HAL
open science

SIMULATION DES GRANDES ECHELLES ET INSTABILITES DE COMBUSTION

Ghislain Lartigue

To cite this version:

Ghislain Lartigue. SIMULATION DES GRANDES ECHELLES ET INSTABILITES DE COMBUSTION. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse), 2004. Français. NNT : . tel-02138335

HAL Id: tel-02138335

https://hal.science/tel-02138335v1

Submitted on 29 May 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mémoire de thèse

présenté pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Spécialité: Dynamique des Fluides

par

Ghislain Lartigue

Sous la direction de **Thierry Poinsot**.

SIMULATION DES GRANDES ECHELLES ET INSTABILITES DE COMBUSTION

Soutenue le 16 novembre 2004 devant le jury composé de:

D. Veynante	Directeur de Recherche à l'EM2C	Rapporteur
P. Comte	Directeur de Recherche à l'IMF de Strasbourg	Rapporteur
V. Giovangigli	Directeur de Recherche au CNRS	Examinateur
T. Poinsot	Directeur de Recherche à l'IMF de Toulouse	Examinateur
F. Ducros	Docteur, ingénieur au CEA	Examinateur
D. Bissières	Docteur, ingénieur à Turboméca	Examinateur

Résumé:

Les nouvelles réglementations européennes sur les émissions de polluants imposent des contraintes de plus en plus strictes aux motoristes. C'est notamment le cas pour les constructeurs de turbines à gaz qui doivent désormais concevoir des moteurs fonctionnant avec un mélange très pauvre en carburant afin de respecter ces consignes. Les émissions polluantes sont ainsi réduites mais un nouveau problème apparaît alors: celui de la stabilité de la combustion. En effet, les régimes de combustion présentant un fort excès d'air sont naturellement plus sensibles aux instabilités de combustion. La prédiction numérique de ces phénomènes d'instabilités est donc au centre des préoccupations de nombreux industriels.

Le travail présenté dans ce mémoire de thèse propose de démontrer que de nouveaux outils numériques sont désormais capables de prédire ces instabilités de combustion. Notamment, la méthode de *Simulation aux Grandes Echelles*, implémentée dans un code de calcul compressible permet de prendre en compte les principaux phénomènes impliqués dans les instabilités de combustion tels que l'acoustique et l'interaction entre le front de flamme et une structure tourbillonnaire.

Ce travail de thèse décrit une nouvelle formulation d'un code de Simulation des Grandes Echelles (le code AVBP, développé conjointement par le CERFACS et l'IFP) afin de le rendre capable de modéliser très précisément les phénomènes thermodynamiques et chimiques liés à la combustion. Une validation de ce travail sera présentée dans une géométrie complexe (le foyer PRECCINSTA). Les résultats numériques sont comparés avec succès à des mesures expérimentales effectuées par le DLR Stuttgart (Allemagne). De plus, une analyse approfondie de l'acoustique de la configuration et de son interaction avec la combustion est présentée. Pour cette analyse, un autre code du CERFACS (AVSP) a été utilisé.

Abstract:

The new european laws on pollutants emmission impose more and more constraints to motorists. This is particularly true for gas turbines manufacturers, that must design motors operating with very fuel-lean mixtures. Doing so, pollutants formation is significantly reduced but the problem of combustion stability arises. Actually, combustion regimes that have a large excess of air are naturally more sensitive to combustion instabilities. Numerical predictions of these instabilities is thus a key issue for many industrial involved in energy production.

This thesis work tries to show that recent numerical tools are now able to predict these combustion instabilities. Particularly, the *Large Eddy Simulation* method, when implemented in a compressible CFD code, is able to take into account the main processes involved in combustion instabilities, such as acoustics and flame/vortex interaction.

This work describes a new formulation of a Large Eddy Simulation numerical code that enables to take into account very precisely thermodynamics and chemistry, that are essential in combustion phenomenas. A validation of this work will be presented in a complex geometry (the PRECCINSTA burner). Our numerical results will be succesfully compared with experimental data gathered at DLR Stuttgart (Germany). Moreover, a detailed analysis of the acoutics in this configuration will be presented, as well as its interaction with the combustion. For this acoustics analysis, another CERFACS code has been extensively used, the Helmoltz solver AVSP.

Table des matières

Introduction **3**

1 Définitions, bilans et modèles **9**

1.1 Définitions 9

1.2 Équations de la mécanique des fluides 17

1.3 Filtrage, LES et modèles 26

2 Méthodes numériques **43**

2.1 Principe général d'AVBP 43

2.2 Discrétisation des équations et schémas 47

2.3 Modèles de viscosité artificielle 53

2.4 Traitement de la thermochimie 56

2.5 Les conditions aux limites 58

3 Application à un cas réel: la chambre LabScale **65**

3.1 Le programme PRECCINSTA et la chambre LabScale 65

3.2 Configuration et maillage 77

3.3 Le cas non-réactif 86

3.4 Le cas réactif 126

Conclusion **143**

Bibliographie **145**

Introduction

Le contexte général de cette thèse est la simulation numérique des écoulements réactifs. Plus précisément, il s'agit de développer et de valider un outil pour la Simulation des Grandes Echelles (Large Eddy Simulation ou LES, en anglais) des instabilités de combustion rencontrées dans les foyers de turbines à gaz.

La nature des instabilités de combustion est relativement bien comprise d'un point de vue théorique depuis de nombreuses années: il s'agit d'un couplage entre les ondes acoustiques et le dégagement de chaleur au niveau de la flamme [Rayleigh, 1878][Putnam, 1971][Williams, 1985]. D'autre part, la simulation numérique est devenue aujourd'hui un outil indispensable à l'ingénieur motoriste pour concevoir et développer les foyers des turbines à gaz, mais le phénomène des instabilités de combustion reste encore hors d'atteinte des codes de calcul actuellement à leur disposition. Il est donc toujours nécessaire de procéder à de nombreux et très coûteux tests grandeur nature pour savoir si une chambre de combustion va être stable ou instable.

Il semble donc normal pour les industriels impliqués dans la conception des turbines à gaz de vouloir se munir d'un nouvel outil de simulation numérique permettant d'étudier et de prédire les instabilités de combustion dans des configurations de type foyer. Pour de nombreuses raisons, les méthodes employées aujourd'hui pour la simulation numérique de ces écoulements sont basées sur la formulation RANS (Reynolds Average Navier–Stokes) des équations de la mécanique des fluides. Ces méthodes RANS, robustes et peu coûteuses en temps de calcul, présentent un attrait évident pour les industriels. Elles permettent

en effet de pouvoir effectuer de nombreux calculs et d'obtenir rapidement des tendances en faisant varier certains paramètres. On peut cependant leur reprocher certains défauts, et notamment le fait de produire des résultats moyennés en temps: les calculs effectués avec un méthode RANS sont par nature essentiellement stationnaires. Cela présente deux inconvénients majeurs:

- d'une part, les grandes échelles d'un écoulement turbulent présentent des instationnarités qui se prêtent mal à la modélisation, contrairement aux petites échelles dont le caractère instationnaire apparait comme étant plus universel [Kolmogorov, 1941][Hinze, 1975][Lesieur, 1990][Piquet, 1999][Piomelli, 1996][Sagaut, 2000][Ferziger, 1997 £1357]. C'est cette limitation qui a amené au concept de simulation des grandes échelles.

- d'autre part, la nature très non-linéaire et intermittente de la combustion turbulente s'accomode assez mal du caractère moyenné des solutions RANS [Poinsot, 2001, edwards]. Les modèles de combustion turbulente RANS sont donc assez souvent mis en défaut dès lors que l'écoulement présente un caractère fortement instationnaire.

Ces différents points font que les méthodes RANS sont inadaptées dès lors que l'on s'intéresse aux instabilités de combustion. En revanche, les méthodes LES précédemment évoquées, ont montré leur potentiel pour la modélisation de la turbulence incompressible [Sagaut, 2000], puis de la turbulence compressible [Sarkar, 1991] et enfin de la combustion turbulente, que ce soit dans des codes "bas Mach" [Pierce, 1998 £1352][Mahesh, 2002 £1624][Pitsch, 2002 £1601][Menon, 1993 £1486][Forkel, 2000 £1588] ou complètement compressibles [Colin, 1999 £1327][Selle, 2002 £1629][Lartigue, 2003 £1611]. Cette dernière formulation permet en outre de prendre en compte les équations de l'acoustique, ce qui est essentiel pour la prédiction des instabilités de combustion.

L'objectif de cette thèse est donc de développer et de valider à partir d'un code de calcul déja existant une version adaptée à l'étude et à la prédiction des instabilités de combustion dans les foyers de turbines à gaz.

Pour mieux décrire le travail effectué, il est nécessaire de présenter ici les différentes classes de codes employés en LES pour la combustion et notamment les différences fondamentales qui existent entre ces méthodes. On ne considère ici que les codes qui prennent en compte les variations de densité dues à la combustion.

1. Tout d'abord, certains codes ne cherchent pas à calculer explicitement les termes sources sur les espèces (taux de réaction) et sur l'énergie (dégagement de chaleur) apparaissant dans ces équations. En fait ces équations ne sont pas résolues du tout mais simplement remplacées par des expressions algébriques donnant la fraction massique Y_k de l'espèce k et la température T en fonction d'autres grandeurs résolues par une équation de conservation. Il s'agit en général de la fraction de mélange z (pour les flammes de diffusion) ou de la variable d'avancement c (pour les flammes de prémélange) ou encore des deux variables z et c pour les flammes partiellement prémélangées. Nous appellerons ces codes Codes 'VP' (Codes aux Variables Primitives). On peut résumer le fonctionnement et les propriétés des codes VP de la façon suivante:

   - Les seules variables résolues sont les vitesses u_i, la pression P et une ou deux variables parmi z et c. Ayant z et/ou c, une bibliothèque (basée par exemple sur un calcul séparé de type flammelette) fournit directement les fractions massiques Y_k pour toutes les espèces, ainsi que la température T. Ces valeurs sont alors injectées dans l'équation d'état pour obtenir ρ et l'itération suivante peut avoir lieu.
   - Les codes VP peuvent prendre en compte des chimies complexes puisque la bibliothèque $Y_k(z,c)$ et $T(z,c)$ peut être calculée avec autant de variables que nécessaire. En particulier, le fait de calculer $T(z,c)$ par ces relations algébriques rend de fait le code capable de prendre en compte une thermochimie complexe: la capacité calorifique du mélange C_p, par exemple, est calculée dans la flammelette et est donc fonction de la température et des fractions massiques.
   - Les codes VP sont bien adaptés à des méthodes de front (comme le G-equation)

puisque, ne résolvant pas la structure interne de la flamme, ils évitent de nombreuses difficultés numériques.

- Les codes VP ont cependant de nombreuses limites: en figeant la structure de la flammelette par les lois $Y_k(z,c)$ et $T(z,c)$, de nombreux mécanismes ne peuvent être pris en compte. L'allumage ou le mélange sans combustion par exemple posent problème. De plus, les cas où z et c ne peuvent être définis (par exemple quand les réactifs sont introduits par trois entrées ou plus, et non par deux) ne peuvent pas être traités par cette méthode. Enfin, l'acoustique et les cas où les pertes thermiques sont importantes sont aussi hors de portée de ces méthodes.

2. Ceci amène donc à construire des codes qui n'aient pas ces limitations. Pour cela, il faut passer une étape importante et résoudre explicitement les équations des espèces et de l'énergie ainsi que les termes sources qui y apparaissent. Ceci rend la tâche beaucoup plus lourde mais indispensable pour les instabilités de combustion, puisque ces codes complètement compressibles sont les seuls à pouvoir traiter l'acoustique. On doit donc résoudre ici $5+N$ équations de conservation (la continuité, les 3 composantes de la vitesse, l'énergie et les N espèces). Historiquement, ces codes ont été développés en LES à partir de codes d'aérodynamique écrits pour un gaz simple (air) [Colin, 1998 £1328][£1545][Nicoud, 1999 £1562] et certaines hypothèses ont été retenues pour limiter leur complexité:

   - H1: la première de ces hypothèses est de dire que les réactifs sont dilués dans une espèce très majoritaire et non-réactive (l'azote) et par conséquent que la masse molaire du mélange est constante.
   - H2: on suppose aussi que les capacités calorifiques C_{pk} sont constantes. Non seulement, elles ne changent pas avec la température mais de plus, elles sont supposées égales pour toutes les espèces (ce qui est manifestement faux).

   Les hypothèses H1 et H2 simplifient beaucoup l'écriture du code. Nous appellerons ces codes 'Codes TR-simples' pour Codes aux Taux de Réaction simples. Ces codes ont permis de montrer la puissance de la LES pour simuler les écoulements réactifs dans de nombreux cas, en particulier lors du couplage avec l'acoustique. Un de leurs

avantages est leur simplicité. Cependant, les l'hypothèses H1 et H2 posent plusieurs problème: en supposant que la masse atomique du mélange ne varie pas et que les C_{pk} ne dépendent ni de T ni des espèces, les températures finales de combustion sont systématiquement erronées. En outre, les conditions aux limites liées à l'introduction de gaz différents sont délicates. En effet, on est souvent incapable d'assurer à la fois le bon débit massique et la bonne quantité de mouvement sur les espèces présentant des masses atomiques différentes. L'étape suivante (qui constitue l'essentiel de ce travail de thèse) est donc de supprimer ces hypothèses.

3. Les 'Codes TR-complets' (Codes au Taux de Réaction complets) sont des codes 'TR-simple' dans lesquels on relaxe les hypothèses H1 et H2. Cela entraine donc une réécriture complète d'une grande partie du code 'TR-simple' initial. Les modifications présentant des difficultés majeures sont:
   - La majorité des équations du mouvement doivent être réécrites pour prendre en compte la nouvelle thermochimie.
   - L'ensemble des matrices Jacobiennes (utilisée dans divers schémas numériques et dans les conditions aux limites) doit être réécrit car toutes les variables dynamiques sont désormais liées aux fractions massiques.
   - L'écriture des vitesses de diffusion (qui était en général de type Fick sans vitesse de correction) doit être améliorée pour être de précision comparable à celle de la thermochimie: il est nécessaire par exemple de passer à des modèles de type Hirschfelder et Curtiss [Hirschfelder, 1969].
   - La formulation des conditions aux limites (en général de type NSCBC [Poinsot, 1992, LELE-92-BC]) doit être changée pour prendre en compte l'effet des fractions massiques sur les ondes.

La thèse est organisée de la façon suivante:

- Les hypothèses physiques et les équations employées sont décrites dans le premier chapitre.
- Le second chapitre traite des problèmes liés aux méthodes numériques. On y montre

également un nouveau traitement de type NSCBC [Poinsot, 1992, LELE-92-BC] pour les conditions aux limites dans un mélange multi-espèces. Cette méthode est plus compacte et plus élégante que celle proposée par Thévenin et al. [Baum, 1994 £953] et les tests montrent qu'elle est aussi efficace.

– Enfin, le dernier chapitre présentent l'application du nouveau code à un cas réel, celui de la configuration "Labscale" du projet européen PRECCINSTA, dans lequel sont impliqués différents partenaires de la thèse.

Chapitre 1

Définitions, bilans et modèles

La première section de ce chapitre effectue un bref rappel des définitions utilisées par la suite. La section suivante présente les équations de Navier–Stokes dans le cas tridimensionnel, compressible et réactif. Les principaux modèles et hypothèses de fermeture seront présentés dans cette section. Enfin, la troisième section expose le filtrage LES de ces équations ainsi que les modèles utilisés dans la LES.

1.1 Définitions

1.1.1 Grandeurs thermodynamiques

On se place dans le cas d'un gaz constitué d'un mélange de N espèces chimiques différentes $\mathcal{M}_k$. On ne considérera que des gaz auquels peuvent s'appliquer les deux hypothèses suivantes:

1. loi d'état des gaz parfaits,
2. loi de Joule pour les définitions de l'énergie et de l'enthalpie.

Un gaz vérifiant ces hypothèses est dit idéal. Le lecteur intéressé par la description d'un gaz réel (non-idéal) pourra se reporter à [Okong'o, 2002].

Pour définir les grandeurs thermodynamiques du système, on considère un volume de contrôle V que l'on peut rendre suffisament petit pour que toutes les grandeurs intensives y soit uniformes. On suppose que sur ce volume V, les grandeurs suivantes sont connues de façon intuitive:

- le nombre de mole n_k de l'espèce k,
- les masses molaires W_k de l'espèce k,
- les capacités calorifiques massique C_{vk} et C_{pk} de l'espèce k,
- l'enthalpie de formation standard $\Delta h^0_{f,k}$ de l'espèce k,
- la vitesse $v_{i,k}$ dans la direction i de l'espèce k,
- et la température T du mélange.

Certaines de ces grandeurs (n_k, W_k) ne posent effectivement aucun problème. D'autres ($\Delta h^0_{f,k}$, $v_{i,k}$, ...) bien que souvent considérées comme triviales nécessitent parfois plus de précautions dans leur manipulation [Kuo]. Cet ensemble de grandeurs est suffisant pour définir toutes les propriétés du système considéré. Il permet en outre d'écrire les équations de conservation permettant de calculer l'évolution de l'état du sytème au cours du temps.

Les grandeurs associées à la quantité de matière du système sont:

nombre de moles totale dans le volume V:

$$n = \sum_{k=1}^{N} n_k \tag{1.1}$$

concentration de l'espèce k:

$$C_k = \frac{n_k}{V} \tag{1.2}$$

concentration du mélange:

$$C = \sum_{k=1}^{N} C_k = \frac{n}{V} \tag{1.3}$$

fraction molaire de l'espèce k:

$$X_k = \frac{n_k}{n} = \frac{C_k}{C} \tag{1.4}$$

Les grandeurs associées à la masse du système sont:

masse de l'espèce k:

$$m_k = n_k W_k \tag{1.5}$$

masse totale dans le volume V:

$$m = \sum_{k=1}^{N} m_k \tag{1.6}$$

masse volumique de l'espèce k:

$$\rho_k = \frac{m_k}{V} \tag{1.7}$$

masse volumique du mélange:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k = \frac{m}{V} \tag{1.8}$$

fraction massique de l'espèce k:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k}{\rho} \tag{1.9}$$

On a alors:

masse molaire du mélange:

$$W = \frac{m}{n} = \sum_{k=1}^{N} X_k W_k = \left(\sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \tag{1.10}$$

constante des gaz pour l'espèce k:

$$r_k = \frac{R}{W_k} \tag{1.11}$$

constante des gaz du mélange:

$$r = \sum_{k=1}^{N} Y_k r_k = \frac{R}{W} \tag{1.12}$$

Notons enfin la relation particulièrement utile:

$$Y_k = X_k \frac{W_k}{W} \tag{1.13}$$

La définition de la pression du système (dans l'hypothèse d'un gaz parfait) se fait par **l'équation d'état du mélange:**

$$PV = nRT \qquad \text{ou} \qquad P = \rho r T \tag{1.14}$$

On peut alors définir la **pression partielle de l'espèce k:**

$$P_k = PX_k \qquad \text{et donc} \qquad P = \sum_{k=1}^{N} P_k \tag{1.15}$$

On en déduit **l'équation d'état pour chaque espèce k:**

$$P_k V = n_k RT \qquad \text{ou} \qquad P_k = \rho_k r_k T \tag{1.16}$$

A partir de la vitesse d'ensemble $v_{i,k}$ de l'espèce k, on peut définir:
la vitesse moyenne massique du mélange:

$$u_i = \sum_{k=1}^{N} Y_k v_{i,k} \tag{1.17}$$

la vitesse moyenne molaire du mélange:

$$u_i^* = \sum_{k=1}^{N} X_k v_{i,k} \tag{1.18}$$

Ce sont les vitesses auxquelles sont convectées respectivement la masse et la quantité de matière dans le volume de contrôle.

