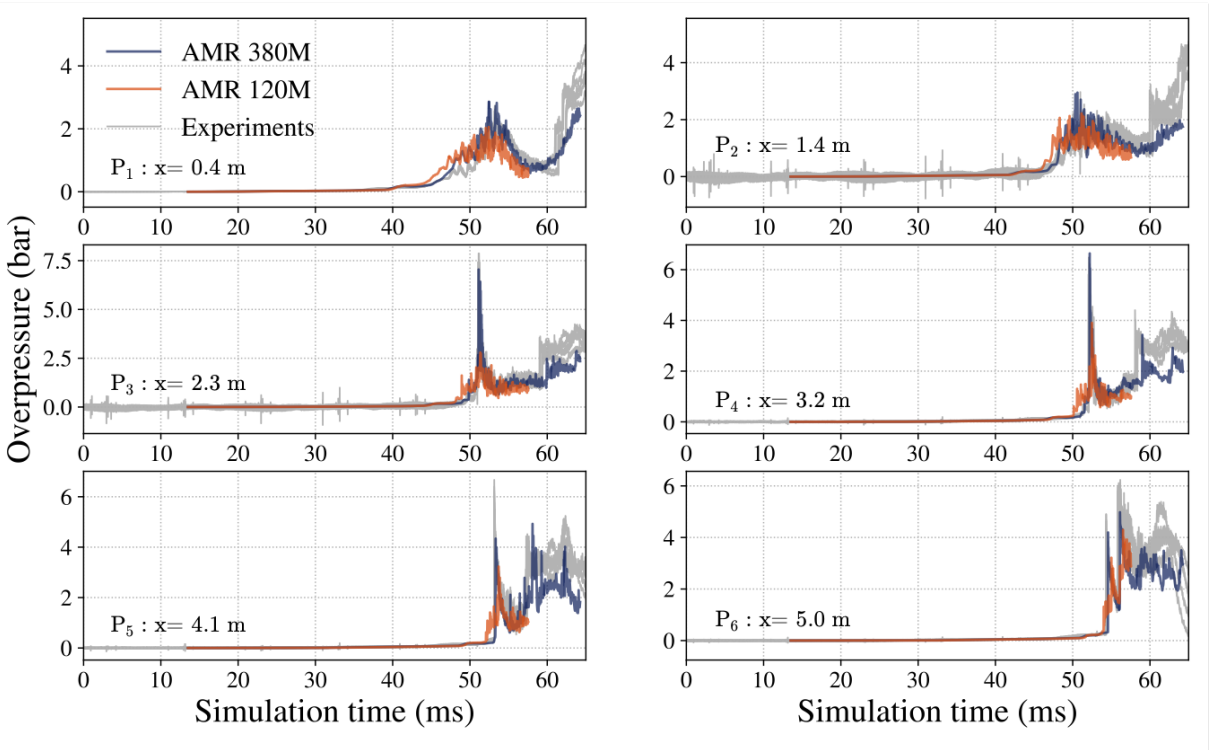
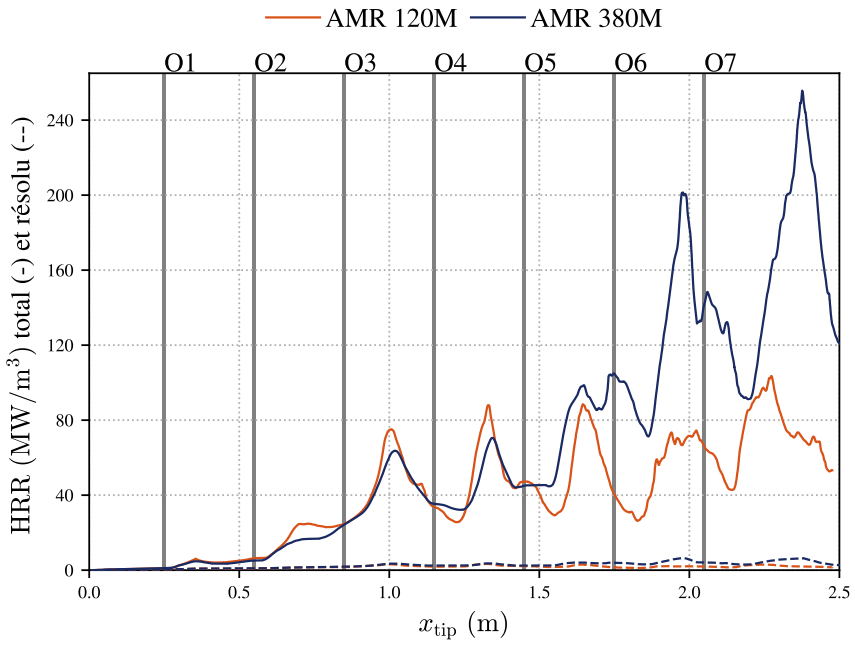


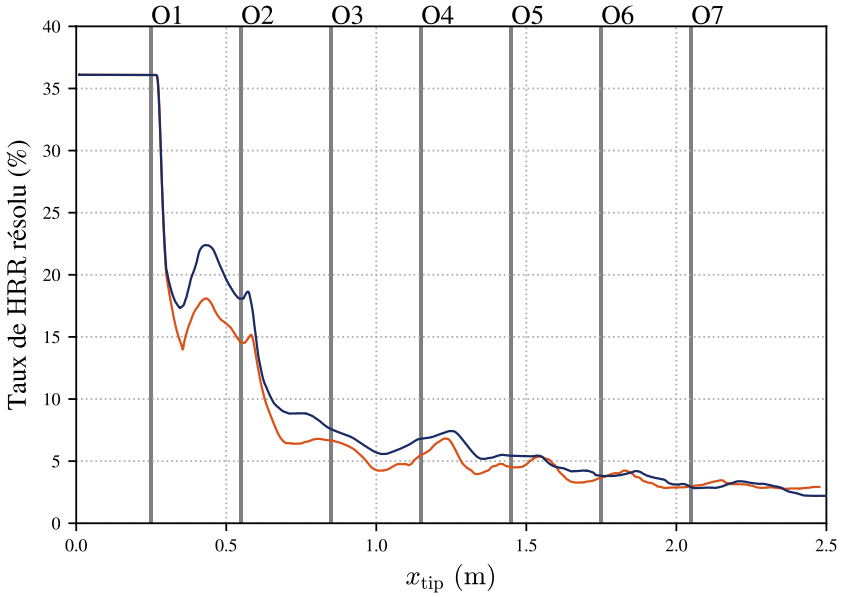
FIGURE 6.15 – Évolution de la surpression au niveau des capteurs de pressions (P_{1-6}), pour les cas AMR 120M et AMR 380M ciblant respectivement les maillages des Fig. 6.4 et 6.13, et comparaison avec les mesures expérimentales.

Cette simulation montre l'intérêt des méthodes AMR sur des configurations de ce type. L'AMR permet de reproduire des simulations de référence à coût moindre, mais aussi d'aller chercher une meilleure description de la physique avec une discrétisation plus fine. Dans ce cas, la flamme et les vortex sont très localisés. Cela permet une réduction considérable du coût de calcul par rapport à une simulation sur maillage homogène équivalent, permettant également d'obtenir des maillages plus fins et donc des calculs plus précis. Dans ce cas, la réduction du coût est estimée à -85%, contre 76% dans le cas AMR 120M. Cependant, ce cas illustre aussi une limite de la méthode : la précision reste dépendante du choix de la taille de maille cible que donne l'utilisateur.

Pour comprendre l'évolution du coût de calcul, il faut étudier l'évolution du maillage au cours de la simulation.



(a)

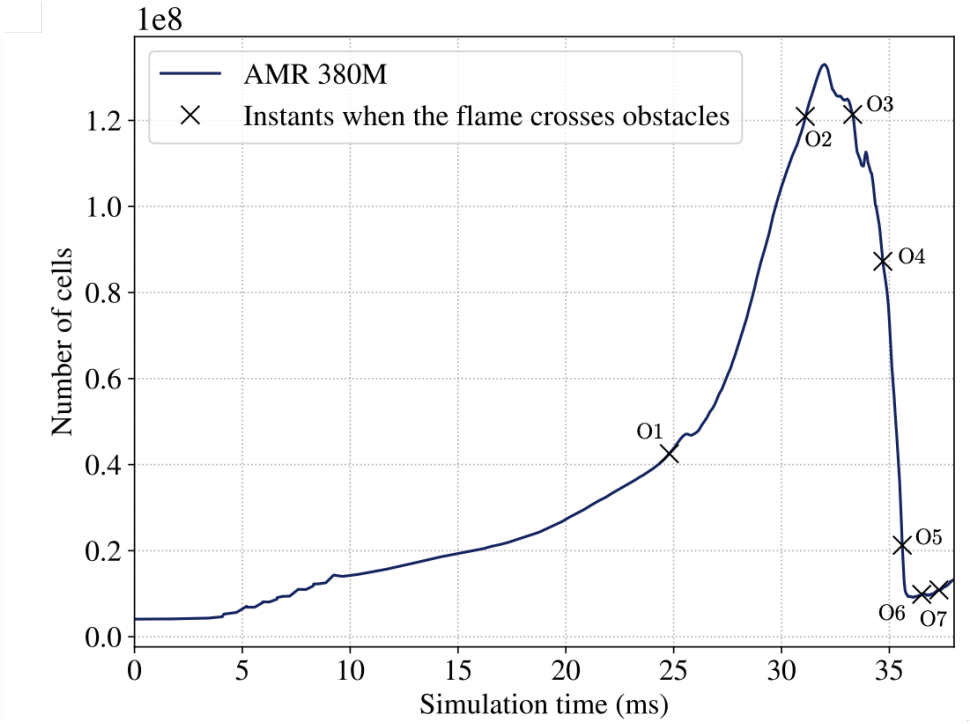


(b)

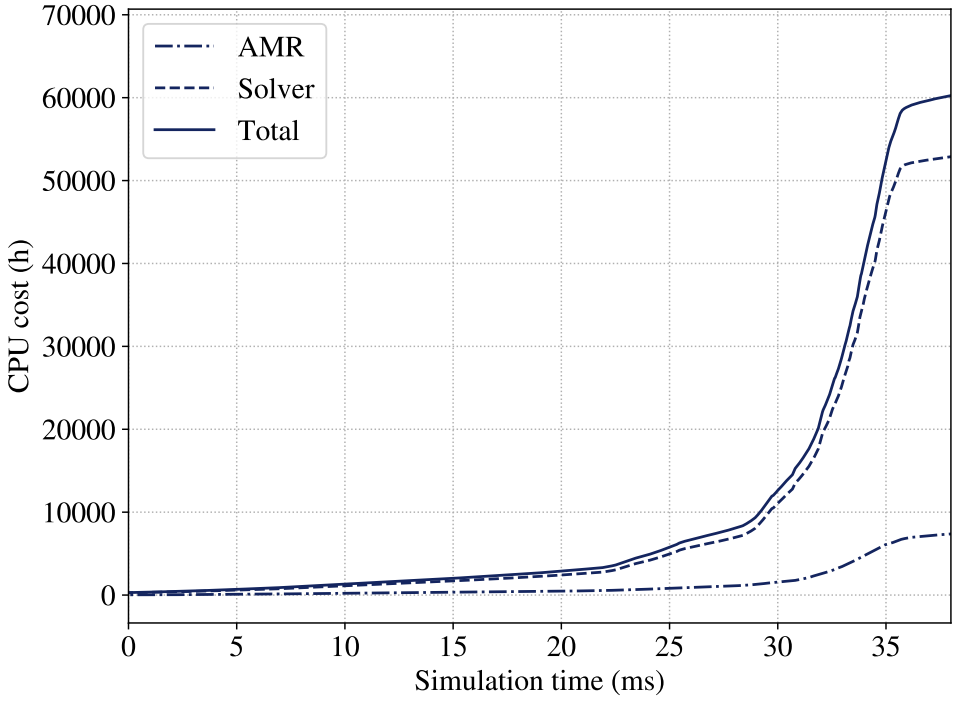
FIGURE 6.16 – (a) Évolution du taux de dégagement de chaleur total et résolu et (b) évolution de la part résolue du taux de dégagement de chaleur total en fonction de la position de la flamme x_{tip}, pour les cas AMR 120M et AMR 380M ciblant respectivement les maillages des Fig. 6.4 et 6.13. Les obstacles sont représentés par des barres verticales.

6.4 Coût de calcul

L'évolution du nombre de mailles et la décomposition du coût de calcul, pour le cas AMR 380M, est présenté en Fig. 6.17.



(a)



(b)

FIGURE 6.17 – (a) Évolution temporelle du nombre d'éléments pour le cas AMR 380M. Les croix représentent les instants où le front de flamme passe au niveau d'un obstacle. (b) Évolution temporelle des coûts de calcul cumulés en temps de l'AMR, du solveur et du coût total de la simulation.

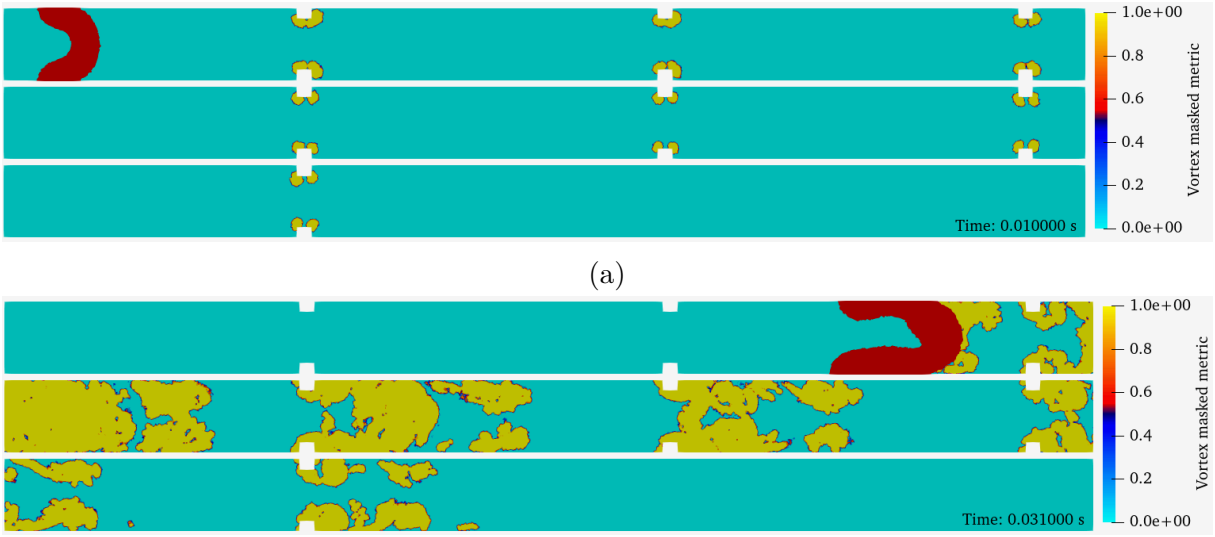


FIGURE 6.18 – Instantanés du champ de masque de métrique de vortex (a) à t = 10 ms, (b) à t = 31 ms, pour le cas AMR 380M. Les zones où la flamme est détectée sont représentées en rouge.

L'évolution du nombre de mailles présentée en Fig. 6.17a montre une croissance presque linéaire jusqu'à 4 ms. À cet instant, plusieurs augmentations, par paliers, sont observées et sont dues à la détection de structures tourbillonnaires derrière chaque obstacle. Cela explique pourquoi on retrouve sept légères augmentations consécutives. Un instantané du masque de métrique illustre ce phénomène en Fig. 6.18a.

La flamme se propage ensuite, en restant laminaire, jusqu'à atteindre le premier obstacle. L'évolution du nombre de mailles est uniquement due au développement des structures tourbillonnaires dans le sillage des obstacles. La flamme, elle, occupe un volume quasiment constant pendant toute sa phase de propagation laminaire avant d'atteindre le premier obstacle. Lorsque la flamme passe entre le premier obstacle, la réduction de la section de passage vient l'étirer et augmente sa surface, comme rappelé en Section 2.4, avant de se relaminariser, ce qui explique la légère diminution du nombre de mailles. Lors de la contraction de l'écoulement, la flamme accélère et davantage de structures tourbillonnaires sont détectées dans le sillage des obstacles et augmentent le nombre de cellules du maillage. À partir du passage au niveau du deuxième obstacle, le nombre maximal de mailles est atteint ($\approx$ 130M) et correspond au tiers du nombre de cellules du maillage homogène équivalent, ce qui montre l'utilité de la méthode AMR sur ce genre de

configurations. À partir de ce point, des structures tourbillonnaires sont détectées dans une grande partie de l'espace inter-obstacles, comme illustré en Fig. 6.18b, générées par la très grande vitesse des gaz frais. À partir du passage de la flamme à travers le troisième obstacle, le nombre de mailles diminue très rapidement, car la flamme se propage à une très grande vitesse et consomme rapidement les gaz frais turbulents. Ces derniers, maillés finement, sont convertis par le front de flamme en gaz brûlés qui sont, eux, maillés grossièrement par construction de la méthode AMR. Ainsi, lorsque tout le combustible dans la zone inter-obstacles est consommé, seule la flamme est maillée finement et le nombre de mailles reste alors très faible dans le reste de la simulation. L'évolution des différentes composantes du coût de calcul est présentée en Fig. 6.17b. L'évolution du coût de calcul du solveur, représentée par sa pente, est proportionnelle à l'évolution du nombre de mailles. Lorsque la taille du maillage augmente (resp. diminue), la pente du coût du solveur augmente (resp. diminue) également. En effet, la taille minimale des mailles restant quasiment constante (et par conséquent le pas de temps de la simulation) tout au long du calcul, seule la taille du maillage fait varier ce coût. Le coût de calcul de l'AMR lui, est directement lié à la vitesse de propagation de la flamme. En effet, plus la vitesse de flamme est grande, plus sa propagation et la convection des vortex vont nécessiter des adaptations de maillage fréquentes pour s'assurer de conserver les physiques d'intérêt sur une zone maillée à la résolution fine. Pour cette simulation, 1421 adaptations de maillage sont déclenchées, dont plus de 1000 entre le passage de la flamme du quatrième au septième obstacle, là où la flamme atteint des niveaux de vitesse très importants. Au final, le coût de l'AMR représente 15% du coût total, ce qui est légèrement inférieur aux coûts observés dans le Chapitre 5. Le faible coût dû au remaillage montre l'efficacité de la méthode AMR, ainsi que celle de l'algorithme développé grâce à sa structure parallèle, notamment pour des cas de maillages tétraédriques non structurés.

6.5 Impact du Reynolds vortex limite sur le coût de calcul et la précision des résultats

L'étude paramétrique de la Section 5.6 a permis de montrer la robustesse de la méthode et la faible influence du choix du nombre de cellules pour la dilatation du masque de

métrique : ce paramètre n'a pas d'impact sur la prédiction et a un impact modéré dans l'optimisation du coût de calcul. Cependant, le choix du paramètre $Re_{\mathrm{v,limit}}$ reste lui ouvert en fonction des configurations étudiées. Le choix retenu dans ce manuscrit suit une approche conservative, permettant de s'assurer de la bonne résolution de la physique de l'écoulement ainsi que de la bonne prédiction des phénomènes d'interaction flamme-vortex (Section 4.4.3). Or, dans des géométries de plus grands volumes où la flamme atteint des niveaux de vitesses très élevées, comme celle étudiée dans ce chapitre, l'augmentation du paramètre $Re_{\mathrm{v,limit}}$ pourrait réduire considérablement le coût du calcul en diminuant fortement le nombre de structures détectées, sans affecter significativement la précision du calcul. En effet, lorsque la vitesse de flamme est très grande, la vitesse de l'écoulement du côté des gaz frais augmente beaucoup également, générant des vortex de très fortes intensités qui vont avoir un impact significatif sur la flamme. Ainsi, en augmentant le paramètre $Re_{\mathrm{v,limit}}$, il est possible d'uniquement détecter ces structures tourbillonnaires de très forte intensité et d'ainsi reproduire correctement les mécanismes principaux lors de l'interaction entre la flamme et les structures turbulentes de grandes échelles, tout en négligeant la résolution des structures de petite échelle. Pour étudier l'impact de ce paramètre, une nouvelle étude paramétrique a été réalisée sur la configuration de GraVent, en faisant varier $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{10, 100, 1000\}$. Le cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 1$ n'a pas été simulé de par son coût de calcul significatif. Les résultats sur la vitesse absolue du front de flamme sont présentés en Fig. 6.19. Contrairement à l'étude menée sur le cas Masri, résultats sont très faiblement dépendants de $Re_{\mathrm{v,limit}}$, même pour des valeurs très élevées. Cela est directement dû à la vitesse de la flamme et à la formulation de la fonction d'efficacité de Charlette et al. [26]. Lorsque la fluctuation de vitesse devient grande, *i.e* quand l'écoulement est très turbulent, la fonction d'efficacité est saturée et sa valeur atteint un maximum $\Xi_{\mathrm{max}} = F^{\beta}$, comme exprimé dans l'Eq. (3.28). La fonction d'efficacité sature très rapidement (à partir du deuxième obstacle) comme illustré en Fig. 6.20. Le taux de dégagement de chaleur modélisé de la flamme est alors très proche pour les différentes valeurs de $Re_{\mathrm{v,limit}}$ car les niveaux d'épaississement et de taux de dégagement de chaleur résolu sont très proches. Dans ce cas, la partie modélisée du taux de dégagement de chaleur représente la quasi-totalité ($> 90\%$) du taux de dégagement de chaleur total, comme illustré en Fig. 6.16a. Cela est dû au fait que la valeur de l'efficacité, issue de

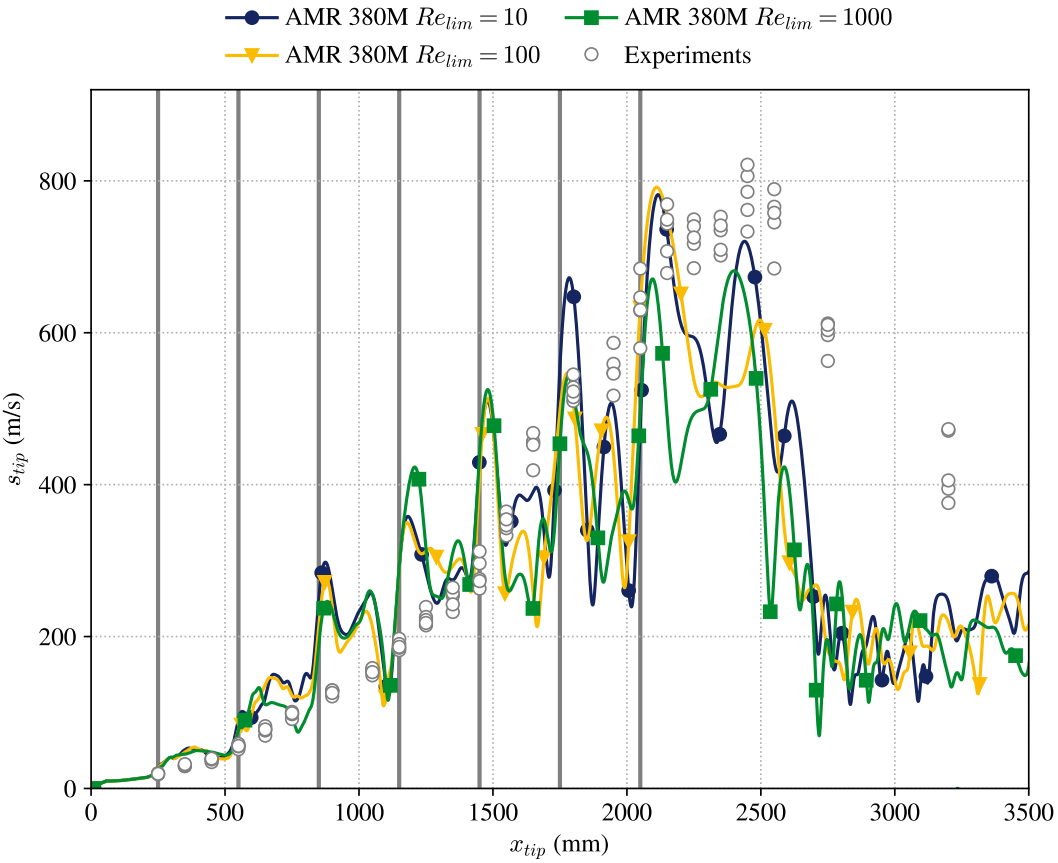


FIGURE 6.19 – Évolution de la vitesse absolue du front de flamme s_{tip} par rapport à sa position x_{tip}, pour $Re_{\text{v,limit}} = \{10, 100, 1000\}$ et comparaison avec les mesures expérimentales.