On définit finalement les grandeurs liées à l'énergie du sytème:
densité massique d'énergie cinétique:

$$e_c = \frac{1}{2} u_i u_i \tag{1.19}$$

densité massique d'énergie sensible de l'espèce k:

$$e_{sk} = \int_0^T C_{vk}(\theta)\ \mathrm{d}\theta \tag{1.20}$$

densité massique d'enthalpie sensible de l'espèce k:

$$h_{sk} = \int_0^T C_{pk}(\theta)\ \mathrm{d}\theta \tag{1.21}$$

Les équations 1.20 et 1.21 constituent les lois de Joule: l'énergie et l'enthalpie ne dépendent que de la température. Dans ces équations, il est important de noter que l'intégration se fait à partir de $T^0 = 0$ K et donc que les grandeurs e_{sk} et h_{sk} sont nulles à cette température. Ce choix a pour conséquence de simplifier l'écriture des équations qui découlent de ces définitions, car il fait disparaitre une constante d'intégration.

On introduit alors l'enthalpie standard de formation $\Delta h^0_{f,k}$ de l'espèce k. Cette grandeur est dite standard car elle est définie à $P^0 = 101300$ Pa, mais elle dépend néanmoins de la température. Cependant, pour être cohérent avec le choix $T^0 = 0$ K effectué précédemment, l'enthalpie de formation de chaque espèce k doit être prise à cette même température.

On peut alors définir les grandeurs suivantes:

enthalpie sensible chimique de l'espèce k:

$$h_k = h_{sk} + \Delta h^0_{f,k} \tag{1.22}$$

énergie sensible chimique de l'espèce k:

$$e_k = e_{sk} + \Delta h^0_{f,k} \tag{1.23}$$

Remarquons que l'introduction d'une énergie standard de formation $\Delta e^0_{f,k}$ n'est pas nécessaire car le choix $T^0 = 0$ K implique $\Delta e^0_{f,k} = \Delta h^0_{f,k}$ [Poinsot,2001,edw].

En sommant les définitions précédentes sur les espèces, on obtient les définitions des grandeurs du mélange:

capacité calorifique à volume constant du mélange:

$$C_v = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{vk} \tag{1.24}$$

capacité calorifique à pression constante du mélange:

$$C_p = \sum_{k=1}^{N} Y_k C_{pk} \tag{1.25}$$

énergie sensible du mélange:

$$e_s = \sum_{k=1}^{N} Y_k e_{sk} = \int_0^T C_v(\theta)\, \mathrm{d}\theta \tag{1.26}$$

enthalpie sensible du mélange:

$$h_s = \sum_{k=1}^{N} Y_k h_{sk} = \int_0^T C_p(\theta)\, \mathrm{d}\theta \tag{1.27}$$

énergie sensible chimique du mélange:

$$e = \sum_{k=1}^{N} Y_k e_k \tag{1.28}$$

enthalpie sensible chimique du mélange:

$$h = \sum_{k=1}^{N} Y_k h_k \tag{1.29}$$

énergie totale du mélange:

$$E = e_s + e_c \tag{1.30}$$

enthalpie totale du mélange:

$$H = h_s + e_c \tag{1.31}$$

énergie totale chimique du mélange:

$$E_t = e + e_c \tag{1.32}$$

enthalpie totale chimique du mélange:

$$H_t = h + e_c \tag{1.33}$$

Notons enfin les relations utiles suivantes:

$$h_{sk} = e_{sk} + r_k T = e_{sk} + \frac{P_k}{\rho_k} \tag{1.34}$$

$$h_s = e_s + rT = e_s + \frac{P}{\rho} \tag{1.35}$$

$$C_{pk} - C_{vk} = r_k \tag{1.36}$$

$$C_p - C_v = r \tag{1.37}$$

$$\frac{C_p}{C_v} = \gamma \tag{1.38}$$

1.1.2 Réactions chimiques: cinétique et équilibre

Le milieu considéré est supposé réactif. Cela se traduit par le fait que chaque espèce $\mathcal{M}_k$ peut réagir avec toutes les autres espèces présentes dans le milieu. Le nombre total de réactions chimiques envisageable est noté M. Chaque réaction individuelle sera notée $\mathcal{R}_j$ et écrite de la manière suivante:

$$\mathcal{R}_j \ : \ \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^f \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^r \mathcal{M}_k \tag{1.39}$$

où ν_{kj}^f et ν_{kj}^r représentent les coefficients stœchiométriques de l'espèce $\mathcal{M}_k$ dans la réaction j en tant que réactif et que produit. La cinétique de cette réaction est caractérisée par son taux de réaction défini par:

$$\left.\frac{\mathrm{d}C_k}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathcal{R}_j} = \nu_{kj}\mathcal{Q}_j = (\nu_{kj}^r - \nu_{kj}^f)\left(\mathcal{Q}_j^f - \mathcal{Q}_j^r\right) \tag{1.40}$$

où le taux de réaction total $\mathcal{Q}_j$ se décompose en deux parties:

- un taux de réaction "forward" (de la gauche vers la droite) $\mathcal{Q}_j^f$,
- et un taux de réaction "reverse" (de la droite vers la gauche) $\mathcal{Q}_j^r$.

Ces deux taux de réaction obéissent à la loi d'action de masse [Kuo,1986]:

$$\mathcal{Q}_j^f = K_j^f \prod_{k=1}^{N} C_k^{\nu_{kj}^f} \qquad \text{et} \qquad \mathcal{Q}_j^r = K_j^r \prod_{k=1}^{N} C_k^{\nu_{kj}^r} \tag{1.41}$$

Les constantes de réaction K_j^f et K_j^r suivent la loi d'Arrhenius:

$$K_j^f = A_j^f \exp\left(-\frac{E_j^f}{RT}\right) \qquad \text{et} \qquad K_j^r = A_j^r \exp\left(-\frac{E_j^r}{RT}\right) \tag{1.42}$$

Dans l'équation 1.42, A_j est la constante pré-exponentielle et E_j est l'énergie d'activation. Il faut cependant noter que les 4 paramètres A_j^f, A_j^r, E_j^f et E_j^r ne sont pas indépendants car les constantes K_j^f et K_j^r sont liées entre elles par la constante d'équilibre K_j^C de la réaction. En effet, à l'équilibre $\mathcal{Q}_j^f = \mathcal{Q}_j^r$, soit:

$$K_j^f \prod_{k=1}^{N} C_k^{\nu_{kj}^f} = K_j^r \prod_{k=1}^{N} C_k^{\nu_{kj}^r} \tag{1.43}$$

et donc:

$$K_j^C = \prod_{k=1}^{N} \frac{C_k^{\nu_{kj}^r}}{C_k^{\nu_{kj}^f}} = \frac{K_j^f}{K_j^r} \tag{1.44}$$

Or cette constante d'équilibre K_j^C dépend uniquement de la température et des données thermodynamiques du système:

$$K_j^C(T) = \left(\frac{P^0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}} \exp\left(-\frac{\Delta_j G^0}{RT}\right) \tag{1.45}$$

où $\Delta_j G^0 = \Delta_j H^0 - T\Delta_j S^0$ est la variation à travers la réaction $\mathcal{R}_j$ de l'enthalpie libre (ou fonction de Gibbs) G à la pression standard $\mathrm{P}^0 = 101300$ Pa. On en déduit que:

$$A_j^r = \frac{A_j^f}{\left(\frac{P^0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}}} \exp\left(-\frac{\Delta S^0}{R}\right) \qquad \text{et} \qquad E_j^r = E_j^f - \Delta H^0 \tag{1.46}$$

Le taux de production massique de l'espèce $\mathcal{M}_k$ par la réactions $\mathcal{R}_j$ est donné par:

$$\dot{\omega}_{kj} = \left.\frac{\mathrm{d}\rho_k}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathcal{R}_j} = W_k \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \tag{1.47}$$

et le taux de production massique de $\mathcal{M}_k$ par l'ensemble des réactions est:

$$\dot{\omega}_k = \frac{\mathrm{d}\rho_k}{\mathrm{d}t} = \sum_{j=1}^{M} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{M} \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \tag{1.48}$$

Remarques:

- La loi d'action de masse (Eq. 1.41) n'est valable qu'au niveau élémentaire. Cette loi peut cependant être encore utilisée dans des mécanismes réduits (qui ne représentent donc pas la réalité moléculaire), en remplaçant les coefficients stœchiométriques ν_{kj}^f et ν_{kj}^r par des coefficients a_{kj}^f et a_{kj}^r judicieusement choisis. L'interprétation de la constante d'équilibre doit être modifiée en conséquence.

– Le cas d'une réaction irréversible est obtenu simplement en posant $K_j^r = 0$ dans l'Eq. 1.41. Dans ce cas, la notion d'équilibre n'a bien sûr plus de sens.

1.2 Équations de la mécanique des fluides

Cette section expose les équations de Navier-Stokes réactives et compressibles sans démonstrations. Le lecteur pourra se reporter à [Poinsot, 2001,edw][Kuo, 1986][Williams, 1985] pour plus de précisions.

1.2.1 Bilan de masse et de quantité de matière

Les équations de transport pour ρ_k et C_k sont [Kuo]:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_k v_{i,k}) = \dot{\omega}_k \tag{1.49}$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(C_k v_{i,k}) = \dot{\omega}_k / W_k \tag{1.50}$$

La vitesse $v_{i,k}$ est la même dans ces deux équations, car il s'agit de *la* vitesse à laquelle se déplace en moyenne l'ensemble des particules de l'espèce k.
En sommant sur les espèces les Eq. 1.49 et 1.50, on obtient les équations de transport de ρ et C:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \tag{1.51}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(C u_i^*) = \sum_{k=1}^{N} \dot{\omega}_k / W_k \tag{1.52}$$

Cette fois, les Eq. 1.51 et 1.52 font intervenir deux vitesses différentes u_i et u_i^* (ces vitesses ont été définies aux Eq. 1.17 et 1.18). On remarque également qu'il n'a y a pas de termes sources dans l'équation sur ρ car la masse se conserve au cours d'une réaction chimique. Par contre, le nombre de moles n'est pas conservé, c'est pourquoi il reste un terme source dans l'équation sur C.
La vitesse de transport $v_{i,k}$ de l'espèce k peut donc se décomposer de deux manières

différentes:

$$v_{i,k} = u_i + V_{i,k} = u_i^* + V_{i,k}^* \tag{1.53}$$

Dans cette équation, $V_{i,k}$ est la vitesse massique de diffusion de l'espèce k et $V_{i,k}^*$ sa vitesse molaire de diffusion. Par définition, ces vitesses doivent satisfaire:

$$\sum_{k=1}^{N} V_{i,k} Y_k = 0 \qquad \text{et} \qquad \sum_{k=1}^{N} V_{i,k}^* X_k = 0 \tag{1.54}$$

Les Eq. 1.49 et 1.50 peuvent alors s'écrire sous la forme plus classique:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_k u_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_k V_{i,k}) + \dot{\omega}_k \tag{1.55}$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(C_k u_i^*) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(C_k V_{i,k}^*\right) + \dot{\omega}_k / W_k \tag{1.56}$$

où la vitesse de convection du mélange u_i (ou u_i^*) est connue et la vitesse de diffusion $V_{i,k}$ (ou $V_{i,k}^*$) doit être modélisée.

Pour cela, la théorie cinétique des gaz donne une expression exacte des vitesses de diffusion massique [Kuo,1986][Hirschfelder, 1969 £271][Bird, 1960 £404]. Il s'agit de l'équation de Stefan-Maxwell:

$$\nabla X_k = \sum_{j=1}^{N} \frac{X_k X_j}{\mathcal{D}_{kj}}(V_j - V_k) + (Y_k - X_k)\frac{\nabla P}{P} + \sum_{j=1}^{N} \frac{X_k X_j}{\mathcal{D}_{kj}}\left(\frac{\alpha_j}{Y_j} - \frac{\alpha_k}{Y_k}\right)\frac{\nabla T}{T} \tag{1.57}$$

Les termes α_j et α_k sont les coefficients de diffusion thermiques des espèces j et k, et le terme $\mathcal{D}_{kj}$ est le coefficient de diffusion binaire de l'espèce k dans l'espèce j. Une approximation courante est de supposer que les effets Soret (les termes en $\frac{\nabla T}{T}$) et Dufour (les termes en $\frac{\nabla P}{P}$) sont négligeables. Avec ces hypothèses, l'Eq. 1.57 s'écrit sous forme matricielle de la façon suivante:

$$\partial_x X = M.V_x \tag{1.58}$$

où X est le vecteur contenant les fractions molaires X_k et V_x le vecteur des vitesses massiques de diffusion $V_{x,k}$ (pour simplifier les notations, on ne considère que la direction x). Le terme générique de la matrice M s'écrit alors:

$$\begin{cases} M_{kk} = -\sum_{i \neq k} \frac{X_i X_k}{\mathcal{D}_{ik}} \\ M_{kj} = \frac{X_k X_j}{\mathcal{D}_{kj}} \end{cases} \tag{1.59}$$

Dans le cas général, il faut donc inverser une matrice de taille N pour déterminer les trois composantes de la vitesse de diffusion de chaque espèce.

Dans le cas d'un mélange binaire, l'Eq. 1.58 se réduit à:

$$\partial_x X_1 = \frac{X_1 X_2}{\mathcal{D}_{12}}(V_2 - V_1) \tag{1.60}$$

$$\partial_x X_2 = \frac{X_1 X_2}{\mathcal{D}_{12}}(V_1 - V_2) \tag{1.61}$$

Ce système est dégénéré. C'est d'ailleurs toujours le cas, même dans un mélange non-binaire du fait de la relation:

$$\sum_{k=1}^{N} X_k = X_1 + X_2 = 1 \tag{1.62}$$

En remplaçant l'Eq. 1.61 par l'équation:

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k V_k = Y_1 V_1 + Y_2 V_2 = 0 \tag{1.63}$$

on obtient un système bien posé dont la solution exacte est:

$$X_1 V_1 = -D_1 \partial_x X_1 \tag{1.64}$$

$$X_2 V_2 = -D_2 \partial_x X_2 \tag{1.65}$$

avec:

$$D_1 = \frac{\mathcal{D}_{12} W_2}{W} = \frac{1 - Y_1}{X_2/\mathcal{D}_{12}} \tag{1.66}$$

$$D_2 = \frac{\mathcal{D}_{12} W_1}{W} = \frac{1 - Y_2}{X_1/\mathcal{D}_{12}} \tag{1.67}$$

Pour un mélange binaire, on peut également écrire de façon équivalente:

$$Y_1 V_1 = -\mathcal{D}_{12} \partial_x Y_1 \tag{1.68}$$

$$Y_2 V_2 = -\mathcal{D}_{12} \partial_x Y_2 \tag{1.69}$$

ou encore:

$$X_1 V_1^* = -\mathcal{D}_{12} \partial_x X_1 \tag{1.70}$$

$$X_2 V_2^* = -\mathcal{D}_{12} \partial_x X_2 \tag{1.71}$$

Pour récapituler, dans un mélange binaire, les vitesses de diffusion peuvent s'écrire de façon équivalente:

$$X_k V_k^* = -\mathcal{D}_{kj} \partial_x X_k \tag{1.72}$$

$$Y_k V_k = -\mathcal{D}_{kj} \partial_x Y_k \tag{1.73}$$

$$X_k V_k = -D_k \partial_x X_k \qquad \text{avec} \qquad D_k = \frac{1 - Y_k}{X_j / \mathcal{D}_{kj}} \tag{1.74}$$

Les 3 équations 1.72, 1.72 et 1.74 sont juste trois formulations différentes de la même réalité physique. Cette propriété n'est d'ailleurs vraie que dans le cas d'un mélange binaire: pour un mélange multi-composants, ces trois formulations ne sont pas du tout équivalentes. Les Eq. 1.72 et 1.73 sont connues sous le nom de lois de Fick.

Le cas d'un mélange multi-composants est beaucoup plus complexe. En effet, il faut inverser la matrice M (en supprimant une ligne et en rajoutant l'Eq. 1.63 à la place) pour trouver les vitesses de diffusion. Cette inversion peut être accomplie numériquement, mais il n'existe aucune formule exacte dans le cas général. En pratique, on utilise donc des solutions approximatives.

Une première façon de procéder pour trouver les vitesses de diffusion dans un mélange multi-composants est de supposer *a priori* que l'on peut remplacer tous les coefficients de diffusion binaire $\mathcal{D}_{kj}$ de l'espèce k dans l'espèce j par un coefficient unique $D_k^{'}$ caractérisant la diffusion de l'espèce k dans le mélange. L'équation 1.58 se ramène alors à:

$$D_k^{'} \nabla X_k = \sum_{j=1}^{N} (X_k V_j X_j - X_j V_k X_k) \tag{1.75}$$

Ce système peut alors s'inverser de manière exacte et conduit à:

$$X_k V_k^* = -D_k^{'} \nabla X_k \tag{1.76}$$

$$Y_k V_k = -D_k^{'} \nabla Y_k \tag{1.77}$$

Cette hypothèse simple (mais dont la pertinence doit être vérifiée) permet donc de retrouver la loi de Fick obtenue dans le cas du mélange binaire. Encore une fois, le contenu physique des formulations 1.76 et 1.77 est strictement identique, et chacune de ces équations est compatible avec l'autre.