TFLES, est très grande. Seules les phases d'interaction flamme-vortex dans le sillage des deux premiers obstacles sont mal reproduites par le cas $Re_{\text{v,limit}} = 1000$, qui ne détecte presque aucune structure tourbillonnaire comme illustré en Fig. 6.21a et 6.21b. Cependant, cela n'impacte que très peu la propagation de la flamme et les résultats de la simulation. On peut donc faire l'hypothèse que dans cette configuration, la flamme n'est pas sensible aux petites échelles, faiblement énergétiques.

Afin de conclure sur l'impact du paramètre $Re_{\text{v,limit}}$ en termes de performance, les différents coûts de calcul sont présentés en Fig. 6.22.

L'augmentation du paramètre $Re_{\text{v,limit}}$ permet d'obtenir des gains de temps significatifs tout en conservant des résultats satisfaisants. Par rapport au cas $Re_{\text{v,limit}} = 10$, le coût de calcul du cas $Re_{\text{v,limit}} = 100$ est diminué de 26%, et de 48% pour le cas $Re_{\text{v,limit}} = 1000$. Dans tous les cas, le coût de l'adaptation de maillage est faible ($\approx$ 15%). Pour

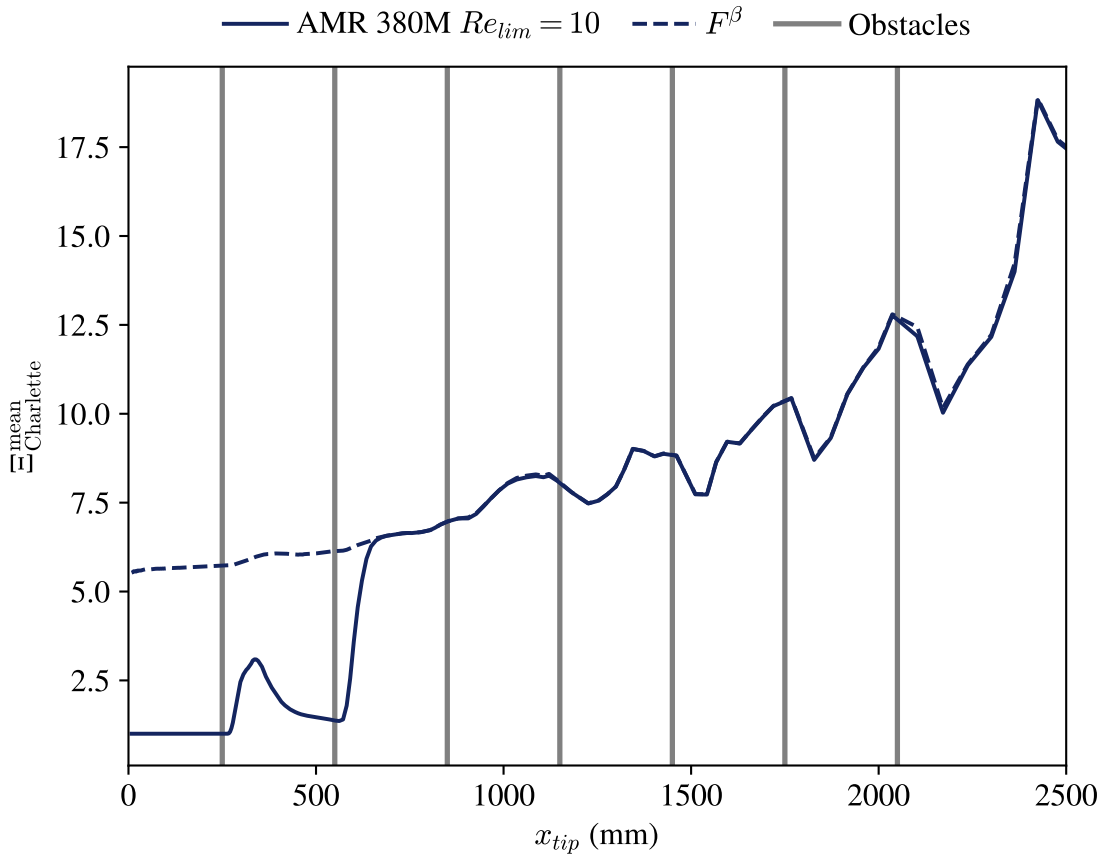
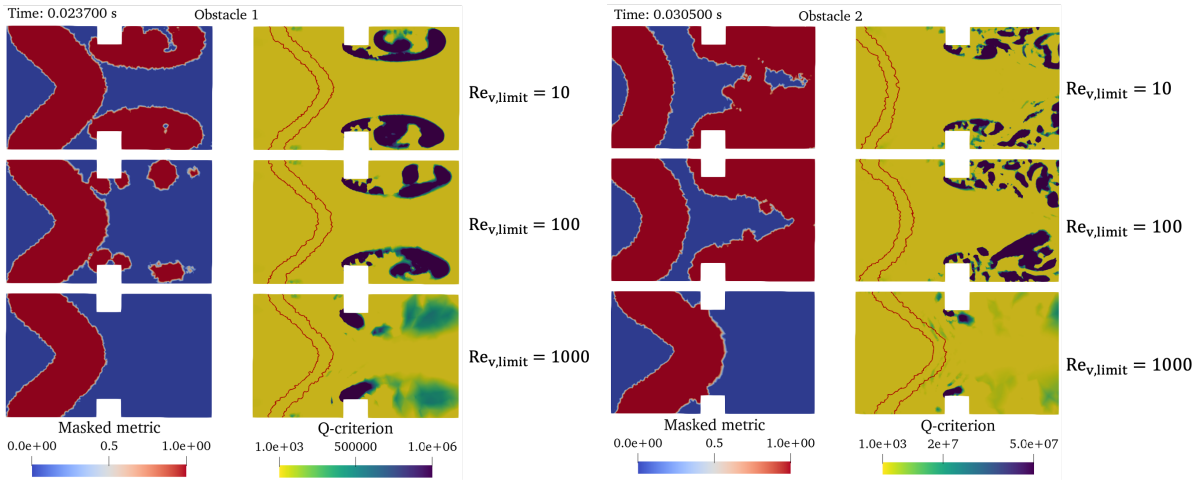


FIGURE 6.20 – Évolution de l'efficacité moyenne dans le front de flamme par rapport sa position. La fonction $\Xi_{\text{Charlette}}$ est saturée si $\Xi^{\text{mean}}_{\text{Charlette}} = F^\beta$.

ce type de configurations, avec des flammes turbulentes se propageant à de très grandes vitesses dans un environnement obstrué, l'augmentation du $Re_{\text{v,limit}}$, permettant de cibler uniquement les structures turbulentes de grandes échelles, pourrait permettre de réaliser des simulations sur des échelles géométriques plus grandes, tout en conservant une bonne précision numérique pour un coût de calcul raisonnable. Cependant, cette conclusion dépend des régimes d'interactions flamme-turbulence propres à chaque cas.

6.6 Conclusions intermédiaires

L'utilisation de la méthode AMR, développée en Chapitre 4 et appliquée sur un cas d'explosion en Chapitre 5, a permis de reproduire précisément la physique d'une explosion d'un mélange hydrogène-air dans un canal de 100L. Cette méthode a permis d'obtenir des tailles de mailles plus fines tout en réduisant le coût de calcul par rapport à une simulation



(a) Premier obstacle (b) Deuxième obstacle

FIGURE 6.21 – Comparaison du masque de métrique et du critère Q autour (a) du premier et (b) du second obstacle pour $Re_{\mathrm{v,limit}} = 10, 100, 1000$. **Gauche :** masque de métrique (M). **Milieu :** critère Q. Les structures tourbillonnaires très énergétiques sont représentées par une forte amplitude du critère Q.

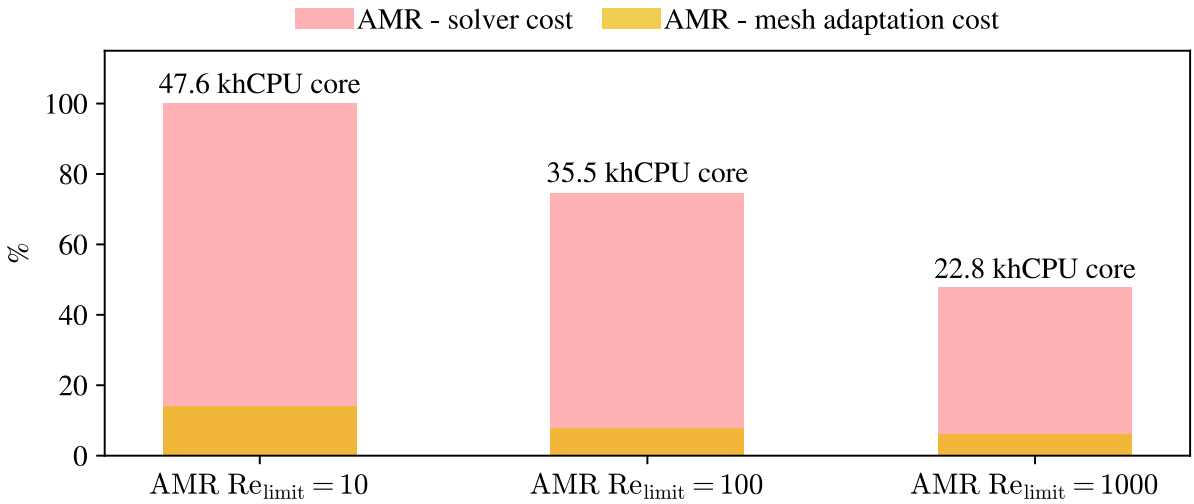


FIGURE 6.22 – Comparaison des différents coûts de calculs pour $Re_{\mathrm{v,limit}} = \{10, 100, 1000\}$. Les coûts sont normalisés par le coût de calcul total du cas $Re_{\mathrm{v,limit}} = 10$. Le coût de remaillage représente environ 15% du coût total pour tous les cas AMR.

sur maillage statique homogène équivalent.

— **Robustesse de la méthode AMR :** La méthode AMR a permis de reproduire fidèlement la physique de l'explosion, en obtenant des mailles plus fines sans ajustement des paramètres.

— **Influence de la dilatation :** La capacité de la méthode à adapter les tailles de mailles dans toute la zone du canal contribue à une meilleure précision tout en

maintenant l'efficacité du calcul.

— **Influence du Reynolds :** L'étude du paramètre $Re_{\mathrm{v,limit}}$ a mis en évidence son impact sur la précision des résultats et les coûts de calcul, fournissant des éléments de réflexion pour l'optimisation de la méthode.

— **Gains en termes de coûts de calcul :** L'utilisation de la méthode AMR a permis de réduire les coûts de calcul par rapport à une simulation sur maillage statique homogène, tout en assurant une meilleure résolution. Ce dernier point offre une perspective pour l'utilisation de la méthode TFP-AMR, en permettant d'aller vers des résolutions plus fines et ainsi vers une meilleure prédiction des phénomènes physiques d'intérêt dans les explosions, tout en conservant un coût de calcul raisonnable.

— **Perspectives :** L'utilisation de la méthode TFP-AMR suffit à reproduire les phénomènes physiques prenant place dans les déflagrations comme celle étudiée dans ce chapitre. Cependant, pour des concentrations d'hydrogène plus élevées, la transition vers la détonation nécessiterait l'introduction d'un critère permettant de détecter les chocs et adapter le maillage en conséquence. Les paramètres optimaux alors utilisés ici, comme le nombre de cellules de masque de métrique à dilater, serait à revoir pour s'adapter à la dynamique de ces phénomènes.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

Cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux portant sur les simulations aux grandes échelles d'explosions, thématique de recherche initiée au CERFACS par la thèse de Quillatre [107]. Dans ce cadre, différents travaux [42, 112] ont montré l'intérêt de la simulation aux grandes échelles sur des maillages non structurés pour représenter la physique de tels phénomènes dans des géométries de complexité variable. Un des verrous pour l'application de cette méthode sur des configurations à l'échelle industrielle est le coût de calcul de ces simulations. Face à ce constat, ces travaux de thèse portent sur le développement et la validation d'une méthode d'adaptation de maillage dynamique, appelée TFP-AMR. Cette méthode doit permettre de réaliser des simulations aux grandes échelles sur des géométries complexes, en assurant une très bonne précision par rapport à une simulation de référence sans AMR avec des gains significatifs en temps de calcul. Elle doit également être robuste et générique pour permettre son application sur large gamme de configurations et conditions opératoires, en minimisant les ajustements de paramètres nécessaires. La méthode repose sur des critères qui ciblent les principaux phénomènes physiques en jeu dans les processus d'accélération de flamme pour déterminer les zones de maillage à raffiner. Pour construire la méthode TFP-AMR les principaux développements réalisés ont été les suivants :

— **Développement d'un critère de raffinement basé sur la détection de flamme**

Pour assurer une représentation satisfaisante des processus réacto-diffusifs de la flamme, un critère de raffinement basé sur le senseur de flamme utilisé dans le modèle de combustion de flamme épaissie (DTFLES) est retenu, permettant de localiser la zone du front de flamme. Ce senseur est central dans le modèle DFTLES et a déjà été éprouvé sur de nombreuses configurations académiques et industrielles. Cette consistance entre le senseur du modèle de combustion LES et le critère de raffinement a un double avantage. Elle permet 1) permet un contrôle direct du facteur d'épaississement appliqué dans le modèle de combustion et donc

de la qualité de la LES et 2) et de garantir l'homogénéité spatiale de l'échelle du filtre LES, ce qui évite d'introduire des erreurs supplémentaires liées à une taille de maille variable. .

— **Développement d'une méthode automatique de déclenchement d'adaptation de maillage**

La problématique de critère de déclenchement de l'adaptation est liée au coût d'une étape d'adaptation. Bien que l'algorithme d'adaptation soit massivement parallèle, il requiert des opérations topologiques et d'interpolation sur le maillage dont le coût est important. L'adaptation doit donc être déclenchée à une fréquence moindre par rapport aux itérations du solveur LES. Dans ces travaux, le critère de déclenchement est basé sur le postulat simple que les physiques d'intérêt (le front de flamme et les structures turbulentes dans le cas des explosions) doivent évoluer sur zone de maillage fin à chaque instant pour éviter d'introduire des erreurs numériques. Ainsi, lorsque la physique d'intérêt identifiée devient proche d'une zone déraffinée du maillage, une adaptation de maillage est déclenchée. Cela permet d'assurer en chaque point et à chaque instant une discrétisation à la résolution fine des grandeurs d'intérêt. Cela permet de maintenir la précision de la simulation par rapport à une simulation homogène de référence à la même résolution. Pour éviter des adaptations de maillage trop fréquentes, la zone maillée finement doit être étendu en amont de la direction de propagation des phénomènes. La méthode utilisée repose sur une opération de dilatation du masque de métrique. Bien qu'elle introduise un paramètre utilisateur traduisant la distance sur laquelle la métrique est étendue, une étude de sensibilité ne montre aucune sensibilité sur la précision du calcul et un impact limité sur son coût.

— **Développement d'un critère de raffinement basé sur la détection de vortex**

Pour des processus d'accélération de flamme en milieu obstrué, les phénomènes d'interaction flamme-tourbillon joue un rôle prépondérant, notamment dans les sillages des obstacles immergés. En se basant sur cette observation, un critère

est construit pour identifier les structures tourbillonnaires significatives de l'écoulement. Il est basé sur la comparaison des composantes de déformation et de rotation du tenseur de gradient de vitesse. Cette méthode, déjà proposée de la littérature [99], est adaptée : l'introduction d'une régularisation dans l'expression du critère agit comme un seuil d'intensité pour les vortex détectés qui est relié à la littérature de l'interaction flamme-vortex. Dans un premier temps, la méthode est développée et validée pour des cas d'application non réactifs afin de montrer ses avantages par rapport à sa formulation originale et d'autres formulations possibles. Dans un second temps, la méthode est étendue au cas réactifs à partir d'hypothèses basées sur les résultats d'interactions flamme-vortex, obtenus dans la littérature. La pertinence du critère est vérifiée par étude paramétrique d'interaction flamme-vortex. Finalement, la méthode est appliquée sur des cas d'explosions. La transposition de la méthode à ces cas plus réalistes confirme que la méthode ne nécessite pas de seuil à estimer par l'utilisateur et à faire varier d'un cas à l'autre, malgré la disparité d'échelles des phénomènes turbulents rencontrés.

— **Validation de la méthode sur des cas canoniques**

Les principaux développements énoncés précédemment ont été validés de façon incrémentale à travers des différents cas canoniques comme la simulation d'une flamme plane laminaire en 3-D, la simulation d'une convection de vortex isentropiques non réactif en 2-D, puis la simulation de plusieurs cas d'interactions flamme-vortex en 2-D. Pour l'ensemble de ces cas, l'AMR parvient à retrouver avec une excellente précision les résultats obtenus sur un maillage statique homogène équivalent. Bien que ces cas ne soient pas pleinement représentatifs d'une géométrie complexe, les coûts de calcul obtenus sont largement inférieurs aux cas de référence homogènes, avec une part relativement faible du coût lié à l'algorithme d'adaptation.

— **Validation de la méthode sur des cas 3-D complexes**

Afin de valider l'application de la méthode sur des configurations plus complexes, se rapprochant de configurations industrielles, et d'ainsi valider l'objectif de la

thèse, plusieurs simulations sont réalisées sur les géométries de l'université de Sydney (Masri) et de l'université de Munich (GraVent). Dans la première configuration, Masri, trois cas différents sont étudiés. Les simulations utilisant la méthode TFP-AMR retrouvent précisément les résultats obtenus par un calcul de référence, sur maillage statique et homogène équivalent, prouvant ainsi la capacité de la méthode AMR à reproduire correctement les différents mécanismes d'accélération de flamme, ce qui valide la méthode TFP-AMR sur ce type de configuration. La réduction du coût de calcul observée est cependant relativement faible (-50%), en raison du volume important très rapidement occupé par la flamme dans cette configuration à l'échelle décimétrique. Pour la géométrie GraVent, la méthode TFP-AMR permet également de retrouver les résultats obtenus par un calcul de référence, sur maillage statique et homogène équivalent. Elle permet également de réaliser des simulations ciblant des résolutions de maillage plus fines, permettant ainsi d'améliorer la précision et la reproduction des résultats expérimentaux pour un coût de calcul relativement faible. Dans ce cas, la réduction du coût de calcul est largement supérieure à celle obtenue dans les configurations de Masri, de par sa géométrie à l'échelle métrique allongée et le faible volume occupé par les grandeurs d'intérêt, notamment le front de flamme qui occupe une région très localisée de l'espace.

— **Coût de la méthode AMR**

Pour chacun des cas présentés en Chapitres 4, 5 et 6, les gains de temps observés sont notamment dus au coût algorithmique modéré de la méthode. Cela repose notamment sur les capacités massivement parallèles de la librairie AMR, kalpaTARU, développée dans des travaux concourants, qui implémente un algorithme itératif pour adapter le maillage en parallèle, en assurant l'interface avec librairie d'adaptation de maillage non structuré (MMG3D) qui opère sur chaque partition du domaine. La libraire kalpaTaru gère également l'interpolation et la redistribution de charge entre les partitions. L'efficacité algorithmique permet ainsi de maximiser les gains obtenus grâce à la méthode AMR. Le coût relatif de l'algorithme d'adaptation varie pour chaque cas, en fonction de la dynamique des phénomènes

d'intérêt, et de la complexité géométrique des maillages à adapter. Cependant, il faut noter que même pour les cas les moins avantageux, le coût de l'algorithme AMR ne représente que 30% du coût total. C'est un très bon résultat au vu de la complexité des maillages non structurés utilisés. Ce coût modéré est aussi directement lié à l'utilisation du critère de déclenchement qui adapte automatiquement la fréquence de remaillage. D'un point de vue global, l'utilisation de la méthode AMR a permis d'obtenir des réductions de coûts de calcul très importants (jusqu'à -81% pour un cas 3-D d'explosion). Il est à noter que les gains dépendent directement de la géométrie et des phénomènes d'intérêt étudiés. Dans les cas de déflagrations à échelle réduite, la présence de la flamme et des structures turbulentes dans une grande partie du volume (comme en Chapitre 5) restreignent le gain atteignable. Cependant, dans des cas où les phénomènes d'intérêt sont beaucoup plus localisés, c'est-à-dire avec une disparité d'échelle beaucoup plus grande entre la flamme, les petits et les grands éléments constitutifs de la géométrie, l'AMR peut permettre d'obtenir de très fortes diminutions de temps de calcul (comme en Chapitre 6). Il serait donc possible de diviser le coût de calcul par un ordre de grandeur, ce qui représente un gain significatif.

La démonstration de la méthode TFP-AMR a été validée sur un grand nombre de cas différents, correspondant à des déflagrations en milieu obstrué. L'introduction de l'AMR ne dégrade pas la prédiction des phénomènes physiques pilotant la sévérité des explosions. Il est particulièrement notable que la méthode n'a pas nécessité d'ajustement de paramètres sur l'ensemble de ces cas, ce qui démontre son caractère générique et robuste. Dans cette perspective, une description des meilleures pratiques d'utilisation est proposée en Annexe 8 pour les utilisateurs potentiels de la méthode. Bien que celle-ci ait été développée dans un contexte spécifique lié à l'environnement de la thèse (code LES AVBP sur des maillages non structurés, librairies MMG3D et KalpaTaru), elle repose sur des postulats simples transposables à d'autre type de simulation instationnaire et d'autres codes de calcul.

Perspectives

La méthode développée ici se limite à des cas de déflagrations pour des mélanges homogènes, prémélangés, en milieu obstrué, ce qui constitue un cas très idéalisé par rapport à un scénario réel d'explosion, le plus souvent avec un nuage inflammable stratifié. Cela pose plusieurs questions d'ordre théorique et pratique, la stratification conduisant à des caractéristiques locales (épaisseur et vitesse) variables le long du front de flamme. Faut-il cibler une résolution cible fixe dans ce cas dictée par l'épaisseur la plus contraignante (la plus mince) ou faut-il cibler un facteur d'épaississement constant le long du front (et donc une taille locale de maille variable) ? De plus, les variations locales de ces propriétés conduiraient alors à reconsidérer les critères du senseur de vortex, notamment la sélection des vortex d'intérêt.

Au-delà de l'aspect stratification, d'autres phénomènes physiques n'ont pas été considérés : pour les configurations en tube lisse, les phénomènes de couche limite peuvent jouer un rôle prépondérant ; pour les flammes rapides, les phénomènes d'interaction choc-flamme peuvent jouer un rôle important sur la dynamique de flamme et l'amorce de la transition à la détonation (DDT). Pour étendre la gamme de validité de l'approche TFP-AMR, l'ajout de critères dédiés à ces phénomènes serait donc nécessaire. Le cas de la DDT est particulièrement difficile, de par sa nature chaotique et sa très forte localité en temps et en espace.

En ce qui concerne les gains de coût de calcul, l'AMR apporte des gains conséquents, qui approche un ordre de grandeur pour les cas à forte disparité d'échelle. C'est un gain conséquent, rendant plus accessible la simulation LES à des géométries d'échelles industrielles. Cependant, d'un point de vue plus fondamental, ces gains sont très loin d'être suffisants pour espérer approcher des résolutions proches de la DNS sur des configurations réalistes. Du point de vue de la modélisation LES, l'effort doit donc être poursuivi, notamment pour la combustion de sous-maille, pour contribuer à améliorer le compromis coût précision de la méthode, en obtenant une meilleure précision du modèle à une taille de filtre LES donnée. Du point de vue de l'AMR, des gains supplémentaires peuvent également être obtenus. Les différents cas ont notamment montré le coût significatif de la résolution des structures turbulentes, qui ont une grande extension

spatiale. Dans le paradigme actuel, une seule résolution cible fine est définie : des gains significatifs peuvent être obtenus en adaptant la résolution cible fine à chaque phénomène, par exemple en adoptant une résolution plus grossière pour la turbulence par rapport au front de flamme. Dans ce cas, il faut alors prendre en compte les erreurs introduites par les variations spatiales de taille de filtre, une voie étant de corriger le biais introduit par l'intermédiaire des différents sous-modèles [93]. Qui plus est, le choix de la résolution cible est dictée dans le paradigme actuel par un choix dépendant essentiellement des ressources de calcul disponible et de contraintes géométriques : il est possible d'aller vers des méthodes permettant une détermination plus systématique de la résolution optimal [119], en essayant de quantifier localement l'erreur induite par la modélisation LES de sous-maille.