Une autre approche plus rigoureuse est celle décrite par Giovangigli dans [Giovangigli, 1999 £1538]. Il s'agit d'effectuer un développement asymptotique de la matrice de diffusion M^{-1}. En ne retenant que le terme du premier ordre de ce développement on obtient:

$$X_k V_k \approx -D_k \partial_x X_k \qquad \text{avec} \qquad D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / \mathcal{D}_{kj}} \tag{1.78}$$

Cette formulation, résultant d'un développement asymptotique pour un mélange multi-composants, est identique à l'Eq. 1.74 obtenue de façon exacte mais uniquement pour un mélange binaire. Il faut bien comprendre que contrairement à la formulation "Fick multi-composants", cette méthode ne suppose pas que $\mathcal{D}_{kj} = D_k$. En effet, aucune hypothèse n'est faite sur les $\mathcal{D}_{kj}$, mais le calcul montre qu'un seul coefficient suffit à représenter la diffusion de l'espèce k dans le mélange *une fois la matrice M inversée.* En outre, contrairement à la loi de Fick généralisée au mélange multi-composant, cette formule relie les fractions molaires X_k à la vitesse de diffusion massique V_k et non pas à la vitesse de diffusion molaire V_k^*. C'est la formulation 1.78 qui sera retenue pour la suite, mais le calcul du coefficient de diffusion sera effectué différemment (voir section 1.2.2).

Un problème bien connu avec ces formulations est celui de la conservation de la masse. En effet, ρ doit vérifier deux équations: sa définition algébrique (Eq. 1.8) et son équation de transport (Eq. 1.51). Lorsque la matrice de diffusion exacte M^{-1} est utilisée pour calculer les vitesses de diffusion cela ne pose pas de problème car la consistance du système est assurée théoriquement (même si des problèmes numériques peuvent apparaitre). Ce n'est cependant plus le cas lorsque l'on utilise les approximations "Loi de Fick" ou l'approximation au premier ordre de la matrice de diffusion.

Il existe alors deux solutions pour continuer à utiliser ces approximations tout en assurant la conservation de la masse:

- La première alternative est de résoudre les équations de transport de la densité et de seulement $N - 1$ espèces. La densité de l'espèce N est alors calculée grâce à la relation algébrique

$$\rho_N = \rho - \sum_{k=1}^{N-1} \rho_k \tag{1.79}$$

Cette solution est souvent appliquée lorsqu'une des espèces est largement majoritaire dans le mélange (diluant): c'est notamment le cas de l'azote dans une flamme où l'air est utilisé comme oxydant. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle est difficilement applicable lorsqu'aucune espèce n'est majoritaire dans le mélange car il est alors délicat de particulariser une espèce par rapport aux autres.

- La seconde alternative est de ne pas résoudre l'équation de transport pour la densité totale mais uniquement celles pour la densité des N espèces. La densité totale est alors simplement définie par la relation algébrique

$$\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k \tag{1.80}$$

Pour continuer à assurer la validité de l'équation de continuité (Eq. 1.51), il faut alors rajouter aux vitesses de diffusion $V_{i,k}$ une vitesse de correction V_i^c. On remplace donc l'Eq. 1.55 par:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_k u_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho_k V_{i,k}^{'}\right) + \dot{\omega}_k \tag{1.81}$$

avec:

$$\rho_k V_{i,k}^{'} = \rho_k V_{i,k} + \rho_k V_i^c \tag{1.82}$$

La vitesse de correction V_i^c est alors définie par:

$$V_i^c = -\sum_{k=1}^{N} Y_k V_{i,k} \tag{1.83}$$

1.2.2 Remarques sur le phénomène de diffusion

Le processus de diffusion intervient dans toutes les équations de conservation ci-dessus: masse et quantité de matière pour chaque espèce, quantité de mouvement et énergie. Le mécanisme physique de ce phénomène s'explique parfaitement à partir de la théorie cinétique des gaz [Hirschfelder], et cette théorie permet de prédire le coefficient de diffusion binaire d'une espèce dans une autre, avec un minimum d'hypothèses simplificatrices. Par exemple, si les molécules A et B sont considérées comme des sphères rigides, on a:

$$\mathcal{D}_{AB} \approx \frac{2}{3}\left(\frac{K}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{2m_A}+\frac{1}{2m_B}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{T^{\frac{3}{2}}}{P\left(\frac{d_A+d_B}{2}\right)^2} \tag{1.84}$$

où K est la constante de Boltzmann, m_A et m_B représentent les masses des molécules A et B, et d_A et d_B leurs diamètres.

Dans le cas d'un mélange multi-composants, la prédiction des vitesses de diffusion nécessite l'inversion d'une matrice, ce qui rend cette tâche relativement complexe. On a cependant vu que l'on pouvait se ramener à des formulations approchées plus simples en définissant un coefficient de diffusion unique D_k pour chaque espèce k caractérisant sa diffusion dans le reste du mélange.

De même, il est possible de trouver des formules exactes ou approchées pour définir la viscosité du mélange ν et son coefficient de diffusion thermique λ à partir des propriétés de chaque espèce k et de leurs concentrations respectives.

Ce genre de formules n'est cependant utilisée que lorsque la modélisation des phénomènes de diffusion doit être extrêmement précise. Dans les cas où la modélisation de la diffusion ne nécessite pas autant de précision, l'approximation suivante est largement utilisée:

$$D_k = \frac{\nu}{S_{c,k}} \tag{1.85}$$

où $\nu = \mu/\rho$ est la viscosité cinématique du mélange et $S_{c,k}$, le nombre de Schmidt de l'espèce k. Ce nombre de Schmidt est alors supposé constant pour chaque espèce, ce qui constitue déja une très bonne approximation de la réalité.

De même, le coefficient λ qui apparait dans la loi de Fourier (diffusion de la chaleur) peut être modélisé par:

$$D_T = \frac{\lambda}{\rho C_p} = \frac{\nu}{P_r} \tag{1.86}$$

où P_r est le nombre de Prandtl du mélange. Il est également très bien vérifié expérimentalement que le nombre de Prandtl est constant.

En conclusion, si l'on modélise D_k et D_T par les Eq.1.85 et 1.86, il suffit de se donner une loi pour la viscosité du mélange ν, le nombre de Prandtl P_r et les nombres de Schmidt $S_{c,k}$ de chaque espèce k pour définir tous les coefficients de diffusion.

La loi de viscosité la plus couramment utilisée pour des mélanges dilués dans l'azote est la loi de Sutherland:

$$\mu(T) = \mu(T_{ref}) \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{3/2} \frac{T_{ref} + c}{T + c} \tag{1.87}$$

1.2.3 Bilan de quantité de mouvement

En appliquant le premier principe de la dynamique (seconde loi de Newton) au volume de contrôle V, on trouve:

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_j u_i + P\delta_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}\right) \tag{1.88}$$

Dans l'Eq. 1.88, τ_{ij} représente le tenseur des contraintes visqueuses:

$$\tau_{ij} = (\mu^{'} - \frac{2}{3}\mu)S_{kk}\delta_{ij} + 2\mu S_{ij} \qquad \text{avec} \qquad S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.89}$$

Dans cette équation, μ est la viscosité dynamique du mélange et $\mu^{'}$ est la viscosité en volume (bulk viscosity en anglais). Le terme $\mu^{'}S_{kk}\delta_{ij}$ représente la dissipation de la quantité de mouvement liée uniquement à la dilatation et le terme $2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu S_{kk}\delta_{ij}$ la dissipation liée à la déformation. La viscosité en volume $\mu^{'}$ est très souvent considérée comme nulle [Kuo].

1.2.4 Bilan d'énergie

L'équation de transport pour l'énergie totale non-chimique s'écrit:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left((\rho E + P)u_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}u_j\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(q_i) + \dot{\omega}_E \tag{1.90}$$

Dans cette équation, q_i est le flux de chaleur dans la direction i et $\dot{\omega}_E$ le dégagement de chaleur dû à la combustion.
Ces deux grandeurs sont définies par:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \rho_k h_{sk} V_{i,k} \tag{1.91}$$

$$\dot{\omega}_E = -\sum_{k=1}^{N} \Delta h^0_{f,k} \dot{\omega}_k \tag{1.92}$$

Dans l'Eq.1.91, le terme $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}$ représente le transport de chaleur par conduction (loi de Fourier) alors que le terme $\sum_{k=1}^{N} \rho_k h_{sk} V_{i,k}$ représente le transport d'enthalpie lié à la diffusion des espèces. Lorsque l'on utilise la formulation avec vitesse de correction pour la diffusion des espèces, il faut remplacer $V_{i,k}$ par $V'_{i,k}$ dans l'Eq.1.91 afin de rester consistant.

1.2.5 Récapitulation des équations et des modèles utilisés

Les variables transportées sont ρ_k, ρu_i et ρE.

La densité totale est définie par:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k \tag{1.93}$$

La température est obtenue en inversant la définition de l'énergie:

$$E - \frac{1}{2} u_i . u_i = \sum_{k=1}^{N} Y_k \int_0^T C_{vk}(\theta) \, \mathrm{d}\theta \tag{1.94}$$

La pression est définie par l'équation d'état du gaz:

$$P = \sum_{k=1}^{N} \rho_k r_k T \tag{1.95}$$

Les équations de transport utilisées sont:

densité de l'espèce k:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(J_{i,k}) + \dot{\omega}_k \tag{1.96}$$

avec:

$$J_{i,k} = -\frac{\mu}{S_{c,k}} \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{N} \frac{\mu}{S_{c,j}} Y_j \frac{W_j}{W} \frac{\partial X_j}{\partial x_i} \tag{1.97}$$

quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_j u_i + P\delta_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}\right) \tag{1.98}$$

avec:

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu S_{kk}\delta_{ij} \qquad \text{et} \qquad S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.99}$$

énergie:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left((\rho E + P)u_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}u_j\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(q_i) + \dot{\omega}_E \tag{1.100}$$

avec:

$$q_i = -\frac{\mu}{P_r}C_p\frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} J_{i,k}h_{sk} \tag{1.101}$$

loi pour la viscosité:

$$\mu(T) = \mu(T_{ref})\left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{3/2}\frac{T_{ref}+c}{T+c} \tag{1.102}$$

1.3 Filtrage, LES et modèles

1.3.1 Origine de la LES

Les Eq. 1.93 à 1.102 constituent un modèle de la mécanique des fluides dont la validité a été largement démontrée. D'un point de vue théorique, ce modèle s'applique donc aussi bien aux écoulements laminaires qu'aux écoulements turbulents. Cependant, du point de vue de la simulation numérique, il existe une différence essentielle entre ces deux types d'écoulements. En effet, on peut montrer que dans un écoulement présentant une turbulence homogène et isotrop, le rapport entre l'échelle la plus énergétique L et la plus petite échelle active η varie comme $Re^{\frac{3}{4}}$. Plus l'écoulement est turbulent, plus la gamme d'échelles présente dans l'écoulement est vaste. Cela pose donc un problème du point de vue numérique, puisque le domaine simulé doit être discrétisé. Prendre en compte toutes les échelles de l'écoulement nécessite donc un maillage d'autant plus fin que le nombre de Reynolds est élevé. Or la taille d'un maillage est avant tout limitée par des considérations liées à la puissance des machines de calcul. Par exemple, le maillage de la plus grosse simulation

directe d'une Turbulence Homogène Isotrope (THI) accomplie à l'heure actuelle contient $4096^3 \approx 64'000'000'000$ points et permet de simuler un écoulement dont le nombre de Reynolds est de l'ordre de $5'000$. Ce genre de simulation exige cependant une puissance de calcul gigantesque, un code dédié et optimisé à l'extrême et ne peut se faire que sur des écoulements relativement simples (THI incompressible et non-réactive). Simuler toutes les échelles d'un écoulement de type chambre de combustion (réactifs, compressibles, contenant de nombreuses espèces et dont le nombre de Reynolds est de l'ordre de $10'000$) s'avère donc complètement impossible avec des moyens de calcul raisonnables. En pratique, cela signifie que sur un maillage donné, les plus grandes échelles de l'écoulement seront résolues mais pas les plus petites.

Or, l'hypothèse de base de toute simulation numérique est que les termes discrétisés des équations doivent être le plus proche possible de leurs contreparties continues: cette hypothèse est vérifiée tant que toutes les échelles sont résolues, mais elle devient fausse dès lors que la résolution du maillage ne permet plus de prendre en compte toutes les échelles de l'écoulement.

Autrement dit, on peut utiliser telle quelle la forme discrétisée des équations de la mécanique des fluides pour simuler les écoulements laminaire ou pour faire de la DNS, mais pas pour simuler des écoulements turbulents sous-résolus. Dans ce cas, il faut développer un nouveau formalisme pour prendre en compte le fait que la simulation numérique ne résoud de fait que les grandes échelles de l'écoulement. C'est le but de la notion de filtrage qui aboutit à la technique de simulation dite des grandes échelles: la LES.

1.3.2 Notion de filtrage

Pour tout champ spatial $\phi(x,y,z)$ on définit le champ filtré $\overline{\phi}(x,y,z)$ comme la convolution de ϕ avec le filtre G:

$$\overline{\phi}(x,y,z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x-x',y-y',z-z')\phi(x',y',z')\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z' \tag{1.103}$$

On peut également définir le champ filtré de manière spectrale:

$$\widehat{\overline{\phi}}(k_x,k_y,k_z) = \widehat{G}(k_x,k_y,k_z)\widehat{\phi}(k_x,k_y,k_z) \tag{1.104}$$

où $\widehat{\phi}$ est la transformée de Fourier de $\widehat{\phi}$, $\widehat{G}$ celle du filtre G et $\widehat{\overline{\phi}}$ celle de la quantité filtrée $\overline{\phi}$.

Pour avoir droit à l'appellation de filtre, la fonction G doit vérifier un certain nombre de propriétés (le lecteur peut se reporter à [Sagaut, 2000 £1546] pour plus de détails). Les trois principales propriétés qui doivent être vérifiées sont rappelées ici:

préservation des constantes:

$$\overline{a} = a \tag{1.105}$$

linéarité:

$$\overline{\phi + \psi} = \overline{\phi} + \overline{\psi} \tag{1.106}$$

commutativité avec la dérivation spatiale et temporelle:

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_i} \qquad \text{et} \qquad \overline{\frac{\partial \phi}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} \tag{1.107}$$

Finalement, pour simplifier les notations par la suite, on introduit l'opérateur de Favre défini par:

$$\widetilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \tag{1.108}$$

Cette opérateur de Favre n'a de sens que dans le cas où ρ n'est pas constant c'est à dire dans des écoulement compressibles. Les difficultés liées à cet opérateur (commutativité, ...) sont donc propres aux LES d'écoulements à densité variable.

Il faut bien noter que pour l'instant, le filtrage est défini de façon complètement indépendante de toute notion de maillage: il s'agit d'une opération mathématique qui transforme un champ continu ϕ en un autre champ continu $\overline{\phi}$. Par contre, le fait de discrétiser les équations de la mécanique des fluides sur un maillage donné revient *de façon implicite* à filtrer ces équations par un filtre G_m associé au maillage et au schéma numérique. La description du filtre G_m peut cependant s'avérer difficile notamment lorsque le maillage

n'est pas régulier (maillages non-structurés, par exemple) ou que le schéma numérique est d'ordre elevé.

1.3.3 Equations filtrées de la mécanique des fluides non-réactives et hypothèses de fermeture

On va appliquer un filtre G quelconque aux équations de transport 1.96, 1.98 et 1.100 pour obtenir les équations filtrées. Par la suite, lors de l'étape de discrétisation, ce filtre sera identifié au filtre implicite G_m du maillage et du schéma numérique.

Les variables transportées sont désormais $\overline{\rho}_k = \overline{\rho}\widetilde{Y}_k$, $\overline{\rho u}_i = \overline{\rho}\widetilde{u}_i$ et $\overline{\rho E} = \overline{\rho}\widetilde{E}$.

densité de l'espèce k:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_k\widetilde{u}_i\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{J}_{i,k} + \overline{\rho}(\widetilde{Y_k u_i} - \widetilde{Y}_k\widetilde{u}_i)) \tag{1.109}$$

quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i + \overline{P}\delta_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\tau}_{ij} + \overline{\rho}(\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i - \widetilde{u_j u_i})\right) \tag{1.110}$$

énergie:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{u}_i + \overline{P u_i}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\tau_{ij} u_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{q}_i + \overline{\rho}(\widetilde{E u_i} - \widetilde{E}\widetilde{u}_i)) \tag{1.111}$$

La densité filtrée est obtenue par simple filtrage de l'Eq. 1.93:

$$\overline{\rho} = \sum_{k=1}^{N} \overline{\rho}_k \tag{1.112}$$

De nombreux termes nouveaux apparaissent dans les Eq. 1.109 à 1.111 et doivent donc être modélisés. Pour faciliter cette modélisation, les grandeurs telles que ν, W, C_p, etc... seront supposées constantes.

Tout d'abord, on remarque que les termes non-linéaires $\overline{\rho u_i \phi}$ issus de la convection ont tous été traités de la même manière:

$$\overline{\rho u_i \phi} = \overline{\rho}\widetilde{u_i \phi} = \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{\phi} + \overline{\rho}\left(\widetilde{u_i \phi} - \widetilde{u}_i\widetilde{\phi}\right) \tag{1.113}$$

Ainsi, les termes convectifs des Eq. 1.109 à 1.111 ne font intervenir que des quantités connues.

En outre, le terme $\widetilde{u_i\phi} - \widetilde{u}_i\widetilde{\phi}$ présente l'avantage de bien se prêter à la modélisation. En effet, cette quantité représente la contribution non-résolue – et donc de petite échelle – de la variation locale de ϕ. La puissance de la LES vient justement du fait que dans la zone inertielle du spectre d'énergie, le comportement de la turbulence est identique à toutes les échelles: il s'agit d'une cascade qui tranfère l'énergie des grandes structures vers les plus petites. Ce comportement universel justifie donc une modélisation identique pour toutes ces échelles.
C'est la différence principale avec la modélisation RANS qui essaye d'inclure dans le même modèle les petites échelles de la turbulence mais également les grandes. Or il est bien connu que si le comportement des petites échelles est universel, il n'en est rien pour les grandes structures de l'écoulement. En effet, la dynamique de ces grandes structures est très fortement liée à la géométrie de l'écoulement ainsi qu'aux conditions opératoires et varie donc énormément d'un écoulement à un autre. Il semble donc utopique de vouloir modéliser une fois pour toute le comportement de ces grandes structures.