Au-delà du cadre des explosions et de la sécurité industrielle, d'autres cas d'études transitoires avec des retombées importantes d'un point de vue industriel pourraient bénéficier de l'apport de l'AMR : les simulations en maillage mobile (moteur à piston, éolien), les allumages et extinction de chambre de combustion ainsi que la propagation de détonation, par exemple dans les moteurs à détonation tournante.

Chapitre 8

Annexe : Utilisation de l'AMR dans AVBP

Des recommandations concernant la mise en place et l'utilisation de l'AMR dans AVBP sont décrites dans ce chapitre. Cela devrait permettre à n'importe quel utilisateur expérimenté d'AVBP d'utiliser l'adaptation de maillage pour des cas instationnaires de combustion turbulente, voire des cas touchant à d'autres domaines, si de nouveaux senseurs et critères sont développés.

8.1 Recommandation de procédure et de paramètres en entrée

Le fonctionnement actuel de l'AMR repose sur plusieurs paramètres en entrée, essentiel à la converge lors de l'adaptation :

- **La taille de maille cible dans les zones d'intérêts :** Cette taille peut être donnée sous forme d'une constante ou d'un champ scalaire, permettant ainsi d'avoir des tailles de mailles cibles différentes en fonction de leur position dans le domaine. Cette taille de maille minimale est la même, peu importe la quantité d'intérêt qui y est détectée (flamme ou turbulence dans ce manuscrit).
- **La taille de maille cible hors des zones d'intérêts :** Cette taille peut-être, elle aussi, donnée sous forme d'une constante ou d'un champ scalaire, permettant ainsi d'avoir des tailles de mailles cibles différentes en fonction de leur position dans le domaine. Il faut cependant veiller à donner une taille qui permet de conserver une résolution suffisante de la géométrie.
- **Le rapport maximal de taille entre deux mailles voisines :** Un faible rapport permet de s'assurer le bon fonctionnement numérique de la simulation, mais diminue la vitesse de croissance du maillage raffiné vers le maillage déraffiné.

D'autres paramètres sont souvent fixés par défaut et ne doivent être modifiés que par des utilisateurs expérimentés :

- **Le nombre maximum de sous-adaptation :** Ce nombre permet de fixer une limite haute du nombre de sous-adaptations survenant lors d'une adaptation de maillage. Un grand nombre de sous-adaptations peut augmenter le coût de calcul de l'AMR, mais est très souvent nécessaire afin de respecter les critères de convergence et de qualité du maillage.
- **La déviation maximale de la métrique :** La limite fixée par défaut est arbitraire, mais a été testée et montre un rapport optimal entre coût et précision. Dans des cas plus complexes, cette limite peut être augmentée pour éviter des problèmes de convergence sur une très petite partie du domaine complet. Cela peut cependant amener à la création de maille de très faible volume, diminuant ainsi le pas de temps et augmentant considérablement le coût de calcul.
- **La déviation maximale de la tolérance :** Si la déviation de la valeur de la métrique est inférieure à cette limite, alors les éléments ne sont pas touchés et le maillage dans ces zones est fixe. Cela permet notamment de réduire considérablement les erreurs d'interpolation, mais ajoute également des contraintes lors de l'adaptation de maillage.
- **Le paramètre Hausdorff :** Ce paramètre permet de conserver une discrétisation correcte des géométries. Il est calculé automatique, mais il peut être donné manuellement. Dans d'un cercle, il doit valoir la moitié du diamètre. Si c'est une barre, il doit valeur la valeur minimale entre la moitié de la largeur ou celle de la longueur.

8.2 Choix des critères AMR

Une fois ces paramètres définis, les critères de détection des quantités d'intérêt doivent être définis et paramétrés. À ce jour et pour les cas de propagation de flamme turbulente dans des milieux confinés et obstrués, les critères présentés en Section 4.3.1 et Section 4.4.3 sont recommandés, de par leur formulation générique et leur robustesse. Il existe néanmoins d'autres critères, basés sur la vorticité ou le dégagement de chaleur, qui peuvent

être utilisés dans certains cas particuliers.

Une fois ces critères définis, il faut choisir la méthode de déclenchement d'adaptation de maillage. Encore une fois, la méthode de déclenchement proposée en Section 4.3.2 est recommandée de par sa forte robustesse et sa généricité.

8.3 Procédure automatique d'initialisation

Une fois ces paramètres choisis, la simulation avec AMR peut démarrer. Cependant, comme pour toute simulation 3D en CFD, un maillage et une solution initiale doivent être donnés en entrée. Le maillage généré initialement est souvent l'une des phases les plus critiques et les plus chronophages pour les utilisateurs. Dans le cas d'une simulation utilisant l'AMR dans AVBP, la génération de ce maillage initial est automatisée et simplifiée pour permettre un gain de temps, mais également pour s'assurer d'avoir un maillage parfaitement adapté à la solution initiale. La procédure d'adaptation de maillage, pour un cas d'interaction flamme-vortex en 2D avec un épaississement cible de $\mathcal{F} = 60$ dans la flamme, est présentée en Fig. 8.1.

La première adaptation de maillage est réalisée en 6 étapes et permet de démarrer la simulation à partir d'une solution initialisée sur un maillage parfaitement adapté. L'étape (1) correspond au départ de l'adaptation. Le maillage donné par l'utilisateur en entrant, ici largement déraffiné, est lu. Lors de l'étape (2), la solution donnée en entrée est initialisée sur ce même maillage. Ici, on vient initialiser un profil de flamme plane au centre du domaine, ainsi qu'un vortex isentropique du côté des gaz frais (gauche). La résolution fixée dans la flamme et le nombre de cellules dilatées autour du champ unitaire de masque de métrique mènent à une superposition des champs de masques de métrique de flamme (rouge) et de vortex (bleu). Comme rappelé dans la Section 4.4.3, le masque de métrique totale correspond à l'union des champs de masque de métrique de flamme et de vortex. Ainsi, lors de la première adaptation de maillage, en étape (3), la surface de la zone maillée finement correspond à celle de l'union des zones rouge et bleue. Après cette adaptation, une nouvelle initialisation est effectué sur ce maillage partiellement adapté. On constate alors que la zone maillée finement est trop importante et que le maillage initial n'est pas parfaitement adapté à cette solution. Une nouvelle étape d'adaptation est alors déclenchée

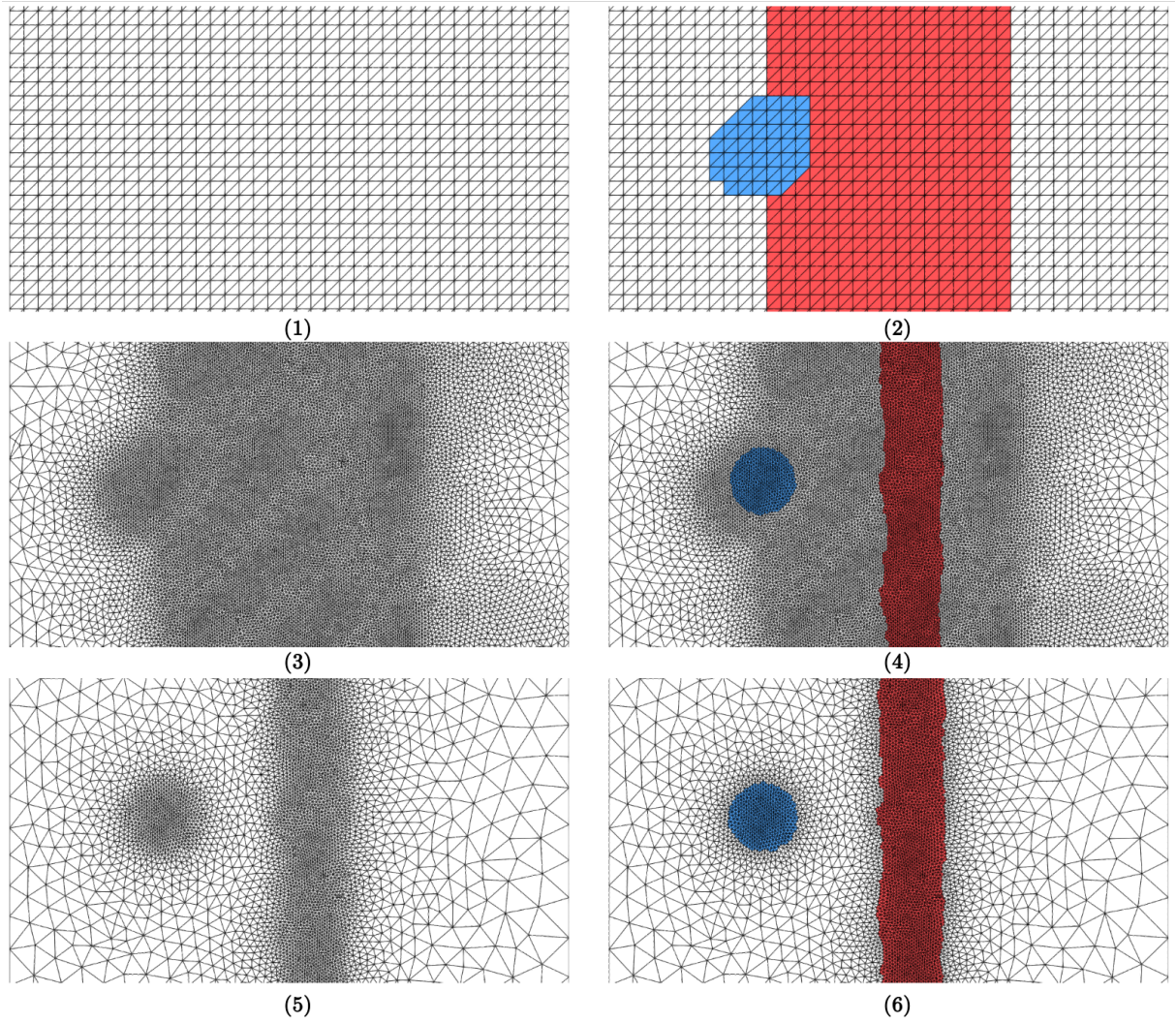


FIGURE 8.1 – Exemple des 6 étapes d'adaptation initiale de maillage pour un cas d'interaction flamme/vortex. Départ du premier maillage non adapté à la solution initiale jusqu'au maillage final adapté. Les trois maillages sont montrés dans la colonne de gauche et les champs de masque de métrique utilisés pour cibler les QoI sont présentés dans la colonne de droite (flamme = rouge ; vortex = bleu).)

(5) et cette fois, la solution initialisée sur ce maillage (6) est parfaitement comprise dans les zones raffinées. Les champs de vorticité et de facteur d'épaississement obtenu sur le maillage en entrée et ceux obtenus sur le maillage final adapté sont comparés en Fig. 8.2.