Les analyses théoriques ainsi que de nombreux résultats expérimentaux ont montré que dans une THI, les contributions non-résolues avaient un rôle essentiellement diffusif. Cette constatation justifie donc l'écriture du terme $\widetilde{u_i\phi} - \widetilde{u}_i\widetilde{\phi}$ sous la forme de Boussinesq:

$$\mathcal{F}_{i,\phi}^{sgs} = \overline{\rho}(\widetilde{u_i\phi} - \widetilde{u}_i\widetilde{\phi}) = -\overline{\rho}\nu_\phi^t \frac{\partial\widetilde{\phi}}{\partial x_i} \tag{1.114}$$

où le coefficient ν_ϕ^t est homogène à une diffusivité: ce coefficient caractérise donc la diffusion de la quantité ϕ à travers l'agitation turbulente. Le flux ainsi obtenu est alors proportionnel au gradient de $\widetilde{\phi}$, c'est à dire au gradient de ϕ *à l'échelle du filtre*. Cette modélisation n'est donc justifiée que si la taille du filtre se situe dans la zone inertielle du spectre d'énergie, et que l'hypothèse de Kolmogorov peut s'appliquer.

On peut donc écrire les termes non-résolus des équations filtrées:

- sur la quantité de mouvement:

$$\tau_{ij}^{sgs} = \overline{\rho}(\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i - \widetilde{u_j u_i}) \tag{1.115}$$

$$= 2\overline{\rho}\nu_t\widetilde{S}_{ij} + \frac{1}{3}\tau_{kk}^{sgs}\delta_{ij} \tag{1.116}$$

  où ν_t est la viscosité turbulente et $\widetilde{S}_{ij}$ est le tenseur des déformations construit à partir des vitesses filtrées:

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\widetilde{u}_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.117}$$

  Ce tenseur est *a priori* différent de la valeur filtrée du tenseur des déformations car l'opération de filtrage de Favre et la dérivation ne commutent pas forcément. Si ces deux opérateurs commutent (cf. plus bas), il s'agit du même tenseur, d'où l'abus de notation pour $\widetilde{S}_{ij}$. Le détail de la modélisation de ν_t est donné à la section 1.3.5.

- sur la densité de l'espèce k:

$$J_{i,k}^{sgs} = \overline{\rho}(\widetilde{Y_k u_i} - \widetilde{Y}_k\widetilde{u}_i) \tag{1.118}$$

$$= -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{S_{c,k}^t}\frac{W_k}{W}\frac{\partial\widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \overline{\rho}\sum_{j=1}^{N}\frac{\nu_t}{S_{c,j}^t}\widetilde{Y}_j\frac{W_j}{W}\frac{\partial\widetilde{X}_j}{\partial x_i} \tag{1.119}$$

  où $S_{c,k}^t$ est le nombre de Schmidt turbulent de l'espèce k. Ce nombre de Schmidt est pris égal à 0,9 pour toutes les espèces. On constate l'introduction de la quantité $V_i^{c,t} = \overline{\rho}\sum_{j=1}^{N}\frac{\nu_t}{S_{c,j}^t}\widetilde{Y}_j\frac{W_j}{W}\frac{\partial\widetilde{X}_j}{\partial x_i}$. Il s'agit d'une vitesse de correction turbulente dont le but est là encore de garantir la conservation de la masse.

- sur l'énergie:

$$q_i^{sgs} = \overline{\rho}(\widetilde{Eu_i} - \widetilde{E}\widetilde{u}_i) \tag{1.120}$$

$$= -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{P_r^t}C_p\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}J_{i,k}^{sgs}h_{sk} \tag{1.121}$$

  Il s'agit donc de la somme de deux termes liés à l'agitation turbulente: d'une part la diffusion de la température par la turbulence non-résolue (en loi de Fourier avec un nombre de Prandtl turbulent $P_r^t = 0{,}9$) et d'autre part le transport de l'enthalpie par la diffusion différentielle non-résolue des espèces.

Le traitement des flux laminaires filtrés se fait de la façon suivante:

- pour les contraintes visqueuses $\overline{\tau}_{ij}$:

  En filtrant l'Eq. 1.99, on obtient:

$$\overline{\tau}_{ij} = \overline{\rho}\nu \left(\widetilde{\frac{\partial u_j}{\partial x_i}} + \widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \frac{2}{3}\widetilde{\frac{\partial u_k}{\partial x_k}}\delta_{ij} \right) \tag{1.122}$$

  On retrouve donc le problème de la commutaion des opérateurs de Favre et de la dérivation. On peut montrer que:

$$\widetilde{\frac{\partial \phi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_i} + \frac{1}{\overline{\rho}} \left(\widetilde{\phi}\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} - \overline{\phi\frac{\partial \rho}{\partial x_i}} \right) \tag{1.123}$$

  Il faut donc faire l'hypothèse que le dernier terme du membre de droite de cette équation est nul pour pouvoir écrire:

$$\widetilde{\frac{\partial \phi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_i} \tag{1.124}$$

  L'Eq. 1.122 s'écrit alors uniquement en fonction des variables connues:

$$\overline{\tau}_{ij} = 2\overline{\rho}\nu \left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\widetilde{S}_{kk}\delta_{ij} \right) \tag{1.125}$$

- pour les flux d'espèces $\overline{J}_{i,k}$:

  L'hypothèse de commutativité permet d'écrire directement:

$$\overline{J}_{i,k} = -\overline{\rho}\frac{\nu}{S_{c,k}}\frac{W_k}{W}\frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \overline{\rho}\sum_{j=1}^{N}\frac{\nu}{S_{c,j}}\widetilde{Y}_j\frac{W_j}{W}\frac{\partial \widetilde{X}_j}{\partial x_i} \tag{1.126}$$

- pour le flux de chaleur $\overline{q}_i$:

  Le calcul de ce terme se fait de la même manière et on trouve:

$$\overline{q}_i = -\overline{\rho}\frac{\nu}{P_r}C_p\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{N}\overline{J}_{i,k}h_{sk} \tag{1.127}$$

Les termes croisés $\overline{Pu_i}$ et $\overline{\tau_{ij}u_j}$ sont modélisés par:

$$\overline{Pu_i} \approx \overline{P}\widetilde{u}_i \tag{1.128}$$

$$\overline{\tau_{ij}u_j} \approx \overline{\tau}_{ij}\widetilde{u}_j \tag{1.129}$$

Ces deux modèles sont évidemment simplistes mais n'introduisent pas une erreur trop importante. En effet, le terme $\overline{\tau_{ij}u_j}$ (travail des forces visqueuses) est très souvent petit en comparaison des autres flux et le terme $\overline{Pu_i}$ (travail des forces de pression) n'a de l'importance que quand l'écoulement est fortement compressible. Ce n'est en général pas le cas dans nos simulations où la pression ne présente pas de fort gradient (absence de chocs).

La température $\widetilde{T}$ est obtenue en inversant la définition de l'énergie filtrée. Deux hypothèses supplémentaires doivent être faites pour obtenir le résultat:

- $\widetilde{u_i u_i} \approx \widetilde{u}_i.\widetilde{u}_i$:

  Cette hypothèse est manifestement fausse puisque cela revient à négliger la contribution de l'énergie cinétique non-résolue. L'erreur ainsi commise reste cependant faible car l'énergie cinétique ne représente qu'un portion infime de l'énergie totale (pour des nombres de Mach faibles, ce qui est notre cas) et l'énergie cinétique non-résolue une part plus petite encore.
- $\overline{\rho_k e_{sk}} = \overline{\rho Y_k \int_0^T C_{vk}(\theta)\ \mathrm{d}\theta} \approx \overline{\rho}\widetilde{Y}_k \int_0^{\widetilde{T}} C_{vk}(\theta)\ \mathrm{d}\theta$:

  Cette approximation est beaucoup plus délicate à justifier mais c'est la seule manière d'obtenir la température filtrée simplement.

La pression $\overline{P}$ est obtenue quant à elle en filtrant l'équation d'état du gaz (Eq. 1.14). Il faut pour cela utiliser l'hypothèse que la masse molaire W est une constante pour le filtrage.

$$\overline{P} = \sum_{k=1}^{N} \overline{\rho r T} = \overline{\rho} r \widetilde{T} \tag{1.130}$$

1.3.4 Récapitulation des équations filtrées

variables transportées:

$\overline{\rho}\widetilde{Y}_k$, $\overline{\rho}\widetilde{u}_i$ et $\overline{\rho}\widetilde{E}$

densité de l'espèce k:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_k\widetilde{u}_i\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(J_{i,k}^{tot}\right) \tag{1.131}$$

avec:

$$J_{i,k}^{tot} = \overline{J}_{i,k} + J_{i,k}^{sgs} = -\overline{\rho} D_k^{tot} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} + \overline{\rho} \sum_{j=1}^{N} D_j^{tot} \widetilde{Y}_j \frac{W_j}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_j}{\partial x_i} \tag{1.132}$$

quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{u}_i + \overline{P} \delta_{ij} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_{ij}^{tot} \right) \tag{1.133}$$

avec:

$$\tau_{ij}^{tot} = \overline{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^{sgs} = 2\overline{\rho} \nu^{tot} \widetilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \overline{\rho} \nu^{tot} \widetilde{S}_{kk} \delta_{ij} \qquad \text{et} \qquad \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \tag{1.134}$$

énergie:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \widetilde{E} \widetilde{u}_i + \overline{P} \widetilde{u}_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\tau}_{ij} \widetilde{u}_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(q_i^{tot} \right) \tag{1.135}$$

avec:

$$q_i^{tot} = \overline{q}_i + q_i^{sgs} = \overline{\rho} C_p D_T^{tot} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} J_{i,k}^{tot} h_{sk} \tag{1.136}$$

Les coefficients ν^{tot}, D_T^{tot} et D_k^{tot} sont définis par $\nu^{tot} = \nu + \nu^t$, $D_T^{tot} = \frac{\nu}{P_r} + \frac{\nu^t}{P_r^t}$ et $D_k^{tot} = \frac{\nu}{S_{c,k}} + \frac{\nu^t}{S_{c,k}^t}$.

Ces équations s'écrivent donc formellement de la même façon que leurs contreparties non-filtrées, en remplaçant simplement les coefficients de diffusion laminaire par des coefficients incluant la diffusion turbulente.

1.3.5 Modèles pour la viscosité turbulente ν^t

La section précédente a montré que sous certaines hypothèses, toutes les contributions non-résolues (τ_{ij}^{sgs}, $J_{i,k}^{sgs}$ et q_i^{sgs}) pouvaient être modélisées par une loi de type Boussinesq. Avec l'introduction des nombres de Schmidt et de Prandtl turbulents, la modélisation se fait donc uniquement à travers la viscosité turbulente ν_t.

Le modèle le plus répandu pour modéliser cette viscosité turbulente ν_t est le modèle de Smagorinsky [Lesieur, 1990 £1363][Deardorff, 1970 £1163][Germano, 1991 £1405][Sagaut, 1998 £1372][Kim, 1987 £1046][Moin, 1982 £288]:

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij}} \tag{1.137}$$

où C_S est une constante du modèle (constante de Smagorinsky), Δ la taille du filtre et $\widetilde{S}_{ij}$ le tenseur des déformations résolues. Quand le filtrage n'est pas explicite mais basé sur le filtre implicite du maillage, Δ est estimé à partir de la taille de la cellule où est calculé ν_t. Par exemple, sur un maillage non-structuré, on utilise en général $\Delta = (V_{cell})^{1/3}$, où V_{cell} est le volume de la cellule de calcul.

De façon plus générale, la viscosité turbulente ν_t est souvent modélisée comme le produit du carré d'une longueur caractéristique Δ (la taille du filtre ou de la cellule de calcul) et d'une fréquence caractéristique f_ν:

$$\nu_t = C\Delta^2 f_\nu \tag{1.138}$$

Dans le cas du modèle de Smagorinsky, cette fréquence est calculée uniquement à partir du tenseur des déformations du champ résolu $\widetilde{S}_{ij}$:

$$f_\nu = \sqrt{2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}} \tag{1.139}$$

Le terme $\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}$ est le second invariant du tenseur des déformations. Le principal problème de cette formulation est qu'elle ne prend en compte que les zones de fort étirement mais pas celles à fort rotationnel. Or Wray et Hunt [Hunt, 1978 £676] ont montré qu'une part importante de la dissipation avait également lieu dans les zones de vorticité élevée. En outre, cette formulation présente l'inconvénient de conduire à une mauvaise dépendence $\nu_t(y)$ en fonction de la distance à la paroi y dans des écoulements confinés. En effet, on peut montrer que le comportement théorique de la viscosité turbulente en proche paroi est $\nu_t = O(y^3)$, alors que le modèle de Smagorinsky conduit à une dépendence en $\nu_t = O(1)$.

Pour remèdier à ces problèmes, Ducros et Nicoud [Nicoud, 1999 £1562] ontdéveloppé une formulation originale pour le calcul de ν_t. Dans cette fomulation la fréquence f_ν est calculée de la façon suivante:

$$\nu_t = \frac{(s^d_{ij}s^d_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij})^{5/2}(s^d_{ij}s^d_{ij})^{5/4}} \tag{1.140}$$

où la quantité s^d_{ij} est donnée par:

$$s^d_{ij} = \frac{1}{2}\left(\widetilde{g}^2_{ij} + \widetilde{g}^2_{ji}\right) - \frac{1}{3}\widetilde{g}^2_{kk}\delta_{ij} \qquad \widetilde{g}^2_{ij} = \widetilde{g}_{ik}\widetilde{g}_{kj} \qquad \widetilde{g}_{ij} = \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \tag{1.141}$$

La description détaillée des propriétés de cette modélisation est donnée dans [Nicoud, 1999 £1562] et seuls les deux points principaux sont rappelés ici:

- l'opérateur utilisé pour calculer f_ν est basé sur le taux d'étirement mais également sur le rotationnel. Cet opérateur permet en outre de distinguer les zones où la turbulence est essentiellement bidimensionnelle et d'y appliquer une viscosité de sous-maille faible: le développement des instabilités linéaires dans les zones de transition est donc possible.
- un deuxième avantage de cette formulation tient dans le fait que la viscosité turbulente ainsi définie a un comportement réaliste en proche paroi: ν_t se comporte comme y^3 quand la distance à la paroi y tend vers 0.

C'est ce modèle (WALE) qui a été utilisé pour effectuer tous les calculs de cette thèse (non-réactifs et réactifs).

1.3.6 Modèle de la flamme épaissie

Colin et al. [Colin, 2000 £1392] ont montré que les Eq. 1.131 à 1.136 n'étaient pas adéquates pour simuler des flammes par LES, même en introduisant des taux de réaction filtrés $\overline{\dot{\omega}_k}$ et $\overline{\dot{\omega}_E}$ dans les équations des espèces et de l'énergie. En effet, pour une flamme turbulente prémélangée, les propriétés du front de flamme instantané sont identiques à celles d'une flamme laminaire qui aurait les même propriétés thermochimiques locales (Y_k, T): c'est l'hypothèse de flamelette. Or l'épaisseur δ_L^1 d'une flamme laminaire (et donc d'une flamme turbulente instantanée) est en générale comprise entre 0,1 mm et 1 mm. Cette épaisseur est donc inférieure à la taille des mailles utilisées pour simuler des écoulements réalistes (de l'ordre du millimètre). En outre, pour avoir une estimation correcte des taux de réaction d'un point de vue numérique, il faut en général que ceux-ci soient résolus sur une dizaine de points de maillage. En conclusion, une flamme turbulente ne peut être résolue sur un maillage de LES par simple filtrage des équations réactives.

La solution consistant à raffiner le maillage pour pouvoir résoudre correctement le front

n'étant pas envisageable, une technique proposée [O'Rourke, 1979 £752] est d'épaissir la flamme artificiellement pour qu'elle puisse être résolue sur le maillage dont on dispose. Cette technique s'appuie sur la constatation que dans une flamme laminaire prémélangée, la vitesse de flamme et l'épaisseur de flamme varient comme $s_L^1 \propto \sqrt{DW}$ et $\delta_L^1 \propto D/s_L^1$, où D est une estimation des coefficients de diffusion et W une estimation du taux de réaction. Si l'on remplace D par $F.D$ et W par W/F, on obtient donc une flamme dont la vitesse s_L^F est identique à celle de la flamme non-épaissie s_L^1 mais dont l'épaisseur vaut $\delta_L^F = F.\delta_L^1$. Le coefficient F est le facteur d'épaississement. Cet argument, exact pour une flamme prémélangée, monidimensionnelle et stationnaire, fournit également une bonne approximation dans les autres types de configurations.

Les équations d'une flamme laminaire épaissie sont donc:

densité de l'espèce k:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(F.J_{i,k}) + \frac{1}{F}\dot{\omega}_k \tag{1.142}$$

quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_j u_i + P\delta_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}\right) \tag{1.143}$$

énergie:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left((\rho E + P)u_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}u_j\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(F.q_i) + \frac{1}{F}\dot{\omega}_E \tag{1.144}$$

Les grandeurs $J_{i,k}$, τ_{ij} et q_i sont définies exactement de la même façon que dans le cas non-épaissi (voir section 1.2.5). On remarque que l'épaississement ne porte que sur les équations des espèces et de l'énergie. En effets, les termes sources dûs aux réactions chimiques n'apparaissent que dans ces deux équations et elles seules nécessitent ce traitement. En revanche, l'équation sur la quantité de mouvement n'est pas affectée car les réactions chimiques ne créent pas de termes sources sur cette grandeur.

L'avantage principal de cette méthode par rapport à une méthode type G-equation est que l'on garde une formulation de type Arrhenius pour les taux de réactions. Les phénomènes tels que l'allumage, l'extinction, la stabilisation de flamme ou l'interaction flamme/paroi sont donc directement pris en compte. Il n'en est pas de même pour les méthodes basées

sur des modèles chimiques figés, qui font tous une hypothèse de type flamelette et qui sont mis en défaut lorsque la flamme cesse de rentrer dans ce cadre, par exemple près des parois ou dans les zones d'allumage.

Quand on s'intéresse aux flammes turbulentes, un problème nouveau apparait: l'interaction de la turbulence avec la flamme épaissie est en effet différente de celle avec la flamme non-épaissie. Pour prendre en compte ce phénomène, on introduit alors un terme supplémentaire dans les équations: la fonction d'efficacité E.

Les équations d'une flamme turbulente épaissie sont alors:

densité de l'espèce k:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_k\widetilde{u}_i\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(E.F.\overline{J}_{i,k}\right) + \frac{E}{F}\dot{\omega}_k \tag{1.145}$$

quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i + \overline{P}\delta_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}^{tot}\right) \tag{1.146}$$

énergie:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{u}_i + \overline{P}\widetilde{u}_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\tau}_{ij}\widetilde{u}_j\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(E.F.\overline{q}_i\right) + \frac{E}{F}\dot{\omega}_E \tag{1.147}$$

On remarque là encore que la fonction d'efficacité ne porte que sur les équations de $\overline{\rho}\widetilde{Y}_k$ et $\overline{\rho}\widetilde{E}$ pour les mêmes raisons que précédemment. Par contre, à la fois les taux de réactions et les phénomènes diffusifs ont été multipliés par E pour pouvoir garder la même épaisseur de flamme que dans le cas laminaire épaissi ($\delta_T^F = \delta_L^F$), mais pour que la nouvelle vitesse de flamme soit égale à $s_T^F = E.s_L^F$.

Le taux de réaction utilisé est le taux de réaction laminaire calculé à partir des variables filtrées et multiplié ensuite par E/F. Il ne s'agit donc pas d'un taux de réaction filtré.

Les flux non-résolus $J_{i,k}^{sgs}$ et q_i^{sgs} n'apparaissent pas dans ces équations. En effet les termes $E.F.\overline{J}_{i,k}$ et $E.F.\overline{q}_i$ prennent déja en compte les flux non-résolus grâce à la fonction d'efficacité E. En outre Colin et al. [Colin, 1999 £1327] ont montré que pour garantir la bonne épaisseur de flamme et la bonne vitesse de flamme, les flux d'espèces et de chaleur doivent impérativement s'écrire sous cette forme.

Négliger les termes non-résolus $J_{i,k}^{sgs}$ et q_i^{sgs} implique cependant que cette formulation n'est valable que dans la zone proche de la flamme où la combustion domine l'écoulement. Par contre, dans les zones éloignées de la flamme ce modèle devient faux puisque la turbulence non-résolue n'est pas prise en compte. On verra comment régler ce problème à la section 1.3.7.

Il faut finalement trouver un modèle pour cette fonction d'efficacité, qui rende compte de l'interaction de la turbulence avec la flamme épaissie. Le but de la fonction d'efficacité est de compenser la diminution du taux de réaction dû à l'épaississement, suite à la diminution de surface de flamme disponible. On peut donc écrire simplement:

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^1)}{\Xi(\delta_L^F)} = \frac{\Xi(\delta_L^1)}{\Xi(F.\delta_L^1)} \tag{1.148}$$

où $\Xi(\delta)$ est le plissement d'une flamme d'épaisseur δ. En écrivant l'équation de transport de la densité de surface de flamme filtrée et en faisant l'hypothèse d'un équilibre local, (pas de production ni de destruction), on obtient pour le plissement:

$$\Xi(\delta) = 1 + a\frac{\Delta}{s_L^1}a_T(\delta) \tag{1.149}$$

où a est une constante du modèle, Δ la taille du filtre LES et a_T une estimation de l'étirement de la surface de la flamme au niveau non-résolu. Une analyse spectrale complète par DNS d'interaction flamme/vortex [Colin, 1999 £1327] permet de trouver un modèle pour cet étirement:

$$a_T(\delta) = \Gamma\left(\frac{\Delta}{\delta}, \frac{u_\Delta^{'}}{s_L^1}\right)\frac{u_\Delta^{'}}{\Delta} \tag{1.150}$$

Dans cette équation, $u_\Delta^{'}$ est une estimation de la vitesse turbulente de sous-maille et $\Gamma(\Delta/\delta, u_\Delta^{'}/s_L^1)$ est un paramètre qui prend en compte les rapports d'échelles entre la turbulence et la flamme. Ce terme Γ provient de l'intégration de l'étirement de la flamme sur toutes les échelles comprises entre l'échelle de Kolmogorov η et la taille du filtre Δ. Le plissement d'une flamme d'épaisseur δ s'écrit donc finalement:

$$\Xi(\delta) = 1 + a\Gamma\left(\frac{\Delta}{\delta}, \frac{u_\Delta^{'}}{s_L^1}\right)\frac{u_\Delta^{'}}{s_L^1} \tag{1.151}$$

Ce modèle exprime simplement qu'un tourbillon aura plus de mal à interagir avec une flamme d'épaisseur $F.\delta_L^1$ qu'avec une flamme d'épaisseur δ_L^1, sauf les très gros tourbillons pour qui les flammes épaissies et non-épaissies restent identiquement minces.

Il est également possible d'écrire un modèle dynamique pour estimer cette fonction [Charlette, 2002 £1561][Charlette, 2002 £1560] mais ce modèle n'a pas été utilisé dans cette thèse et n'est pas décrit ici.

1.3.7 Modèle général pour les cas réactifs et non-réactifs

On dispose donc de deux modèles différents pour nos simulations:

1. les équations filtrées de la mécanique des fluides non-réactive pour les zones éloignées de la flamme,
2. et un modèle de combustion turbulente pour la zone de flamme.

Il est donc intéressant de coupler les deux via un détecteur de flamme. Ce senseur est un simple paramètre α qui varie entre 0 dans les zones non-réactives et 1 dans les zones réactives. Il existe de nombreuses manières de construire un tel détecteur, l'important étant qu'il recouvre largement le front de flamme épaissie.

Les équations utilisées pour la LES réactives sont donc au final:

densité de l'espèce k:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_k\widetilde{u}_i\right) &= -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(EF(\alpha)\,\overline{J}_{i,k} + (1-\alpha)J_{i,k}^{sgs}\right) \\ &\quad + \frac{E}{F(\alpha)}\dot{\omega}_k \end{aligned} \tag{1.152}$$

quantité de mouvement:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i + \overline{P}\delta_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tau_{ij}^{tot}\right) \tag{1.153}$$

énergie:

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}\widetilde{E}\widetilde{u}_i + \overline{P}\widetilde{u}_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\tau}_{ij}\widetilde{u}_j\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(EF(\alpha)\,\overline{q}_i + (1-\alpha)q_i^{sgs}\right)$$

$$+\frac{E}{F(\alpha)}\dot{\omega}_E \tag{1.154}$$

avec:

$$F(\alpha) = 1 + (F_{\max} - 1).\alpha \tag{1.155}$$

Dans le cas $\alpha = 0$, on a $F = 1$ et donc $E = 1$ et on retrouve les équations non-réactives filtrées: les termes $\dot{\omega}_k$ et $\dot{\omega}_E$ sont toujours présent, mais le senseur a détecté que la zone était non-réactive et ces termes sont très petits en comparaison des autres. Au contraire, dans le cas $\alpha = 1$, on obtient les équations du modèle de combustion turbulente avec $F = F_{\max}$. Le senseur α a donc deux effets: faire varier l'épaississement de $F(0) = 1$ à $F(1) = F_{\max}$, et doser la quantité de flux filtré ou de sous-maille dans les équations, afin de passer d'un modèle à l'autre.
En résumé, les Eq. 1.152 à 1.154 constituent un jeux d'équations hybrides qui ont les propriétés suivantes:

- dans les cas parfaitement prémélangés, elles redonnent le modèle de flamme épaissie de Colin et fonctionnent comme un modèle de G-equation en propageant la flamme turbulente à la vitesse s_T^F.
- loin des flammes, ce sont les équations de la LES habituelles pour le mélange turbulent.
- près des parois ainsi que dans les zones d'allumage, elles miment un fonctionnement physique raisonnable et aucun traitement ad-hoc n'y est requis.
- plus l'épaississement est faible et plus ce modèle se rapproche des équations non-filtrées de la mécanique des fluides réactive: on tend alors naturellement vers une DNS.

Il est clair que cette technique de raccordement entre deux modèles posent de nombreux problèmes théoriques qui n'ont pas été abordés ici. Les résultats obtenus sont cependant pleinement satisfaisants sur de nombreux types de problèmes: THI, flamme laminaire, couche de mélange non-réactives et flamme turbulente dans des configurations industrielles. En outre, de nombreux autres groupes travaillant sur la combustion turbulente utilisent une

méthode hybride similaire pour passer par exemple d'un modèle de flamme de prémélange à un modèle de flamme de diffusion [Vervisch, 2000 £1498][Pitsch, 2002 £1601][Duchamp de Lageneste, 2001 £1587].

Chapitre 2

Méthodes numériques

Les méthodes numériques nécessaires pour faire un calcul LES avec un code 'TR-complet' tel qu'AVBP 5 sont nombreuses. Il s'agit notamment de:

- la discrétisation des termes spatiaux et temporels,
- la viscosité artificielle,
- le calcul des différentes grandeurs thermodynamiques,
- et les conditions aux limites,

Certaines ne demandent que peu de modifications par rapport à celles utilisées dans les codes 'TR-simples' (AVBP 4) alors que d'autres nécessitent le développement de nouvelles méthodes. Nous allons passer ces différents points en revue dans ce chapitre.

2.1 Principe général d'AVBP

Le code AVBP s'appuie sur les trois idées directrices suivantes:

- profiter de la souplesse des maillages non-structurés,
- être utilisable sur les machines de calcul les plus puissantes,

– avoir des schémas numériques aussi précis que possible.

Nous allons brièvement expliquer ce que signifient ces trois points car ils conditionnent les méthodes numériques utilisées par la suite.

2.1.1 Gestion des maillages non-structurés

Rappelons tout d'abord qu'il existe deux sortes de maillages:

– les maillages cartésiens dans lesquels les éléments du maillage (noeuds, cellules, arêtes, faces,...) peuvent être repérés simplement à partir de leur coordonnées cartésiennes (I,J,K). Ce type de maillage ne peut donc être composé que de quadrilatères en 2D et d'héxaèdres en 3D. L'avantage de ce type de maillage est qu'il permet de construire des solveurs simples et très efficaces en terme de temps de calcul. L'inconvénient majeur est qu'il est très difficile de représenter des géométries complexes avec des maillages cartésiens.
– les maillages non-cartésiens (ou non-structurés) pour lesquels une telle représentation par coordonnées n'est pas possible. Ces maillages possèdent une très grande souplesse d'utilisation car ils permettent de mailler facilement n'importe quelle géométrie. En contrepartie, la structure du solveur s'en trouve alourdie et sa vitesse d'exécution ralentie car il faut utiliser des tables de correspondance pour repérer les éléments du maillage.

Un des objectifs d'AVBP est de pouvoir calculer des cas réels et pas seulement des configurations académiques: l'utilisation de maillages non-structurés est donc nettement préférable, malgré une perte d'efficacité par rapport à un code structuré.

2.1.2 Parallélisme et portabilité

La qualité des calculs en LES est directement liée à la finesse des maillages utilisés. En effet, en utilisant un maillage plus fin, la gamme d'échelles résolues augmente et l'influence

de la modélisation (qui est une source d'erreur) est réduite. Il est donc naturel de vouloir faire des calculs sur des maillages toujours plus importants afin de produire les meilleurs résultats possibles.
Cette surenchère en terme de taille de maillage n'est cependant possible que si l'on dispose de machines suffisament puissantes pour pouvoir effectuer les calculs et que l'on est capable d'exploiter cette puissance. Pour répondre à cette attente en terme de puissance de calcul, les super-calculateurs actuels sont dotés d'un très grand nombre de processeurs. Il existe deux manières d'exploiter ce nombre élevé de processeurs: les machines vectorielles et les machines parallèles. Le choix a été fait d'optimiser le code AVBP afin d'exploiter au maximum la catégorie des machines massivement parallèles (car ce sont les plus répandues). Cela implique donc que la gestion du parallélisme soit aussi efficace que possible.

Pour cela, le parallélisme dans AVBP est articulé autour du concept de partitionnement du domaine de calcul en sous-domaines. Chaque sous-domaine est alors attribué à un processeur qui ne communique avec les autres que par l'intermédiaire des noeuds situés à la frontière entre les sous-domaines. L'échange de données est ainsi réduit au minimum et cela permet d'utiliser un nombre de processeur très important sans dégradation notable des performances.
Enfin, la portabilité est assurée par l'écriture du code en Fortran 77 standard qui est disponible sur toutes les plateformes de calculs (IBM, Compaq, SGI, SUN, Cluster de PC, ...) et l'utilisation de la bibliothèque MPI (elle aussi disponible en standard) pour la gestion des communications entre les différents processeurs.

2.1.3 LES et précision des schémas numériques.

La précision des schémas numériques est essentielle en LES: il ne sert à rien de développer des modèles très précis pour les termes de sous-maille si le schéma numérique introduit des erreurs du même ordre de grandeur que la modélisation. Il est donc primordial d'avoir des schémas numériques aussi précis que possible pour effectuer des simulations qui soient gouvernées par la physique et pas par le modèle numérique. Dans AVBP, deux types de

schémas numériques sont disponibles: les schémas Volumes Finis (VF) et les schémas Éléments Finis (EF). Ces deux méthodes permettent d'écrire simplement des schémas centrés en espace sur des maillages quelconques. Sans traitement particulier, les schémas issus de ces méthodes ont une convergence spatiale du deuxième ordre. Bien qu'ils garantissent un taux de dissipation numérique faible, ces schémas présentent un taux de dispersion qui reste relativement élevé. En LES, cela nuit donc à la qualité des calculs car la dispersion numérique affecte majoritairement les petites structures de l'écoulement qui jouent un rôle essentiel. Il n'est cependant pas possible d'écrire des schémas VF d'ordre supérieur sur un maillage quelconque. Par contre, il existe une classe de schémas EF qui permet d'atteindre une convergence du troisème ordre en espace sur des maillages non-structurés: les schémas de Taylor-Galerkin [Colin, 1998 £1328][Colin, 2000 £1554]. Ces schémas présentent à la fois un taux de dissipation et de dispersion très faible. Ils conviennent donc parfaitement à des calculs LES, mais restent cependant peu utilisés à cause de leur coût de calcul relativement élevé (de 2 à 3 fois supérieur à celui d'un schéma du second ordre). Ces deux types de schémas ont été utilisés dans la thèse. Un schéma de type Lax-Wendroff Volume-Finis (LW-VF) d'ordre 2 en temps et en espace a permis d'effectuer rapidement les calculs des phases non-physique (initialisation, transitoires, allumage, ...). Pour les calculs LES destinés à l'analyse, le schéma TTGC-EF d'ordre 3 en temps et espace a été utilisé.

En ce qui concerne les schémas temporels, il existe principalement deux méthodes: les schémas explicites d'une part et les schémas implicites d'autre part.
Les schémas explicites s'écrivent sous la forme:

$$\mathbf{U}^{n+1} = f(\mathbf{U}^n) \tag{2.1}$$

Des opérations simples sur des quantités connues permettent donc de construire directement les variables transportées à l'instant t^{n+1}.
Au contraire, les schémas implicites s'écrivent

$$\mathbf{U}^{n+1} = f(\mathbf{U}^{n+1},\mathbf{U}^n) \tag{2.2}$$

La fonction permettant d'avancer le schéma en temps doit donc être évaluée en fonction des variables à l'instant t^{n+1} qui sont inconnues, d'où le nom de schéma implicite. Après

discrétisation cela revient généralement à inverser un système linéaire dont la taille est égale aux dimensions du maillage (le nombre de cellules ou le nombre de noeuds par exemple). Ce système peut donc atteindre plusieurs millions de degrés de liberté.
Le but ici n'est pas de comparer les mérites respectifs des schémas implicites et explicites, mais il est certain que les codes explicites sont beaucoup plus simples à implémenter que les codes implicites. En contrepartie, les schémas explicites sont souvent moins robustes que les schémas implicites: en général les schémas implicites sont inconditionellement stables alors que les schémas explicites sont limités par des conditions de stabilités de type CFL ou Fourier.
Les schémas explicites sont également plus précis que les schémas implicites ce qui est primordial dès lors que l'on veut faire de la LES: c'est donc ce type de schéma qui a été retenu dans AVBP.

2.2 Discrétisation des équations et schémas

Comme il à été mentionné précédemment, AVBP dispose de deux types de méthodes numériques: les schémas VF (décrit à la section 2.2.1) et les schémas EF (section 2.2.2). La section 2.2.3 rappelle les expressions des matrices jacobiennes des flux qui sont utilisées dans ces deux types de schémas. La discrétisation temporelle est exposée à la section 2.2.4.

Pour discrétiser les équations, on notera $\mathbf{U}$ le vecteur des variables transportées:

$$\mathbf{U} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho Y_k). \tag{2.3}$$

Dans le cas d'un calcul LES, le vecteur $\mathbf{U}$ est remplacé par le vecteur $\overline{\mathbf{U}}$ des variables filtrées.
Les équations à discrétiser sont alors écrites sous la forme conservative et sans termes sources (le traitement de la chimie se fait séparément):

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla.\mathsf{F} = 0 \tag{2.4}$$

où $\nabla.\mathsf{F}$ est la divergence de la matrice des flux F. Dans le cas laminaire cette matrice

contient les flux Euler et visqueux classiques. En LES, elle contient les flux Euler et visqueux filtrés ainsi que les flux de sous-maille.

2.2.1 La méthode des Volumes Finis

La méthode VF d'AVBP est basée sur le formalisme cell-vertex: les inconnues sont stockées aux noeuds du maillage. Le principe de cette méthode est d'intégrer les termes de l'Eq. 2.4 sur une cellule Ω_j du maillage:

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \int_{\Omega_j} \nabla.\mathsf{F} \, \mathrm{d}V = 0 \tag{2.5}$$

Après quelques transformations, cela s'écrit:

$$\frac{\partial \mathbf{U}_{\Omega_j}}{\partial t} = -\frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial\Omega_j} \mathsf{F}.\mathbf{n} \, \mathrm{d}S \tag{2.6}$$

où $\mathbf{U}_{\Omega_j}$ est la valeur de $\mathbf{U}$ au centre de la cellule Ω_j, V_{Ω_j} le volume de cette cellule, $\partial\Omega_j$ la surface délimitant cette cellule et $\mathbf{n}$ le vecteur unitaire normal à cette surface orienté vers l'extérieur. La méthode retenue pour calculer numériquement le résidu $\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial\Omega_j} \mathsf{F}.\mathbf{n} \, \mathrm{d}S$ est celle décrite dans [£1164][£1545][Rudgyard,1994 £1166]:

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{[\mathrm{Nd}]V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \mathsf{F}_i.\mathbf{dS}_i \tag{2.7}$$

où [Nd] représente le nombre de dimensions spatiales du problème, F_i la valeur de la matrice des flux au noeud i et $\mathbf{dS}_i$ le vecteur normal défini à ce noeud. La sommation se fait sur tous les sommets i de la cellule Ω_j. Il faut noter que toute l'information relative à la géométrie de la cellule Ω_j est contenue dans le vecteur $\mathbf{dS}_i$. Celui-ci peut être interprété comme la somme vectorielle des vecteurs normaux aux faces ayant le noeud i pour sommet, pondérés par la surface de la face. En outre, pour s'assurer que la formulation reste consistante, il faut estimer le volume V_{Ω_j} de la cellule Ω_j de la manière suivante:

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{[\mathrm{Nd}]^2} \sum_{i \in \Omega_j} \mathbf{x}_i.\mathbf{dS}_i \tag{2.8}$$

où $\mathbf{x}_i$ est le vecteur position du noeud i.