Dans le cas du maillage déraffiné donné en entrée, le facteur d'épaississement obtenu ($\mathcal{F} = 300$) est largement plus grand que celui demandé ($\mathcal{F} = 60$). De plus, le champ de vorticité n'est pas correctement résolu de par la grande taille de maille. Au contraire, ces deux grandeurs sont correctement obtenues à la fin de la procédure initiale d'adaptation de maillage. Cette étape d'initialisation du maillage adapté est très peu coûteuse et permet à

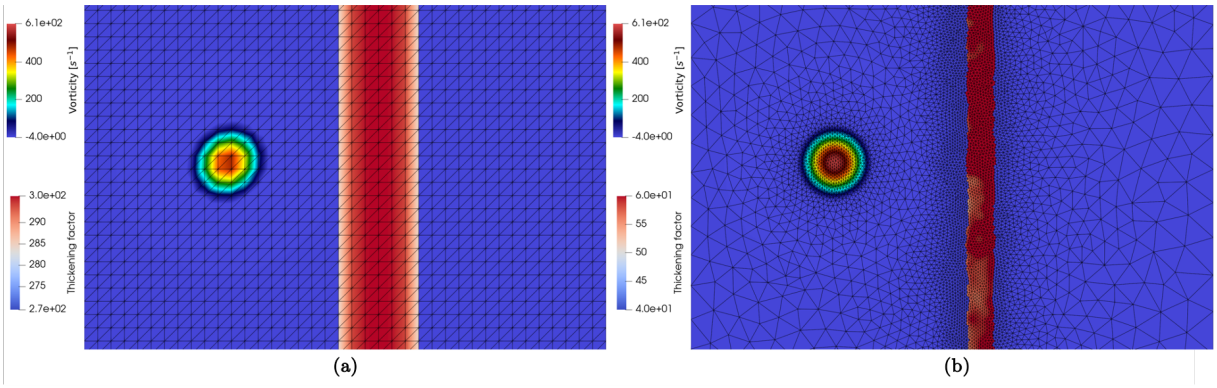


FIGURE 8.2 – Comparaison des champs de vorticité et de facteur d'épaississement de flamme pour le maillage donné en entrée (gauche) et le maillage final adapté à la solution initiale (droite).

l'utilisateur d'économiser un temps considérable lors de la confection du maillage initial, notamment pour des géométries plus complexes. De plus, elle est robuste et permet de s'assurer d'une initialisation correcte et a été vérifiée et validée sur des cas 3D ayant des géométries complexes.

8.4 Optimisation et post-traitement

À la suite de cette procédure, la simulation temporelle est lancée et les adaptations de maillage vont se déclencher automatiquement jusqu'à la fin du calcul. Afin de s'assurer d'une efficacité optimale de l'adaptation de maillage, le nombre de cœurs utilisés ne doit pas être trop grand et pour les cas 3D, la condition de 1000 cellules par cœurs permet de rester dans de bonnes gammes d'efficacité. Une fois le calcul terminé, il est possible d'obtenir des statistiques et des résultats concernant l'adaptation de maillage. Un outil a été codéveloppé avec F. A. Meziat Ramirez au cours de cette thèse et permet de sortir un grand nombre de diagnostics sur l'évolution du maillage et sur la performance de l'AMR, présentés respectivement en Fig. 8.3 et en Fig. 8.4 pour 3 des cas présentés en Section 5.4. Ces diagnostics permettent ensuite de vérifier l'évolution du nombre de cellules, du coût de calcul et de l'efficacité de l'AMR pour converger, rapidement et de façon peu onéreuse, vers un maillage adapté.

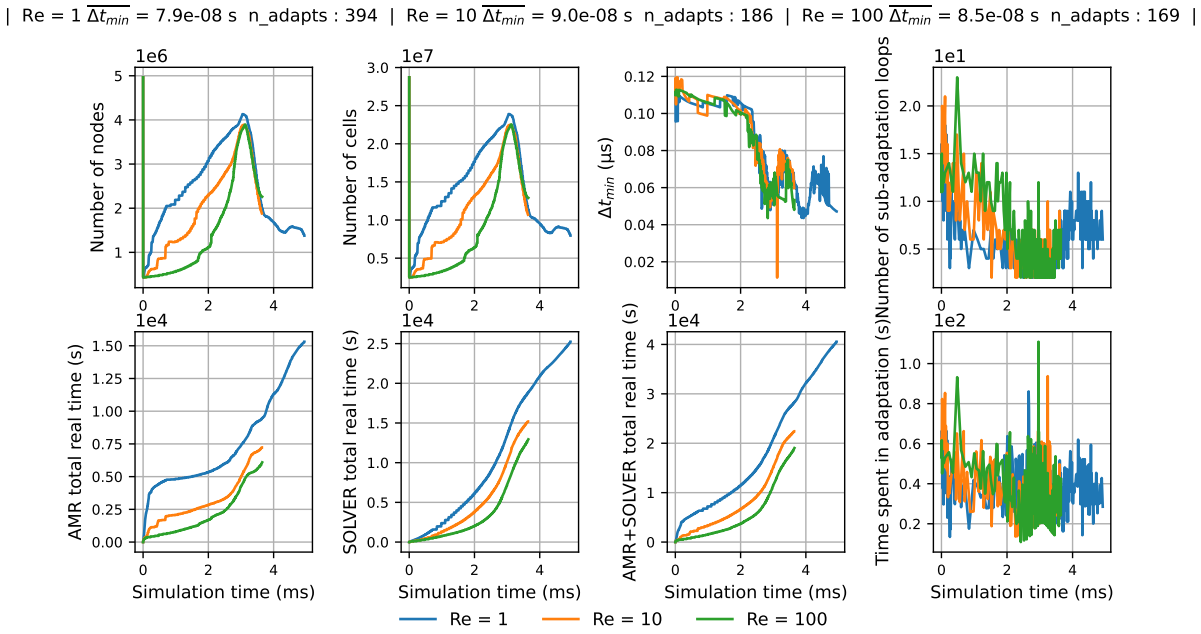


FIGURE 8.3 – Différents diagnostics disponibles pour suivre les statistiques et l'évolution temporelle des paramètres de l'adaptation de maillage. Au-dessus et de gauche à droite : Pas de temps minimum moyen et nombre total d'adaptations de maillage pour chaque cas. Sur la ligne du haut et de gauche à droite : nombre de nœuds du maillage, nombre de mailles du maillage, pas de temps minimum et nombre de sous-adaptations à chaque adaptation de maillage. Sur la ligne du bas et de gauche à droite : coût de calcul de l'AMR uniquement, coût de calcul du solveur uniquement, coût de calcul total et temps passé à chaque adaptation de maillage.

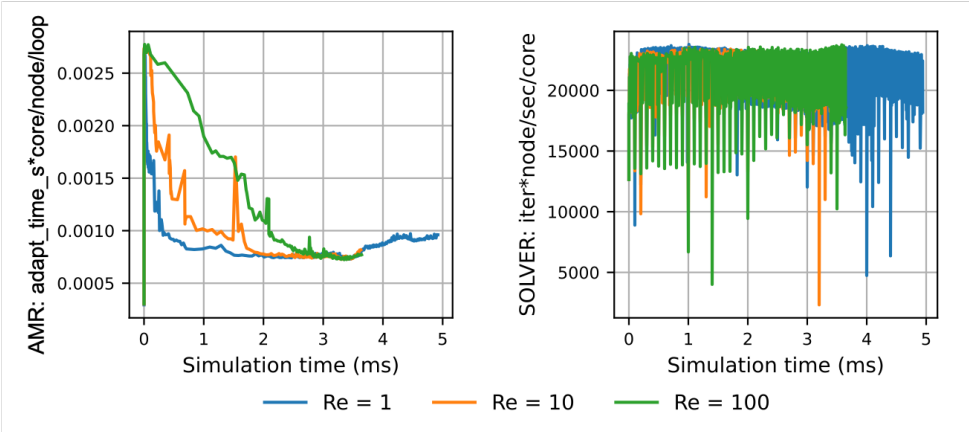


FIGURE 8.4 – Différents diagnostics disponibles pour suivre l'évolution des performances de l'adaptation de maillage. Coût total de l'algorithme AMR pour chaque adaptation de maillage, normalisée par le nombre de nœuds et d'étape de sous-adaptations (gauche). Nombre total d'itérations effectué par l'algorithme du solveur normalisé par le temps et le nombre de cœurs.

Bibliographie

[1] F. Alauzet et al. “3D transient fixed point mesh adaptation for time-dependent problems : Application to CFD simulations”. In : Journal of Computational Physics 222 (2 2007), p. 592-623.

[2] F. Alauzet et al. “Transient fixed point-based unstructured mesh adaptation”. In : International Journal for Numerical Methods in Fluids 43 (6-7 2003), p. 729-745.

[3] V. A. Alekseev, M. Christensen et A. Konnov. “The effect of temperature on the adiabatic burning velocities of diluted hydrogen flames : A kinetic study using an updated mechanism”. In : Combustion and Flame 162 (5 2015), p. 1884-1898.

[4] C. Angelberger et al. “Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames”. In : Proceedings of the summer program. Citeseer. 1998, p. 61-82.

[5] O. Antepara et al. “Parallel adaptive mesh refinement for large-eddy simulations of turbulent flows”. In : Computers and Fluids 110 (2015), p. 48-61.

[6] B. J. Arntzen. “Modelling of turbulence and combustion for simulation of gas explosions in complex geometries”. Thèse de doct. 1998.

[7] I. Babuska et A. Miller. “A-Posteriori Error Estimates and Adaptive Techniques for the Finite Element Method.” In : Maryland Univ. College Park Inst. for Physical Science and Technology (1981).

[8] J. Bechtold et M. Matalon. “Hydrodynamic and diffusion effects on the stability of spherically expanding flames”. In : Combustion and Flame 67.1 (1987), p. 77-90.

[9] P. Benard et al. “Mesh adaptation for large-eddy simulations in complex geometries”. In : International Journal for Numerical Methods in Fluids 81 (12 2016), p. 719-740.

[10] L. Berger, A. Attili et H. Pitsch. “Intrinsic instabilities in premixed hydrogen flames : parametric variation of pressure, equivalence ratio, and temperature. Part 2 – Non-linear regime and flame speed enhancement”. In : Combustion and Flame 240 (2022), p. 111936.

[11] M. J. Berger et P. Colella. “Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics”. In : Journal of Computational Physics 82 (1 1989), p. 64-84.

[12] M. J. Berger et J. Oliger. “Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations”. In : Journal of Computational Physics 53 (3 1984), p. 484-512.

[13] L. Boeck et al. “Flame propagation across an obstacle : OH-PLIF and 2-D simulations with detailed chemistry”. In : Proceedings of the Combustion Institute 36.2 (2017), p. 2799-2806.

[14] L. Boeck. “Deflagration-to-Detonation Transition and Detonation Propagation in H2-Air Mixtures with Transverse Concentration Gradients”. Thèse de doct. 2015.

[15] L. Boeck et al. “The GraVent DDT database”. In : Shock Waves 26 (2016).

[16] E. Boman et al. “The Zoltan and Isorropia Parallel Toolkits for Combinatorial Scientific Computing : Partitioning, Ordering and Coloring”. In : Scientific Programming 20 (2012), p. 129-150.

[17] A. Brandt. “Multi-level adaptive solutions to boundary value problems”. In : Mathematics of Computation 31 (1977), p. 333-390.

[18] W. B. Bush et F. E. Fendell. “Asymptotic Analysis of Laminar Flame Propagation for General Lewis Numbers”. In : Combustion Science and Technology 1 (1970), p. 421-428.

[19] T. Butler et P. O’Rourke. “A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows”. In : International Symposium on Combustion 16.1 (1977), p. 1503-1515.

[20] V. Bychkov et al. “Flame acceleration in the early stages of burning in tubes”. In : Combustion and Flame 150.4 (2007), p. 263-276.

[21] U. of California at San Diego. “Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications”. 2016.

[22] R. S. Cant et al. “An unstructured adaptive mesh refinement approach for computational fluid dynamics of reacting flows”. In : Journal of Computational Physics 468 (2022), p. 111480.

[23] A. Cates et B. Samuels. “A simple assessment methodology for vented explosions”. In : Journal of Loss Prevention in the Process Industries 4.5 (1991), p. 287-296.

[24] Q. Cazeres. “Analysis and reduction of chemical kinetics for combustion applications”. Thèse de doct. 2021.

[25] A. Cellier. “Simulation aux Grandes Echelles de Feux de Batteries Lithium-ion pour le Diagnostic de l’Emballement Thermique”. 2023INPT0072. Thèse de doct. 2023.

[26] F. Charlette, C. Meneveau et D. Veynante. “A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part II : dynamic formulation”. In : Combustion and Flame 131 (1 2002), p. 181-197.

[27] G. Ciccarelli et S. Dorofeev. “Flame acceleration and transition to detonation in ducts”. In : Progress in Energy and Combustion Science 34.4 (2008), p. 499-550.