C'est maintenant qu'apparait la principale difficulté liée aux schémas cell-vertex: il faut en

effet reconstruire un résidu au noeuds ($\mathbf{R}_i$) à partir des résidus aux cellules ($\mathbf{R}_{\Omega_j}$) pour avancer le schéma en temps. La procédure utilisée pour cela est la méthode des résidus pondérés. La valeur du residu au noeud est alors obtenu par:

$$\mathbf{R}_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j|i\in\Omega_j} \mathsf{D}^i_{\Omega_j} V_{\Omega_j} \mathbf{R}_{\Omega_j} \tag{2.9}$$

la sommation se faisant sur toutes les cellules ayant le noeud i pour sommet.
Le paramètre essentiel de cette équation est la matrice de distribution $\mathsf{D}^i_{\Omega_j}$ qui pondère le résidu aux cellules afin de reconstruire le résidu au noeuds. La consistance du schéma est assurée tant que:

$$\sum_{i\in\Omega_j} \mathsf{D}^i_{\Omega_j} = \mathsf{I} \tag{2.10}$$

Cette matrice peut par exemple s'écrire sous la forme suivante:

$$\mathsf{D}^i_{\Omega_j} = \frac{1}{[\mathrm{Nv}_{\Omega_j}]} \left(\mathsf{I} + C \frac{\Delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}} \left(\mathsf{A}_{\Omega_j}, \mathsf{B}_{\Omega_j}, \mathsf{C}_{\Omega_j} \right) . \mathbf{dS}_i \right) \tag{2.11}$$

où C est une constante, $[\mathrm{Nv}_{\Omega_j}]$ le nombre de sommet de la cellule Ω_j, Δt_{Ω_j} le pas de temps à cette cellule et $\left(\mathsf{A}_{\Omega_j}, \mathsf{B}_{\Omega_j}, \mathsf{C}_{\Omega_j}\right)$ le tenseur composé des trois matrices jacobiennes de la matrice des flux dans cette cellule.
Le cas le plus simple correspond à $C = 0$, ce qui amène à un schéma centré. En choisissant $C = \frac{[\mathrm{Nv}_{\Omega_j}]^2}{2[\mathrm{Nd}]}$ on obtient un schéma de type Lax-Wendroff. Cette formulation permet également de construire des schémas de type décentré en remplaçant Δt_{Ω_j} par une matrice correctement choisie.

2.2.2 La méthode des Éléments Finis

Il est assez rare qu'un code de calcul basé sur la méthode des Volumes Finis puisse également utiliser la méthode de Eléments Finis. Cela a été rendu possible dans le cas d'AVBP grâce à l'utilisation du formalisme cell-vertex qui rend les deux méthodes relativement proches. En effet, ces deux méthodes s'inscrivent dans le cadre plus général des méthodes dites de résidus pondérés, les VF cell-vertex utilisant la collocation par sous domaines et les EF utilisant la méthode de Galerkin.

La méthode EF consiste tout d'abord à approximer la solution $\mathbf{U}(x)$ par une combinaison linéaire de fonctions de base $\phi_i(x)$:

$$\mathbf{U}(x) = \sum_{i=1}^{[\mathrm{Nn}]} \mathbf{U}_i \phi_i(x) \tag{2.12}$$

où $\mathbf{U}_i$ est la valeur du vecteur $\mathbf{U}$ au noeud i et [Nn] est le nombre total de noeud du maillage.

Ces fonctions de base doivent naturellement vérifier certaines propriétés dont notamment celle de normalisation:

$$\sum_{i=1}^{[\mathrm{Nn}]} \phi_i(x) = 1 \tag{2.13}$$

et de localisation:

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij} \tag{2.14}$$

L'Eq. 2.4 est ensuite multipliée par chaque fonction de base ϕ_j, puis intègrée sur tout le domaine de calcul Ω:

$$\int_\Omega \phi_j \frac{\partial \sum_i \mathbf{U}_i \phi_i}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \int_\Omega \phi_j \nabla.\mathsf{F} \, \mathrm{d}V = 0 \tag{2.15}$$

Le système obtenu possède [Nn] équations pour les [Nn] inconnues $\mathbf{U}_j$. Dans le cas d'un maillage fixe, les fonctions de base ne dépendent pas du temps et grâce à la linéarité des différents opérateurs, l'Eq. 2.16 s'écrit:

$$\sum_i \left(\frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} \int_\Omega \phi_i \phi_j \, \mathrm{d}V \right) + \int_\Omega \phi_j \nabla.\mathsf{F} \, \mathrm{d}V = 0 \tag{2.16}$$

Les termes $\mathsf{M}_{ij} = \int_\Omega \phi_i \phi_j \, \mathrm{d}V$ constituent la matrice de masse et le terme $\mathbf{S}_j = \int_\Omega \phi_j \nabla.\mathsf{F} \, \mathrm{d}V$ est le résidu au noeud j. Le calcul de ce résidu dans le cas du schéma TTGC est décrit dans [Colin, 2000 £1554]. Il est a noter que ce calcul fait également intervenir les matrices jacobiennes de la matrice des flux F.

2.2.3 Calcul des matrices Jacobiennes des flux Euler

Les deux schémas numériques mentionnés ci-dessus (LW-VF et TTGC-EF) font intervenir les matrices jacobiennes A, B et C des flux Euler. Ces matrices servent également pour

traiter les conditions aux limites de type caractéristique. Or, si le calcul de ces matrices est relativement aisé dans le cas d'un gaz simple, il n'en va pas de même pour un mélange multi-composants.

L'expression exacte de ces matrices est donc donnée ci-dessous:

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} 2u-\beta u & -\beta v & -\beta w & \beta & -uu+\beta e_c+\chi_1 & \dots & -uu+\beta e_c+\chi_N \\ v & u & 0 & 0 & -uv & \dots & -uv \\ w & 0 & u & 0 & -uw & \dots & -uw \\ H-\beta uu & -\beta uv & -\beta uw & (1+\beta)u & -uH+\beta ue_c+u\chi_1 & \dots & -uH+\beta ue_c+u\chi_N \\ Y_1 & 0 & 0 & 0 & u-uY_1 & \dots & -uY_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_N & 0 & 0 & 0 & -uY_N & \dots & u-uY_N \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

$$\mathsf{B} = \begin{pmatrix} v & u & 0 & 0 & -vu & \dots & -vu \\ -\beta u & 2v-\beta v & -\beta w & \beta & -vv+\beta e_c+\chi_1 & \dots & -vv+\beta e_c+\chi_N \\ 0 & w & v & 0 & -vw & \dots & -vw \\ -\beta vu & H-\beta vv & -\beta vw & (1+\beta)v & -vH+\beta ve_c+v\chi_1 & \dots & -vH+\beta ve_c+v\chi_N \\ 0 & Y_1 & 0 & 0 & v-vY_1 & \dots & -vY_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & Y_N & 0 & 0 & -vY_N & \dots & v-vY_N \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

$$\mathsf{C} = \begin{pmatrix} w & 0 & u & 0 & -wu & \dots & -wu \\ 0 & w & v & 0 & -wv & \dots & -wv \\ -\beta u & -\beta v & 2w-\beta w & \beta & -ww+\beta e_c+\chi_1 & \dots & -ww+\beta e_c+\chi_N \\ -\beta wu & -\beta wv & H-\beta ww & (1+\beta)w & -wH+\beta ve_c+v\chi_1 & \dots & -wH+\beta ve_c+v\chi_N \\ 0 & 0 & Y_1 & 0 & w-wY_1 & \dots & -wY_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & Y_N & 0 & -wY_N & \dots & w-wY_N \end{pmatrix} \tag{2.19}$$

avec:

$$\beta = \gamma - 1 \qquad \text{et} \qquad \chi_k = r_k T - \beta e_{sk} \tag{2.20}$$

2.2.4 Le schéma temporel: Runge-Kutta multi-étape

Le schéma d'intégration temporelle décrit ci-dessous est utilisé aussi bien avec la méthode VF que la méthode EF (indépendence des intégration spatiale et temporelle).
Pour commencer, l'axe des temps est partitionné de la manière suivante:

$$\tau = \{t^0, t^1, t^2, \ldots\} \tag{2.21}$$

avec $t^0 < t^1 < t^2 < \ldots$ On note $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ le pas de temps à l'instant n. Le pas de temps effectivement utilisé est calculé en fonction des critères de stabilité.
Apres avoir discretisé le terme spatial selon la méthode désirée (VF ou EF), on obtient un système de type ODE explicite pour chaque noeud i du maillage à l'instant n:

$$\left.\frac{d\mathbf{U}_i}{dt}\right|_{t=t^n} = -\mathbf{R}_i^n \tag{2.22}$$

où U_i représente le vecteur inconnu au noeud i et R_i^n représente le résidu spatial au noeud i calculé à l'instant $t = t^n$. Il reste donc à intégrer ce système en temps. Pour cela, on utilise dans AVBP la forme compacte du RK à m étapes (aussi appelée low-storage) [Roache, 1972]:

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^{n_0} &= \mathbf{U}^n \\
\mathbf{U}^{n_1} &= \mathbf{U}^0 - \alpha_1 \Delta t^n \mathbf{R}(\mathbf{U}^{n_0}) \\
\vdots \quad & \quad \vdots \\
\mathbf{U}^{n_m} &= \mathbf{U}^0 - \alpha_m \Delta t^n \mathbf{R}(\mathbf{U}^{n_{m-1}}) \\
\mathbf{U}^{n+1} &= \mathbf{U}^m
\end{aligned} \tag{2.23}$$

avec $\alpha_m = 1$.

Pour $m = 1$, on retrouve le schéma d'Euler explicite.

La table 2.2.4 regroupe les valeurs de α utilisé dans AVBP en fonction du nombre d'étapes. Ces valeurs garantissent un ordre de convergence le plus élevé possible pour le

nombre d'étapes choisi. Les RK à 3 et 4 etapes ont des ordres de convergence en $O(\Delta t^3)$ et $O(\Delta t^4)$ respectivement.

nombre d'étapes	α_1	α_2	α_3	α_4
1	1.0			
2	INSTABLE			
3	1/2	1/2	1.0	
4	1/4	1/3	1/2	1.0

TAB. 2.1 – *Table des coefficients pour la methode de Runge-Kutta compacte*

2.3 Modèles de viscosité artificielle

Les schémas numériques dans AVBP sont tous centrés en espace et sont donc naturellement sujet à des oscillations au voisinage des forts gradients. Il est donc d'usage courant d'ajouter une Viscosité Artificielle (VA) aux équations discrétisées afin d'atténuer les modes non-physiques (wiggles, en anglais) et de lisser les gradients trop raides. Dans AVBP, cette VA est la combinaison de deux termes: une viscosité du 2nd ordre pour lisser les gradients et une viscosité du 4eme ordre pour dissiper les wiggles. L'ajout de VA se fait en deux étapes:

1. un senseur détecte si l'ajout de VA est nécessaire en fonction des caractéristiques de l'écoulement,

2. une certaine quantité de VA du 2nd et du 4eme ordre est appliquée.

2.3.1 Les senseurs

Un senseur ζ_{Ω_j} est un paramètre défini pour chaque cellule Ω_j du domaine et qui varie entre 0 et 1. Sa valeur est obtenu en comparant deux évaluations différentes du gradient d'une certaine quantité (pression, fraction massique, ...). Si ces gradients sont identiques, la solution est localement linéaire et le senseur est nul: il n'est pas nécessaire d'ajouter de VA. A l'opposé, si ces estimations sont différentes, le senseur prend une valeur non-nulle et la VA est activée. Ce senseur est donc une mesure de l'écart à la linéarité de la solution. Le point-clé est de trouver un senseur qui se déclenche uniquement aux endroits où des problèmes de stabilité apparaissent. Deux senseurs sont disponibles dans AVBP: le senseur de Jameson et le senseur de Colin, qui est une amélioration du précédent. En effet, le senseur de Jameson est simplement proportionnel à l'écart à la linéarité. Or en LES on souhaite retarder au maximum l'utilisation de VA: le senseur de Colin permet cela en se déclenchant uniquement à partir d'un certain seuil de non-linéarité.

2.3.2 Les opérateurs

La VA dans AVBP est composée de deux opérateurs (2nd et 4eme ordre). Ces opérateurs ont les propriétés suivantes:

- l'opérateur du 2nd ordre agit comme une viscosité physique: son influence principale est de lisser les gradients. Il est donc essentiel de déterminer avec précision les endroits où cet opérateur doit être appliqué afin de ne pas introduire de dissipation partout dans l'écoulement. Ainsi, la précision du schéma n'est pas affectée dans les zones où le senseur est inactif, mais stabilité et robustesse sont assurées dans les zones critiques.
- l'opérateur du 4eme ordre est moins classique: il agit en effet comme un bi-laplacien et son rôle essentiel est de contrôler les modes non-physiques de courte longueur d'onde (wiggles).

La façon de combiner ces opérateurs est déterminée par le senseur et par des paramètres définis par l'utilisateur.

2.3.3 Les modèles utilisés

Pour résumer, un modèle de VA est décrit par:

- le choix du senseur (Jameson ou Colin) et de la variable utilisée pour détecter les non-linéarités,
- la façon dont sont combinés les opérateurs du 2nd et du 4eme ordre,
- et les variables sur lesquelles sont appliqués ces opérateurs.

Deux modèles ont principalement été utilisés dans cette thèse:

Le modèle de Jameson

Comme son nom l'indique, ce modèle est basé sur le senseur de Jameson. La variable utilisée pour définir ce senseur est la pression. En effet, dans les codes compressibles, cette quantité est très sensible aux moindres perturbations: c'est donc un bon indicateur de la qualité de l'écoulement. Le montant de viscosité du second ordre qui est appliquée est directement proportionnel à ce senseur: elle ne se déclenche que quand l'écoulement présente un problème de stabilité. Au contraire, la viscosité du quatrième ordre est appliquée partout: on garantit ainsi la dissipation des wiggles dans tout l'écoulement. Ces deux opérateurs sont appliqués sur toutes les variables (quantité de mouvement, énergie et espèces). Ce modèle garantit donc une très bonne robustesse du schéma numérique.
L'inconvénient est qu'il est relativement dissipatif car le senseur utilisé se déclenche très rapidement. En outre, si la VA peut être appliquée sur l'énergie et les espèces sans dégrader notablement l'écoulement, il n'en va pas de même en ce qui concerne la quantité de mouvement. En effet, les petites structures de l'écoulement sont très affectées par l'utilisation de VA du quatrième ordre lorsqu'elle est appliquée sur la quantité de mouvement. En conclusion, ce modèle est souvent utilisé en conjonction avec le schéma LW-VF lors du calcul de phases transitoires de l'écoulement (initialisation) afin de garantir une robustesse maximale mais ne convient pas à des calculs LES précis car il introduit trop de dissipation:

il faut alors utiliser le modèle de Colin.

Le modèle de Colin

Ce modèle est plus élaboré que le précédent afin de mieux répondre aux besoins de la LES. Il utilise le senseur de Colin au lieu de celui de Jameson. Cela permet donc d'appliquer de la VA dans des zones plus restreintes. Le montant de VA appliquée sur l'énergie et les espèces est ensuite calculé comme dans le modèle de Jameson. Par contre, sur la quantité de mouvement, la viscosité du quatrième ordre n'est jamais appliquée. Ce modèle présente donc l'avantage d'introduire de la VA dans des zones très ciblées et surtout de ne pas appliquer de VA du quatrième ordre sur la quantité de mouvement: les petites stuctures de l'écoulement ne sont donc pas affectées. Ce modèle introduit globalement beaucoup moins de dissipation que le modèle de Jameson et permet de faire des LES de très bonne qualité, i.e. gouvernée par la physique et pas par le numérique. La stabilité est néanmoins assurée par l'utilisation de VA du second ordre qui se déclenche toujours en cas de problème important. C'est toujours ce modèle qui est utilisé avec le schéma TTGC-EF pour produire les calculs destinés à l'analyse.

2.4 Traitement de la thermochimie

Les variables résolues dans AVBP sont les variables conservatives du vecteur $\mathbf{U}$ (en DNS) ou $\overline{\mathbf{U}}$ (en LES). Or il est nécessaire d'avoir accès à d'autres grandeurs comme la densité, la température, la pression, les capacités calorifiques, la masse molaire du mélange, etc ... pour calculer tous les termes des équations. La définitions exacte de ces grandeurs a été rappelée à la section 1.1.1, mais le calcul numérique de certaines d'entre elles peut poser problème. C'est notamment le cas pour le calcul de l'énergie et de la température. En effet, pour calculer l'énergie sensible à partir de la température, il faudrait intégrer les $C_{vk}(T)$, ce qui n'est pas simple numériquement. De même, pour reconstruire la température à partir de l'énergie (qui est la variable transportée), il faudrait procéder à l'opération inverse, ce

qui est encore plus compliqué.

Une méthode classique consiste à remplacer l'expression exacte de l'énergie sensible en fonction de la température par des polynômes. Par exemple dans la librairie thermodynamique de CHEMKIN, l'énergie interne de chaque espèce s'exprime comme un polynôme du 5eme degré de la température. Il est donc très simple de calculer $e_s(T)$ par cette méthode. Le problème apparait pour l'opération inverse, c'est-à-dire lorsque l'on veut calculer la température du mélange à partir de son énergie: il faut alors trouver les racines de ce polynôme. Il ne s'agit bien sur pas d'un problème insurmontable car il existe de nombreuses méthodes numériques pour trouver les racines d'un polynôme. Le principal problème vient du fait que toutes ces méthodes coûtent relativement cher en temps de calcul. Or en LES, il est impensable d'inverser un tel polynôme sur un maillage qui peut compter jusqu'à un million de noeuds: la vitesse d'éxécution du code en serait grandement affectée.

C'est pourquoi dans AVBP, plutôt que d'utiliser des polynômes, les enthalpies sensibles de toutes les espèces présentes dans le mélange sont stockées sous forme de tables. Ces tables contiennent la valeur de l'enthalpie sensible de chaque espèce pour des températures comprises entre 0 K et 5000 K, par pas de 100 K. L'enthalpie (et l'énergie) est ensuite interpolée linéairement pour trouver sa valeur à n'importe quelle température T. Cette méthode garantit donc une très bonne précision (du même ordre que la méthode des polynômes) et une vitesse de calcul à peu près identique. L'avantage de cette méthode apparait pour l'opération inverse, qui est de retrouver la température à partir de l'énergie. En effet, on utilise alors la même interpolation linéaire que dans le sens direct et cette opération est cette fois-ci beaucoup plus rapide que de trouver les racines d'un ploynôme.

La conséquence de cette méthode est que dans AVBP, les énergies et les enthalpies sont des fonctions affines par morceaux de la température. On en déduit donc que les capacités calorifiques C_{pk} et C_{vk} de l'espèce k sont des constantes par morceaux. La discontinuité de ces grandeurs peut poser d'éventuels problèmes de stabilité lorsque la température "bascule" par exemple de $300 + \epsilon$ à $300 - \epsilon$. En particulier, les conditions aux limites de type caractéristique (cf. section 2.5) nécessitent le calcul de la vitesse du son locale

$c = (\gamma r T)^{1/2}$. Cette vitesse du son fait donc intervenir $\gamma = C_p/C_v$ et $r = C_p - C_v$. La discontinuité des capacités calorifiques se traduit donc également par une discontinuité de la fonction $c(T)$ qui peut éventuellement générer des comportements non-désirés. Ce genre de problème n'a cependant pas été constaté car les discontinuités restent très faibles, grâce à l'utilisation d'intervales de discrétisation relativement petit (100 K).

2.5 Les conditions aux limites

Le traitement numérique des conditions aux limites est un point essentiel dans les codes compressibles, en DNS comme en LES [Thompson, 1987][Giles, 1990][Strikwerda, 1977]. Dans AVBP, ce traitement repose sur la méthode des caractéristiques. Ces méthodes sont couramment utilisées dans les codes d'aérodynamique mais elles nécessitent de nombreuses adaptations pour être utilisées dans des codes réactifs où le gaz est un mélange d'espèces dont les propriétés thermodynamiques (C_p, C_v, r, γ, ...) peuvent varier localement. La méthode utilisée ici est une nouvelle formulation de la procédure NSCBC proposée par Poinsot et Lele [Poinsot, 1992 £520] pour les gaz mono-composant et étendue par Baum et al. [Baum, 1994 £953] aux mélanges multi-composants. Une extension aux gaz réels a été proposée par [Okong'o, 2002] mais notre étude se limite aux gaz parfaits.

2.5.1 Contexte de la méthode NSCBC

Le principal inconvénient avec la méthode NSCBC telle que proposée par [Baum, 1994 £953] est qu'elle est mal posée. En effet, dans cette formulation, l'équation pour ρ a été conservée et le système obtenu est donc sur-déterminé (cf. la section 1.2.1). Dans AVBP, le choix a été fait de supprimer l'équation de continuité et la formulation [Baum, 1994 £953] n'est plus adaptée. Il faut donc développer un nouveau formalisme qui tienne compte de cela. Le système ainsi obtenu est désormais parfaitement symétrique par rapport aux espèces et surtout est mathématiquement consistant. La seconde différence par rapport à la formulation [Baum, 1994 £953] vient du choix des variables primitives. La variable

primitive associée à l'énergie n'est plus la température mais la pression (comme c'était le cas dans la formulation originale de Poinsot et Lele [Poinsot, 1992 £520]). En outre, pour les espèces, ce sont les densités partielles ρ_k qui sont utilisées comme variables primitives au lieu des fractions massiques Y_k. En fait, il ne s'agit pas d'un choix mais d'une contrainte liée au fait que les Y_k sont linéairement dépendants ($\sum_{k=1}^{N} Y_k = 1$). En outre, avec ce choix de variable, la densité n'est plus définie. A contrario, les ρ_k forment une famille libres et leur somme définit justement la densité. La formulation s'en trouve grandement simplifiée.

2.5.2 Passage des variables conservatives aux variables primitives

Les équations de Navier–Stokes ont été écrites précédemment sous la forme de flux pour les variables conservatives. Cette forme est très bien adaptées pour la discrétisation des équations dans le contexte des Volumes-Finis. Cependant, pour dériver les conditions aux limites, il est plus simple de reformuler ces équations sous forme quasi-linéaire avec les variables primitives. En outre, les composantes de la vitesses sont écrites dans une base orthonormale quelconque ($\mathbf{n}$,$\mathbf{t}_1$,$\mathbf{t}_2$), dans laquelle $\mathbf{u} = (u_n,u_{t1},u_{t2})^t$. Ici, la direction $\mathbf{n}$ correspond à la normale entrante de la condition à la limite. L'analyse caractéristique [Thompson, 1987][Hirsch, 1988] mène à la forme suivante pour ces équations:

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{d} = \mathbf{T} \tag{2.24}$$

où $\mathbf{V} = (u_n,u_{t1},u_{t2},P,\rho_1,\ldots,\rho_N)^t$ est le vecteur des variables primitives. Le terme d (terme normal) représente les contributions des dérivées selon $\mathbf{n}$:

$$\begin{pmatrix} d_{u_n} \\ d_{u_{t1}} \\ d_{u_{t2}} \\ d_P \\ d_{\rho_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{n}} & +\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}} \\ u_n \frac{\partial u_{t1}}{\partial \mathbf{n}} & \\ u_n \frac{\partial u_{t2}}{\partial \mathbf{n}} & \\ u_n \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}} & +\rho c^2 \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{n}} \\ u_n \frac{\partial \rho_k}{\partial \mathbf{n}} & +\rho_k \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{n}} \end{pmatrix} \tag{2.25}$$

où $\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \alpha}{\partial x} n_x + \frac{\partial \alpha}{\partial y} n_y + \frac{\partial \alpha}{\partial z} n_z$.
En notation matricielle, cela donne:

$$\mathbf{d} = \mathsf{E}_{\mathbf{n}} . \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{n}} \tag{2.26}$$

où $\mathsf{E}_{\mathbf{n}}$ est la matrice Jacobienne du système dans la direction $\mathbf{n}$ en terme de variables primitives:

$$\mathsf{E}_{\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} u_n & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & u_n & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & u_n & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \rho c^2 & 0 & 0 & u_n & 0 & \dots & 0 \\ \rho_1 & 0 & 0 & 0 & u_n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_N & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & u_n \end{pmatrix} \tag{2.27}$$

Le vecteur $\mathbf{T}$ représente toutes les autres contributions (tangentielle, diffusion et réaction).

2.5.3 Les variables caractéristiques

La matrice $\mathsf{E}_{\mathbf{n}}$ peut être diagonalisée et cette décomposition permet d'écrire des équations de convection pour les amplitudes des ondes:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \lambda \frac{\partial A}{\partial \mathbf{n}} = T_A \tag{2.28}$$

où A est l'amplitude de l'onde, λ sa vitesse de convection et T_A est la somme de tous les termes non-hyperboliques associées à l'onde.

Les amplitudes des $4 + N$ ondes sont données par:

$$\begin{pmatrix} \partial A_+ \\ \partial A_- \\ \partial A_{t1} \\ \partial A_{t2} \\ \partial A_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial u_n + \frac{1}{\rho c}\partial P \\ \partial u_n - \frac{1}{\rho c}\partial P \\ \partial u_{t1} \\ \partial u_{t2} \\ -\frac{Y_k}{c^2}\partial P + \partial \rho_k \end{pmatrix} \tag{2.29}$$

et les vitesses de convection associées sont:

$$\begin{pmatrix} \lambda_+ \\ \lambda_- \\ \lambda_{t1} \\ \lambda_{t2} \\ \lambda_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n + c \\ u_n - c \\ u_n \\ u_n \\ u_n \end{pmatrix} \tag{2.30}$$

En conservant la notation $\mathcal{L} = \lambda \frac{\partial A}{\partial \mathbf{n}}$ de [Poinsot, 1992 £520] pour la variation des amplitudes, le terme normal d de l'Eq. 2.25 s'écrit:

$$\begin{pmatrix} d_{u_n} \\ d_{u_{t1}} \\ d_{u_{t2}} \\ d_P \\ d_{\rho_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) \\ \mathcal{L}_{t1} \\ \mathcal{L}_{t2} \\ \frac{\rho c}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) \\ \frac{\rho_k}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_k \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

Les ondes acoustiques $\mathcal{L}_+$ et $\mathcal{L}_-$ sont convectées respectivement à la vitesse $u_n + c$ et $u_n - c$. Toutes les autres ondes sont convectées avec l'écoulement à la vitesse u_n. Les ondes $\mathcal{L}_{t1}$ et $\mathcal{L}_{t2}$ sont les ondes de cisaillement. Les ondes restantes $\mathcal{L}_k$ (pour $k = 1$ à N) sont des ondes sur les espèces. Aucune de ces ondes ne peut être identifiée immédiatement avec l'onde entropique classique car la densité n'est pas directement résolue. Cependant, toutes les ondes $\mathcal{L}_k$ ont la même vitesse de convection et les combinaisons linéaires de ces ondes sont également des ondes convectées à la vitesse u_n. Par exemple

$$\mathcal{L}_S = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{L}_k = u_n \left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}} + \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}} \right) \tag{2.32}$$

est proportionnelle à l'onde entropique telle qu'elle est définie par Poinsot et Lele dans [Poinsot, 1992 £520].

2.5.4 Les relations LODI

L'idée centrale des méthodes caractéristiques est d'identifier les ondes entrantes et les ondes sortantes qui traversent les conditions aux limites. Les ondes sortantes transportent des informations de l'intérieur du domaine de calcul et doivent être conservées telles que calculées par le schéma numérique. Au contraire, les ondes entrantes transportent des informations provenant de l'extérieur (i.e. contrôlées par la condition à la limite). Elles ne peuvent donc pas être calculées à partir de points situés à l'intérieur du domaine. Le principe de cette méthode est de calculer l'amplitude des ondes entrantes à partir des amplitudes des ondes sortantes grâce à des relations LODI (Local One Dimensional Inviscid) [Poinsot, 1992 £520]. Ces relations LODI sont obtenues en écrivant l'Eq. 2.24 à proximité de la frontière en supposant que l'écoulement y est localement non-visqueux et mono-dimensionnel. Bien sur, à ce moment, le comportement physique de la condition à la limite doit être pris en compte pour choisir la relation LODI à utiliser. Les équations ci-dessous sont des exemples de LODI obtenus de cette manière:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\rho c}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) = 0 \tag{2.33}$$

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) = 0 \tag{2.34}$$

$$\frac{\partial u_{t1}}{\partial t} + \mathcal{L}_{t1} = 0 \tag{2.35}$$

$$\frac{\partial u_{t2}}{\partial t} + \mathcal{L}_{t2} = 0 \tag{2.36}$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\rho_k}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_k = 0 \tag{2.37}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_S = 0 \tag{2.38}$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{1}{\rho}(\mathcal{L}_k - Y_k \mathcal{L}_S) = 0 \tag{2.39}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{1}{\rho}(r\mathcal{L}_S + \sum r_k \mathcal{L}_k) = 0 \tag{2.40}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\beta T}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) - \frac{T}{\rho r}\sum r_k \mathcal{L}_k = 0 \tag{2.41}$$

D'autres relations LODI peuvent être écrites pour l'enthalpie, l'entropie, la quantité de mouvement et même pour les gradients de toutes ces grandeurs.

2.5.5 Exemple d'implementation

À partir des relations LODI ci-dessus, il est immédiat d'écrire différentes conditions à la limite en utilisant la technique décrites dans [Poinsot, 1992 £520]. Un exemple en est donné ici: une entrée subsonique avec vitesse, température et composition imposés et qui peuvent varier au cours du temps. Pour une entrée subsonique, seule l'onde acoustique $\mathcal{L}_-$ quitte le domaine de calcul tandis que les $3 + N$ autres ondes sont entrantes. Comme $\mathcal{L}_-$ quitte le domaine, elle est évaluées grâce à l'Eq. 2.29 et des dérivées décentrées. Par contre, pour déterminer les amplitudes des 3 ondes entrantes $\mathcal{L}_+$, $\mathcal{L}_{t1}$et $\mathcal{L}_{t2}$ la nature de la condition à la limite suggère l'utilisation des relations LODI 2.34, 2.35 et 2.36.

$$\mathcal{L}_+ = \mathcal{L}_- - 2\frac{\partial u_n^t}{\partial t} \tag{2.42}$$

$$\mathcal{L}_{t1} = -\frac{\partial u_{t1}^t}{\partial t} \tag{2.43}$$

$$\mathcal{L}_{t2} = -\frac{\partial u_{t2}^t}{\partial t} \tag{2.44}$$

L'exposant t signifie que les valeurs utilisées dans les dérivées temporelles sont les valeurs "cibles" ("target") à imposer sur la frontière (par exemple un signal turbulent ou acous-

tique). Pour trouver l'amplitude de N ondes restantes $\mathcal{L}_k$, la relation LODI 2.41 est utilisée pour trouver:

$$\sum_{k=1}^{N} r_k \mathcal{L}_k = \frac{\rho r}{T}\left(\frac{\partial T^t}{\partial t} + \frac{\beta T}{c}(\mathcal{L}_- - \frac{\partial u_n^t}{\partial t})\right) \tag{2.45}$$

En introduisant cette équation dans l'Eq. 2.40, la valeur de l'onde entropique est:

$$\mathcal{L}_S = -\frac{\rho}{T}\frac{\partial T^t}{\partial t} - \rho_k = 1^N \frac{r_k}{r}\frac{\partial Y_k^t}{\partial t} + \frac{\rho\beta}{c}\left(\frac{\partial u_n^t}{\partial t} - \mathcal{L}_-\right) \tag{2.46}$$

et finalement, grâce à l'Eq. 2.39, les ondes sur les espèces sont données par:

$$\mathcal{L}_k = Y_k \mathcal{L}_S - \rho \frac{\partial Y_k^t}{\partial t} \tag{2.47}$$

Les $3+N$ ondes $\mathcal{L}_+$, $\mathcal{L}_{t1}$, $\mathcal{L}_{t2}$ et $\mathcal{L}_k$ sont maintenant spécifiées. Ces valeurs et la valeur de $\mathcal{L}_-$ calculée par le schéma sont alors introduites dans le vecteur $\mathbf{d}$ des termes normaux et les variables sur la frontière sont alors actualisées pour le pas de temps suivant en utilisant l'Eq. 2.24.

Chapitre 3

Application à un cas réel: la chambre LabScale

3.1 Le programme PRECCINSTA et la chambre LabScale

3.1.1 Contexte du programme PRECCINSTA

Le problème de la prédiction et du contrôle des instabilités de combustion est complexe et fait intervenir de nombreuses disciplines. En outre, la physique sous-jacente aux instabilités n'est pas encore totalement comprise et les méthodes de simulation numérique ne sont toujours pas complètement opérationnelles. Dans ce contexte, le projet européen PRECCINSTA est destiné à mener les activités nécessaires à une meilleur compréhension du phénomène des instabilités de combustion à tous les niveaux, i.e. du développement des outils de prédictions et des techniques de contrôle à la validation sur des turbine réelles. Ce projet implique donc une forte coopération entre industriels et organismes de recherche dans des domaines très divers. En outre, une spécificité de ce type de programme est de faire coopérer les différents pays de l'union européenne: la France, la Grande-Bretagne, l'Italie, l'Allemagne et les Pays-Bas y sont représentés.

En particulier, Turboméca (France), le CERFACS (France) et le DLR (Allemagne) sont responsables d'une des tâches de ce projet qui consiste à valider expérimentalement un outil numérique pour la prédiction des instabilités de combustion. L'industriel Turboméca apporte ainsi son expertise dans le domaine des turbines à gaz et le DLR dans celui des techniques de mesures expérimentales. Enfin le CERFACS fournit l'outil numérique: le code de calcul AVBP. Le code AVBP permet de prédire les instabilités de combustion dans les turbines à gaz grâce à l'utilisation de la LES réactive et compressible qui permet de résoudre simultanément et de façon très précise l'écoulement turbulent, la flamme et l'acoustique dans des géométries complexes. Cette validation doit se faire sur une chambre de combustion (la chambre LabScale) installée au DLR-Stuttgart sur laquelle est monté un injecteur fourni par Turboméca. Il est également à noter qu'un autre partenaire (ABB – Alstom Power UK) est en charge de calculs RANS sur la même configuration: cela permettra donc à terme de comparer les données expérimentales avec les calculs RANS et LES. Ces calculs n'étant pas terminés, cette comparaison n'est pas faite ici.

3.1.2 Le montage expérimental de la chambre LabScale

Conformément aux directives du programme PRECCINSTA, la chambre LabScale est installée sur un banc expérimental au DLR-Stuttgart. Le montage est disposé verticalement, l'écoulement se faisant du bas vers le haut: on se prémunit ainsi contre une possible asymétrie liée à la flottabilité.

Les Fig. 3.1 à 3.3 donnent un aperçu de l'installation.

Le montage se décompose en plusieurs éléments distincts:

- un flexible permettant l'alimentation en d'air,
- un plénum ou chambre de tranquillisation,
- un tourbillonneur servant à l'injection de carburant,
- une chambre de combustion,
- un échappement pour guider les gaz brûlés vers la hotte d'aspiration.