[28] G. Ciccarelli, C. T. Johansen et M. Parravani. “The role of shock-flame interactions on flame acceleration in an obstacle laden channel”. In : Combustion and Flame 157 (11 2010), p. 2125-2136.

[29] P. Clavin. “Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows”. In : Progress in Energy and Combustion Science 11 (1985), p. 1-59.

[30] P. Clavin et F. A. Williams. “Multidimensional stability analysis of gaseous detonations near Chapman–Jouguet conditions for small heat release”. In : Journal of Fluid Mechanics 624 (2009), p. 125-150.

[31] Clavin, P. et Joulin, G.. “Premixed flames in large scale and high intensity turbulent flow”. In : Journal de Physique Lettres. 44.1 (1983), p. 1-12.

[32] O. Colin. “Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs.” Thèse de doct. INP Toulouse, 2000.

[33] O. Colin et M. Rudgyard. “Development of High-Order Taylor-Galerkin Schemes for LES”. In : Journal of Computational Physics 162 (2 2000), p. 338-371.

[34] O. Colin et al. “A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion”. In : Physics of Fluids 12 (7 2000), p. 1843-1863.

[35] E. Commission. “Proposal for a regulation of the european parliament and of the council on ensuring a level playing field for sustainable air transport”. In : (2021).

[36] J. Dannenhoffer et J. Baron. “Grid adaptation for the 2-D Euler equations”. In : 23rd Aerospace Sciences Meeting (1985).

[37] C. Dapogny, C. Dobrzynski et P. Frey. “Three-dimensional adaptive domain remeshing, implicit domain meshing, and applications to free and moving boundary problems”. In : Journal of Computational Physics 262 (2014), p. 358-378.

[38] J. Daubech et al. “Hydrogen-air vented explosions : new experimental data”. In : Proceedings of 5th International Conference on Hydrogen Safety (2013), p. 37-49.

[39] G. Daviller et al. “A Mesh Adaptation Strategy to Predict Pressure Losses in LES of Swirled Flows”. In : Flow, Turbulence and Combustion 99 (1 2017), p. 93-118.

[40] C. Dobrzynski et P. Frey. “Anisotropic Delaunay Mesh Adaptation for Unsteady Simulations”. In : Proceedings of the 17th International Meshing Roundtable (2008), p. 177-194.

[41] X. Dong et al. “Determination of epsilon for Omega vortex identification method”. In : Journal of Hydrodynamics 30 (4 2018), p. 541-548.

[42] O. Dounia. “Etudes des phénomènes d’accélération de flammes, transition à la détonation et d’inhibition de flammes”. Thèse de doct. INP Toulouse, 2018.

[43] F. Dynamics. Turbulence. `https://firedynamics.github.io/LectureFireSimulation/content/modelling/02_fluids/03_turbulence.html`. Consulté le 27 juin 2024.

[44] B. FIORINA et al. “A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion”. In : Combustion and Flame 157 (2010).

[45] B. G. Franzelli. “Impact of the chemical description on direct numerical simulations and large eddy simulations of turbulent combustion in industrial aeroengines”. Thèse de doct. INP Toulouse, 2011.

[46] B. Franzelli et al. “A Two-step Chemical Scheme for Kerosene–Air Premixed Flames”. In : Combustion and Flame 157 (2010), p. 1364-1373.

[47] P. Frey et P. George. “Mesh Generation : Application to Finite Elements : Second Edition”. In : Mesh Generation : Application to Finite Elements : Second Edition (2008).

[48] J. Gaucherand. “Direct Numerical Simulation of premixed ammonia/hydrogen flames : the effects of thermo-diffusive instabilities”. Thèse de doct. 2023.

[49] L. Y. M. Gicquel et al. “Calcul parallèle haute performance des écoulements en géométries complexes”. In : Comptes Rendus - Mecanique 339 (2-3 2011), p. 104-124.

[50] V. Giovangigli. Multicomponent Flow Modeling. 1999.

[51] D. G. Goodwin, H. K. Moffat et R. L. Speth. Cantera : An Object-oriented Software Toolkit. 2017.

[52] X. J. Gu et al. “Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane–air mixtures”. In : Combustion and Flame 121 (1 2000), p. 41-58.

[53] O. L. Gülder et G. J. Smallwood. “Inner cutoff scale of flame surface wrinkling in turbulent premixed flames”. In : Combustion and Flame 103 (1-2 1995), p. 107-114.

[54] P. Haldenwang et D. Pignol. “Dynamically adapted mesh refinement for combustion front tracking”. In : Computers and Fluids 31 (4 2002), p. 589-606.

[55] A. Harten. “Multiresolution algorithms for the numerical solution of hyperbolic conservation laws”. In : Communications on Pure and Applied Mathematics 48.12 (1995), p. 1305-1342.

[56] A. Harten. “Multiresolution algorithms for the numerical solution of hyperbolic conservation laws”. In : Communications on Pure and Applied Mathematics 48 (2010), p. 1305-1342.

[57] D. Hartmann, M. Meinke et W. Schröder. “An adaptive multilevel multigrid formulation for Cartesian hierarchical grid methods”. In : Computers and Fluids 37 (9 2008), p. 1103-1125.

[58] Q. Hassan et al. “Green hydrogen : A pathway to a sustainable energy future”. In : International Journal of Hydrogen Energy 50 (2024), p. 310-333.

[59] J. Hasslberger, L. Boeck et T. Sattelmayer. “Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition in large confined volumes”. In : Journal of Loss Prevention in the Process Industries 36 (2014), p. 371-379.

[60] J. Hasslberger, P. Katzy et T. Sattelmayer. “On the Effect of Pressure on Intrinsic Flame Instabilities in Lean Hydrogen-Air Mixtures – Part I : Detailed Chemistry Based Direct Numerical Simulation”. In : 26th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (2017).

[61] Health et S. Executive. “The effects of explosions in the process industries”. In : Loss Prevention Bulletin 68 (1986), p. 37-47.

[62] J. O. Hirschfelder, C. F. . Curtiss et R. B. Bird. Molecular Theory Of Gases And Liquids. 1954.

[63] B. H. Hjertager. “Simulation of Transient Compressible Turbulent Reactive Flows”. In : Combustion Science and Technology 27.5-6 (1982), p. 159-170.

[64] J.-J. Hok. “Stratégie de modélisation pour la simulation aux grandes échelles d’explosions de mélanges hydrogène-air pauvres”. Thèse de doct. 2024.

[65] J. C. R. Hunt et al. “Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows”. In : Studying Turbulence Using Numerical Simulation Databases, 1998. (1988).

[66] L. Iapichino et al. “Hydrodynamical adaptive mesh refinement simulations of turbulent flows – I. Substructure in a wind”. In : Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 388 (3 2008), p. 1079-1088.

[67] R. Janodet et al. “A massively parallel accurate conservative level set algorithm for simulating turbulent atomization on adaptive unstructured grids”. In : Journal of Computational Physics 458 (2022), p. 111075.

[68] T. Jaravel. “Prediction of pollutants in turbines using large eddy simulation”. Thèse de doct. INP Toulouse, 2016.

[69] J. Jeong et F. Hussain. “On the identification of a vortex”. In : Journal of Fluid Mechanics 285 (1995), p. 69-94.

[70] C. Johansen et G. Ciccarelli. “Modeling the initial flame acceleration in an obstructed channel using large eddy simulation”. In : Journal of Loss Prevention in the Process Industries 26.4 (2013), p. 571-585.

[71] J.-C. Jouhaud, M. Montagnac et L. Tourrette. “A multigrid adaptive mesh refinement strategy for 3D aerodynamic design”. In : International Journal for Numerical Methods in Fluids 47 (5 2005), p. 367-385.

[72] S. Kamkar et al. “Feature-Driven Adaptive Mesh Refinement in the Helios Code”. In : 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting (2010).

[73] G. Karypis et V. Kumar. “Parallel Multilevel k-way Partitioning Scheme for Irregular Graphs”. In : Journal of Parallel and Distributed Computing 48 (1996), p. 35-35.

[74] P. Katzy et al. “The Effect of Intrinsic Instabilities on Effective Flame Speeds in Under-Resolved Simulations of Lean Hydrogen–Air Flames”. In : Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science 3 (4 2017).

[75] S. Kawai et S. K. Lele. “Localized Artificial Diffusivity Scheme for Discontinuity Capturing on Curvilinear Meshes”. In : J. Comput. Phys. 227.22 (2008), p. 9498-9526.

[76] J. E. Kent et al. “A new chamber to study premixed flame propagation past repeated obstacles”. In : 5th Asia-Pacific conference on combustion (2005), p. 17-20.

[77] A. M. Khokhlov, E. S. Oran et G. O. Thomas. “Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition : the role of shock–flame interactions in turbulent flames”. In : Combustion and Flame 117 (1 1999), p. 323-339.

[78] B. Kirk et al. “libMesh : A C++ Library for Parallel Adaptive Mesh Refinement/Coarsening Simulations”. In : Engineering with Computers 22 (2006), p. 237-254.

[79] A. Kolmogorov. “The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds’ Numbers”. In : Akademiia Nauk SSSR Doklady 30 (1941), p. 301-305.

[80] A. A. Konnov et al. “A comprehensive review of measurements and data analysis of laminar burning velocities for various fuel+air mixtures”. In : Progress in Energy and Combustion Science 68 (2018), p. 197-267.

[81] P. E. Lapenna et al. “Hydrogen Laminar Flames”. In : Hydrogen for Future Thermal Engines. Cham : Springer International Publishing, 2023, p. 93-139.

[82] C. Lapointe et al. “Efficient simulation of turbulent diffusion flames in OpenFOAM using adaptive mesh refinement”. In : Fire Safety Journal 111 (2020), p. 102934.

[83] P. Lax et B. Wendroff. “Systems of conservation laws”. In : Communications on Pure and Applied Mathematics 13 (2 1960), p. 217-237.

[84] L. Lecointre. “Hydrogen flame acceleration in non-uniform mixtures”. Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 2022.

[85] J. P. Legier, T. Poinsot et D. Veynante. “Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion”. In : Proceedings of the Summer Program, Centre for Turbulence Research (2000), p. 157-168.

[86] G. Linteris. Limits to the Effectiveness of Metal-Containing Fire Suppressants. en. 2004.

[87] C. Liu et al. “New omega vortex identification method”. In : Science China : Physics, Mechanics and Astronomy 59 (8 2016).

[88] T. Mantel et R. Borghi. “A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation”. In : Combustion and Flame 96.4 (1994), p. 443-457.

[89] A. R. Masri et al. “A comparative study of turbulent premixed flames propagating past repeated obstacles”. In : Industrial and Engineering Chemistry Research 51 (22 2012), p. 7690-7703.

[90] M. Matalon. “The Darrieus–Landau instability of premixed flames”. In : Fluid Dynamics Research 50.5 (2018), p. 051412.

[91] M. Matalon et B. J. Matkowsky. “Flames as gasdynamic discontinuities”. In : Journal of Fluid Mechanics 124 (1982), p. 239-259.

[92] B. M. Maxwell. “Turbulent Combustion Modelling of Fast-Flames and Detonations using Compressible LEM-LES”. Thèse de doct. University of Ottawa, 2016.

[93] C. Mehl, S. Liu et O. Colin. “A Strategy to Couple Thickened Flame Model and Adaptive Mesh Refinement for the LES of Turbulent Premixed Combustion”. In : Flow, Turbulence and Combustion 107 (4 2021), p. 1003-1034.

[94] C. Mehl et al. “LES of a stratified turbulent burner with a Thickened Flame Model coupled to Adaptive Mesh Refinement and detailed chemistry”. In : 2018 Joint Propulsion Conference (2018).

[95] M. Metghalchi et J. C. Keck. “Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure”. In : Combustion and Flame 38 (1980), p. 143-154.

[96] P. Mohanamuraly et G. Staffelbach. “Hardware Locality-Aware Partitioning and Dynamic Load-Balancing of Unstructured Meshes for Large-Scale Scientific Applications”. In : Proceedings of the Platform for Advanced Scientific Computing Conference (2020), p. 1-10.

[97] V. Moureau. “Large-eddy simulation of piston-engine flows”. Thèse de doct. Ecole Centrale de Paris, 2004.

[98] F. Nicoud et F. Ducros. “Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor”. In : Flow, Turbulence and Combustion 62 (3 1999), p. 183-200.

[99] C. Pang et al. “Enhanced adaptive mesh refinement method using advanced vortex identification sensors in wake flow”. In : Aerospace Science and Technology 115 (2021), p. 106796.

[100] N. Peters. Turbulent Combustion. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 2000.

[101] T. Poinsot et S. K. Lele. “Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows”. In : Journal of Computational Physics 101 (1 1992), p. 104-129.

[102] T. Poinsot et D. Veynante. Theoretical and numerical combustion - Third Edition. 2011, 603 pages.

[103] T. Poinsot, D. Veynante et S. Candel. “Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams”. In : Journal of Fluid Mechanics 228 (1991), p. 561-606.

[104] K. Pons et al. “Adaptive mesh refinement method. Part 2 : Application to tsunamis propagation”. 2016.

[105] S. B. Pope. Turbulent flows. Cambridge University Press, 2000.

[106] D. Pritchard, D. Freeman et P. Guilbert. “Prediction of explosion pressures in confined spaces”. In : Journal of Loss Prevention in the Process Industries 9.3 (1996), p. 205-215.

[107] P. Quillatre. “Simulation aux grandes échelles d’explosions en domaine semi-confiné”. Thèse de doct. INP Toulouse, 2014.

[108] P. Quillatre et al. “Large Eddy Simulation of Vented Deflagration”. In : Industrial and Engineering Chemistry Research 52 (33 2013), p. 11414-11423.

[109] G. Rios, N. Nigro et M. Storti. “An H-adaptive unstructured mesh refinement strategy for unsteady problems”. In : Latin American Applied Research 39 (2009), p. 137-143.

[110] H. Ritchie, P. Rosado et M. Roser. “Energy Production and Consumption”. In : Our World in Data (2024). https ://ourworldindata.org/energy-production-consumption.

[111] W. L. Roberts et al. “Images of the quenching of a flame by a vortex—To quantify regimes of turbulent combustion”. In : Combustion and Flame 94 (1-2 1993), p. 58-69.

[112] S. Sengupta. “Advanced methods for meshes in high performance computing of explosion simulations”. Thèse de doct. INP Toulouse, 2023.

[113] J. Smagorinsky. “General Circulation Experiments with the Primitive Equations”. In : Monthly Weather Review 91.3 (1963), p. 99.

[114] G. P. Smith et al. “Gri-Mesh 3.0 mechanism”. 2024.

[115] S. C. Spiegel, H. T. Huynh et J. R. Debonis. “A survey of the isentropic euler vortex problem using high-order methods”. In : 22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference (2015), p. 1-21.

[116] W. Sutherland. “LII. The viscosity of gases and molecular force”. In : The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 36.223 (1893), p. 507-531.

[117] C. Tenaud et M. Duarte. “Tutorials on Adaptive multiresolution for mesh refinement applied to fluid dynamics and reactive media problems”. In : ESAIM Proceedings 34 (2011).

[118] J. Thije Boonkkamp, ten, R. Rook et R. Mattheij. “A multi-level local defect correction technique for laminar flame simulation”. English. In : Technische Universiteit Eindhoven. CASA-report (2007).

[119] S. Toosi et J. Larsson. “Towards systematic grid selection in LES : Identifying the optimal spatial resolution by minimizing the solution sensitivity”. In : Computers and Fluids 201 (2020), p. 104488.

[120] A. C. Van den Berg. “Reagas : A Code for Numerical Simulation of Reactive Gas Dynamics in Gas Explosions”. In : TNO Prins Maurits Laboratory (1989).

[121] B. Vanbersel et al. “Large Eddy Simulations of a hydrogen-air explosion in an obstructed chamber using adaptive mesh refinement”. In : 10th International Conference on Hydrogen Safety (2023).

[122] B. Vanbersel et al. “A systematic Adaptive Mesh Refinement method for Large Eddy Simulation of turbulent flame propagation”. In : Flow, Turbulence and Combustion (2024).

[123] A. Verhaeghe et al. “Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion using Adaptive Mesh Refinement in a typical Micro GasTurbine Combustor”. In : Société Française de Thermique (2022).

[124] O. Vermorel, P. Quillatre et T. Poinsot. “LES of explosions in venting chamber : A test case for premixed turbulent combustion models”. In : Combustion and Flame 183 (2017), p. 207-223.

[125] D. Veynante et L. Vervisch. “Turbulent combustion modeling”. In : Progress in Energy and Combustion Science 28.3 (2002), p. 193-266.

[126] P. S. Volpiani et al. “Large eddy simulation of explosion deflagrating flames using a dynamic wrinkling formulation”. In : Combustion and Flame 186 (2017), p. 17-31.

[127] J. K. Watterson et al. “A solution-adaptive mesh procedure for predicting confined explosions”. In : International Journal for Numerical Methods in Fluids 26.2 (1998), p. 235-247.

[128] T. Weinzierl et M. Mehl. “Peano - A Traversal and Storage Scheme for Octree-Like Adaptive Cartesian Multiscale Grids.” In : SIAM Journal on Scientific Computing 33 (2011), p. 2732-2760.

[129] H. Wilkening et T. Huld. “An adaptive 3-D CFD solver for modeling explosions on large industrial environmental scales”. In : Combustion Science and Technology 149 (1-6 1999), p. 361-387.

[130] F. A. Williams. “Combustion theory : the fundamental theory of chemically reacting flow systems.” In : Westview Press (1985).

[131] H. Xiao et E. Oran. “Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in hydrogen-air mixture in a channel with an array of obstacles of different shapes”. In : Combustion and Flame 220 (2020), p. 378-393.

[132] S. Zeoli et al. “Large eddy simulation of wind turbine wakes using adaptative mesh refinement”. In : Journal of Physics : Conference Series 1618 (6 2020), p. 62056.

[133] W. Zhang et al. “AMReX : a framework for block-structured adaptive mesh refinement”. In : Journal of Open Source Software 4 (2019), p. 1370.

RÉPUBLIQUE FRANÇAISE
Liberté
Égalité
Fraternité

Université de Toulouse

Titre : Méthodes de raffinement de maillage automatique pour la simulations aux grandes échelles d'explosions de gaz.

Mots clés : Explosion de gaz, Remaillage, AMR, LES, Adaptatif

Résumé : La demande d'énergie ne cesse d'augmenter et est en grande partie obtenue grâce à la combustion, avec des carburants d'origine fossile ou renouvelable. Ces carburants, souvent stockés dans des environnements clos, présentent un danger en cas de fuite. En effet, l'inflammation d'un nuage de gaz pré-mélangé peut entraîner une explosion, provoquant une propagation rapide d'un front de flamme et générant des surpressions dangereuses pour les personnes et les infrastructures. Pour comprendre et prévenir ces explosions, diverses expérimentations sont menées, allant des tests en laboratoire aux simulations à l'échelle industrielle. Toutefois, les conditions extrêmes de température et de pression rendent les diagnostics précis difficiles à obtenir expérimentalement.
La simulation numérique, notamment la simulation aux grandes échelles (LES) permet de compléter ces expérimentations en offrant une meilleure compréhension des phénomènes de combustion et de turbulence. La simulation LES a déjà prouvé son efficacité pour reproduire la dynamique des déflagrations et les surpressions associées dans des domaines de petite taille. Elle permet également des diagnostics précis à chaque point du domaine de calcul. Cependant, les grandes dimensions des installations industrielles posent des défis pour la résolution numérique complète des phénomènes physiques en jeu. La discrétisation homogène de tout le domaine de calcul serait trop coûteuse en termes de temps et de ressources. Ainsi, l'adaptation de maillage, particulièrement l'adaptation dynamique, est utilisée pour affiner la discrétisation dans les zones d'intérêt qui évoluent au fil du calcul. Cette technique permet de réduire la taille des maillages et les coûts de calcul en suivant les phénomènes d'intérêt prédéfinis durant leur propagation.
Les travaux de cette thèse se concentrent sur le développement et la validation d'une méthode de raffinement adaptatif de maillage (AMR) pour les simulations LES des déflagrations, basée sur des critères physiques instantanés jouant un rôle important dans les explosions. La méthode proposée, nommée « Turbulent Flame Propagation-AMR » (TFP-AMR), reproduit la dynamique transitoire des flammes turbulentes et des structures tourbillonnaires dans l'écoulement et utilise la bibliothèque AMR non structurée kalpaTARU. Elle repose sur des critères dérivés des caractéristiques physiques des déflagrations, limitant la dépendance aux paramètres utilisateur. Un critère de sélection des vortex, issu de la théorie d'interaction flamme/vortex, et un critère spécifique d'adaptation de maillage sont développés pour garantir que les zones d'intérêt demeurent toujours dans une région de maillage raffiné tout au long du processus transitoire. La méthodologie est validée sur des cas élémentaires représentant des composantes fondamentales du problème, tels que la propagation de flamme, la propagation de vortex et l'interaction flamme-vortex.
Enfin, la méthode est appliquée à des configurations de déflagrations, d'abord dans une chambre obstruée semi-confinée, puis dans un canal obstrué entièrement confiné, avec diverses variations paramétriques concernant la géométrie de la chambre et les propriétés du mélange initial. Dans ces configurations, la déflagration peut atteindre des régimes rapides, avec des formations d'ondes de choc en amont du front de flamme. Les comparaisons entre expériences et simulations démontrent que la méthode TFP-AMR obtient des résultats précis à un coût de calcul inférieur par rapport aux simulations de référence maillages statiques, en nécessitant que peu d'ajustement de paramètres, validant ainsi la robustesse et l'efficacité de la méthode pour ce type d'application.

Title: Adaptive mesh refinement methods for large eddy simulations of gas explosions.

Key words: Gas explosion, Refinement, AMR, LES, Adaptive

Abstract: The global energy demand continues to rise, and is largely met through combustion, using fossil or renewable fuels. These fuels, often stored in enclosed environments, pose a significant hazard in the event of a leak. The ignition of a premixed gas cloud can lead to an explosion, causing rapid flame front propagation and generating dangerous overpressures that threaten both human life and infrastructure integrity. To understand and prevent these explosions, various experiments are conducted, ranging from laboratory tests to industrial-scale simulations. However, extreme conditions of temperature and pressure make it challenging to obtain accurate diagnostics experimentally.
Numerical simulation, especially Large Eddy Simulation (LES), complements these experiments by providing a better understanding of combustion and turbulence phenomena at stake. LES has already proven effective in replicating the dynamics of deflagrations and the associated overpressures in small domains. It also allows for precise diagnostics at every point within the computational domain. However, the large dimensions of industrial installations raise challenges for a complete numerical resolution of the physical phenomena involved. An homogeneous discretisation of the entire computational domain would be too costly in terms of return time and computational resources. Therefore, mesh adaptation, particularly dynamic adaptation, is used to refine the discretisation in regions of interest that evolve during the calculation. This technique helps reduce mesh size and computational costs by tracking predefined phenomena of interest during their propagation.
This thesis focuses on the development and validation of an adaptive mesh refinement (AMR) method for LES simulations of deflagrations, based on instantaneous physical criteria relevant to explosions. The proposed method, called "Turbulent Flame Propagation-AMR" (TFP-AMR), reproduces the transient dynamics of turbulent flames and vortical structures in the flow, and relies on the unstructured AMR library kalpaTARU. The method relies on criteria derived from the physical characteristics of deflagrations, minimising reliance on user-dependent parameters. In particular, a vortex selection criterion is derived from flame/vortex interaction theory. A specific mesh adaptation triggering criterion is also developed to ensure that regions of interest remain within a refined mesh zone throughout the transient propagation process.
The methodology is validated on fundamental cases representative of the essential physical bricks of the problem, such as flame propagation, vortex propagation, and flame-vortex interaction. Finally, the method is applied to deflagration configurations. A semi-confined obstructed chamber is first considered, with extensive parametric variations regarding the chamber geometry and the initial mixture properties. A fully confined obstructed channel is then considered, where deflagration can reach high-speed regimes with shock waves forming ahead of the flame front. Comparisons between experimental and simulation results demonstrate that the TFP-AMR method achieves accurate results at a lower computational cost compared to static mesh reference simulations, while requiring minimal parameter adjustments. These application cases validate the method robustness and effectiveness for such applications.