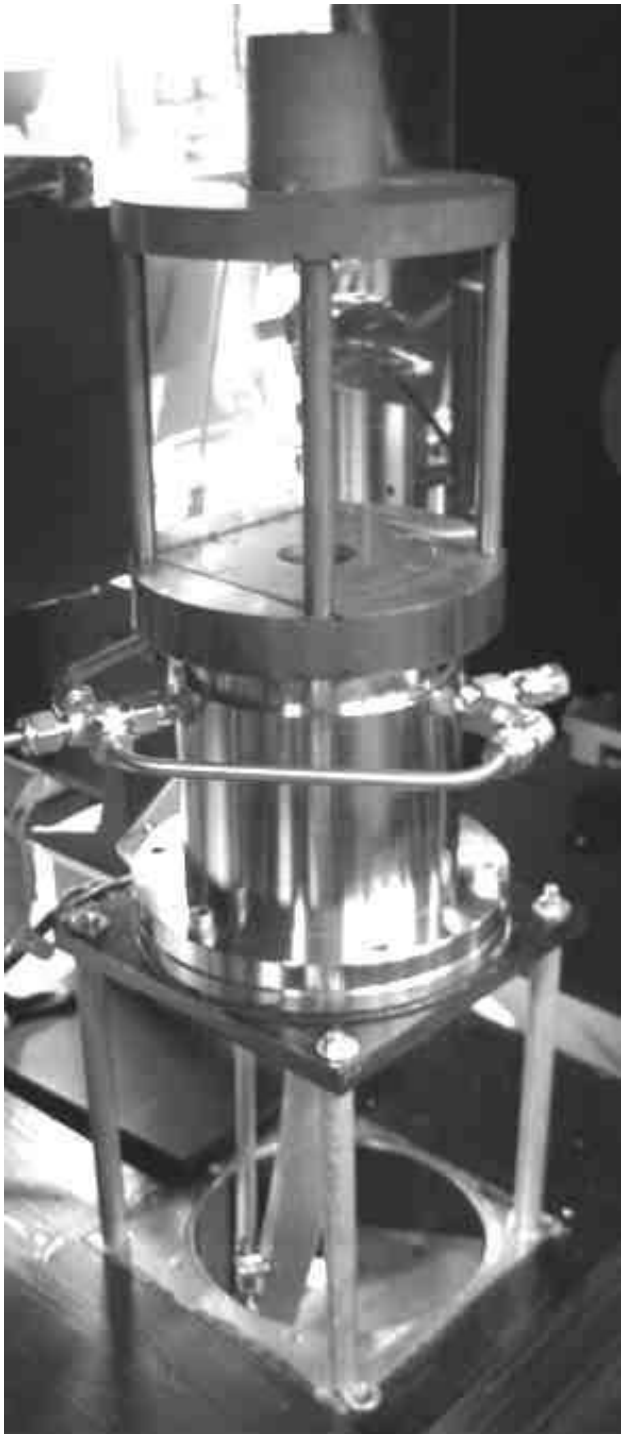


FIG. 3.1 – *Prise de vue du montage expérimental*

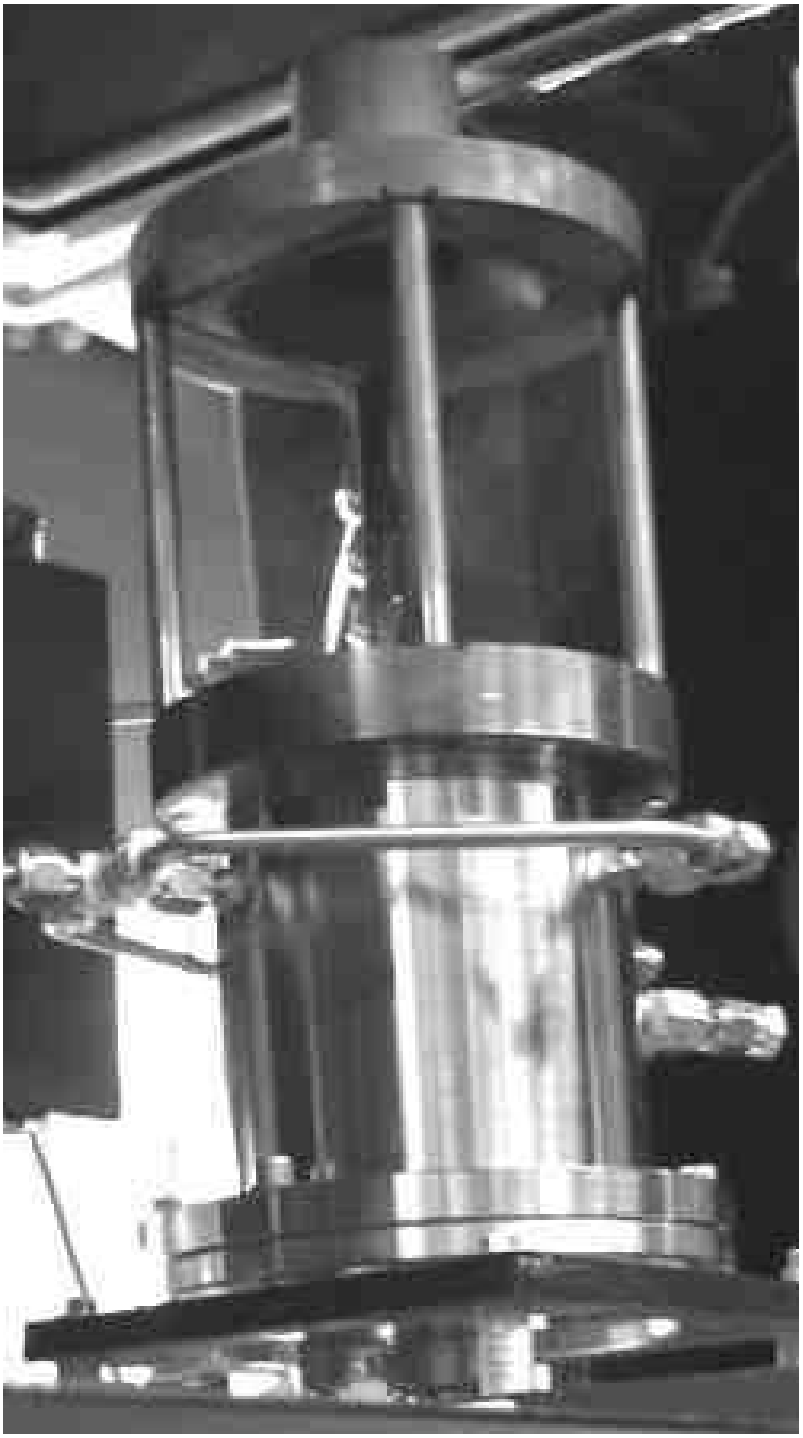


FIG. 3.2 – *Prise de vue du montage expérimental*

FIG. 3.3 – *Prise de vue du montage expérimental*

L'alimentation en air est assurée par un compresseur relié au plénum par un flexible, le débit étant contrôlé électroniquement.

Le plénum sert à tranquilliser l'air arrivant du compresseur afin d'assurer une turbulence aussi homogène et isotrope que possible. Cette pièce a été fabriquée en plusieurs modèles de différentes longueurs afin de tester l'influence des conditions amonts sur le reste de l'écoulement. En outre, deux types d'alimentations sont possibles:

- soit axialement par le fond du plenum,
- soit radialement par quatre orifices pratiqués sur les bords du plénum.

Cette dernière solution permet d'utiliser un haut-parleur en fond de plénum afin d'étudier l'effet d'une excitation acoustique forcée sur l'écoulement. Elle n'a cependant pas été utilisée dans le cadre de cette thèse: seul l'injection axiale a été simulée.

L'injecteur fourni par Turboméca est un tourbillonneur expérimental à simple vrille, muni de douze vannes (voir les Fig. 3.4 et 3.5).

Cette pièce a deux objectifs principaux:

- d'une part, permettre l'injection du carburant par des orifices prévus à cet effet,
- d'autre part, dévier l'écoulement afin de lui donner un mouvement de rotation autour de l'axe de la chambre (d'où le nom de tourbillonneur). Ce mouvement est plus connu sous son nom anglais de 'swirl'.

Ce tourbillonneur a déjà été testé par Turboméca dans des conditions différentes et a été sélectionné pour le programme PRECCINSTA car il présente des instabilités de combustion pour certains régimes de fonctionnement quand il est monté sur une chambre.

La chambre de combustion (Fig. 3.6) a une section carrée et ses dimensions exactes sont 114 mm de long pour 86 mm de côté. Elle appartient au DLR et présente l'intérêt d'être totalement transparente (cf. Fig. 3.1): cela facilite grandement les observations et les diagnostics par laser. Seuls les montants des quatre fenêtres en quartz sont en métal, ainsi que le fond de chambre.

FIG. 3.4 – *Détails du swirler (sans le cône central)*

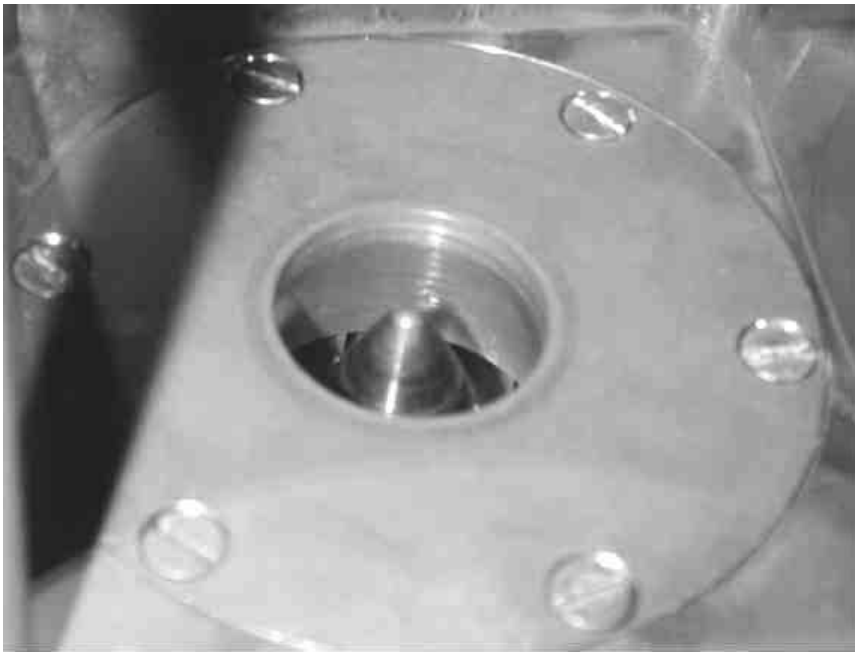


FIG. 3.5 – *Cône central du swirler (en place, vu de la chambre)*

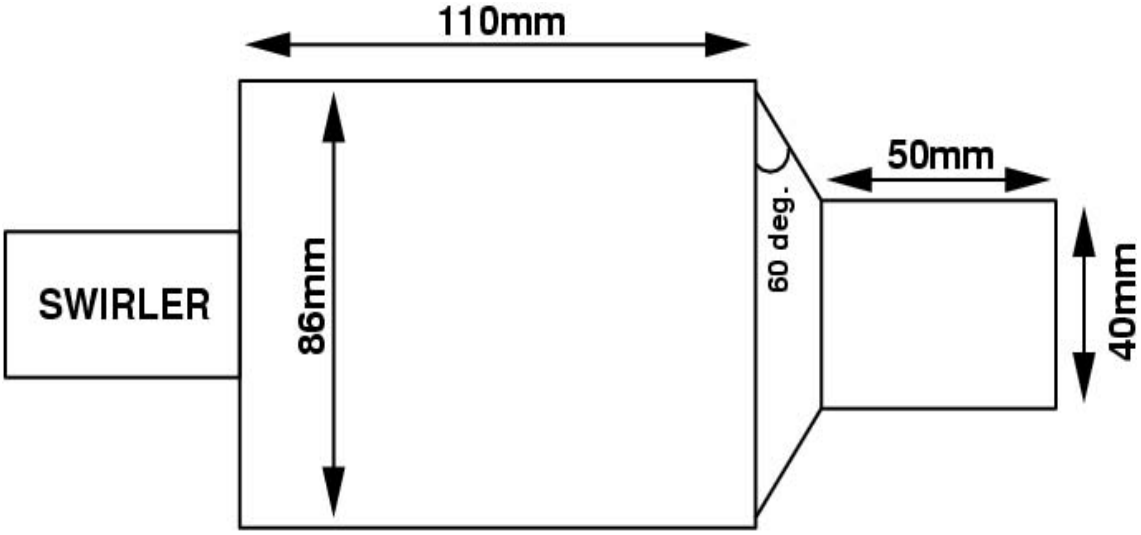


FIG. 3.6 – *Plan de la chambre de combustion*

Enfin, l'échappement des gaz brûlés se fait par un rétrécissement. Celui-ci est d'abord conique puis ensuite cylindrique (diamètre 40 mm, longueur 50 mm). Cela a pour effet d'accélérer l'écoulement et de rendre la sortie plus réflechissante d'un point de vue acoustique, cela en vue d'augmenter l'amplitude des instabilités lorsque celles-ci sont présentes et donc de faciliter leur observation.

Les conditions expérimentales sont les conditions ambiantes: pression atmosphérique et température de la pièce. Il n'y a donc ni préchauffage ni mise en pression. Même si l'on est loin des conditions réelles d'utilisation des turbines à gaz (qui sont alimentées par un compresseur fournissant de l'air à environ 15 bar et 600 K), ce montage présente l'avantage d'être plus simple à mettre en œuvre qu'une chambre sous pression avec de l'air préchauffé. En outre, la maintenance du montage en est grandement simplifiée et les risques liés aux hautes pressions ou aux hautes températures sont fortement réduits.

En ce qui concerne l'injection, quatre modes sont possibles (Fig. 3.7):

- par les vannes du tourbillonneur (position 1),
- par le cône central du tourbillonneur (position 2 et 3),
- ou par le nez du tourbillonneur (position 4).

Le premier mode permet un prémélange presque parfait alors que le dernier mode présente un taux de mélange quasiment nul (ce qui va produire une flamme de diffusion dans la chambre). Les configurations 2 et 3 fournissent des taux de mélange intermédiaires. Une série de tests effectuée par Turboméca avant le début du programme PRECCINSTA et les premiers essais menés au DLR au début du projet ont montré que cet injecteur présente un comportement très classique en ce qui concerne la présence d'instabilités de combustion en fonction de la qualité du mélange: plus le mélange est bon et plus la plage où les instabilités sont présentes est grande. A contrario, il n'y a plus de zone instable en mode diffusion. Pour faciliter l'étude des instabilités de combustion, c'est donc la première solution (qui présente le meilleur taux de mélange et la plus grande plage d'instabilités) qui a été retenue pour la chambre LabScale: l'injection se fait le plus tôt possible, c'est-à-dire

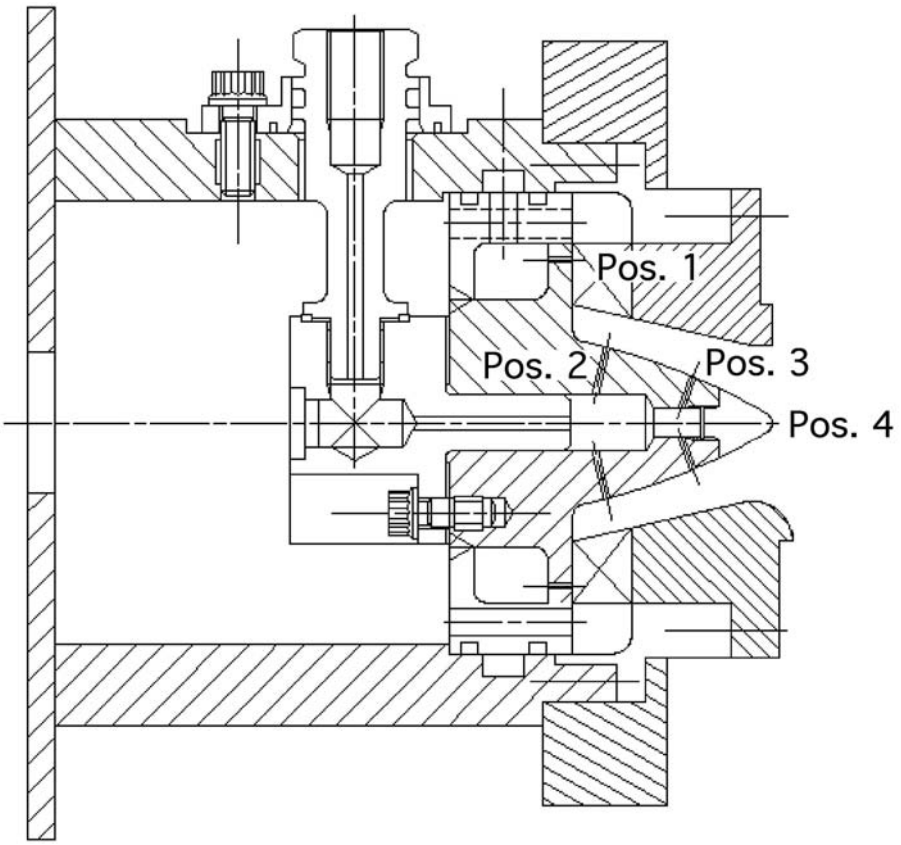


FIG. 3.7 – *Plan de l'injecteur avec le plénum (à gauche), l'alimentation en carburant (au centre) et le swirler (à droite)*

dans les vannes du swirler (position 1 sur la Fig. 3.7). Cette injection est assurée par douze orifices (un par vanne) dont le diamètre est de l'ordre du millimètre: la vitesse d'éjection est donc très élevée (de l'ordre de 100 m/s) garantissant ainsi un mélange optimal. Les Fig. 3.8 et 3.9 donnent un aperçu de la CAO du swirler et des orifices d'injection.

FIG. 3.8 – *Vue arrière du swirler (CAO) avec les douze trous d'injection de méthane et les trois fentes d'alimentations en air*

Le carburant utilisé est du méthane pur (CH_4). Les débits respectifs d'air et de méthane peuvent varier de façon complètement indépendante mais l'expérience a prouvé qu'il ne fallait pas dépasser certaines limites sous peine d'endommager les fenêtres de quartz de la chambre de combustion de façon irrémédiable. La puissance thermique nominale donnée par Turboméca pour cet injecteur est de l'ordre de 70 kW. Dans la configuration du DLR, il a été constaté que 35 kW était le maximum à ne pas dépasser pour garantir une durée de vie raisonnable aux parois de la chambre. À la stœchiométrie, cette puissance correspond à des débits massiques de l'ordre de 12 g/s pour l'air et 0.7 g/s pour le méthane.

FIG. 3.9 – *Vue avant du swirler (CAO) et détail sur les douze fentes ainsi que sur le nez*

Bien que de nombreux régimes de fonctionnement aient été étudiés expérimentalement au DLR-Stuttgart, seules deux configurations ont fait l'objet d'une LES pour cette thèse:

- un cas non-réactif (section 3.3),
- et un cas réactif (section 3.4).

3.2 Configuration et maillage

3.2.1 La géométrie

La première campagne de mesures effectuée par le DLR a permis de démontrer un point capital: la chambre de tranquilisation (plénum) a une influence prépondérante sur la stabilité de l'écoulement. Le fait de changer la longueur du plénum ou bien la façon d'alimenter en air (axialement ou radialement) modifie considérablement le comportement global du système. Ainsi, le plénum court avec injection d'air axiale permet d'observer des instabilités très fortes. Au contraire, utiliser le plénum long ou injecter l'air radialement atténue ces instabilités et peut même les faire disparaitre.
Il est donc impératif de prendre en compte ce phénomène dans la LES et pour cela il a été nécessaire d'inclure le plénum dans la géométrie utilisée, ainsi qu'une partie du flexible d'alimentation en air. De même, il a été décidé de mailler une partie de l'atmosphère en aval de l'échappement, afin de prédire aussi précisément que possible le comportement acoustique en sortie de chambre. Par contre, les détails géométriques liés à l'injection de fuel et les modifications pratiquées pour permettre l'instrumentation n'ont pas été pris en compte, du fait de leur taille caractéristique très faible. Les Fig. 3.10 à 3.13 montrent différentes vues de la CAO qui a finalement été utilisée.

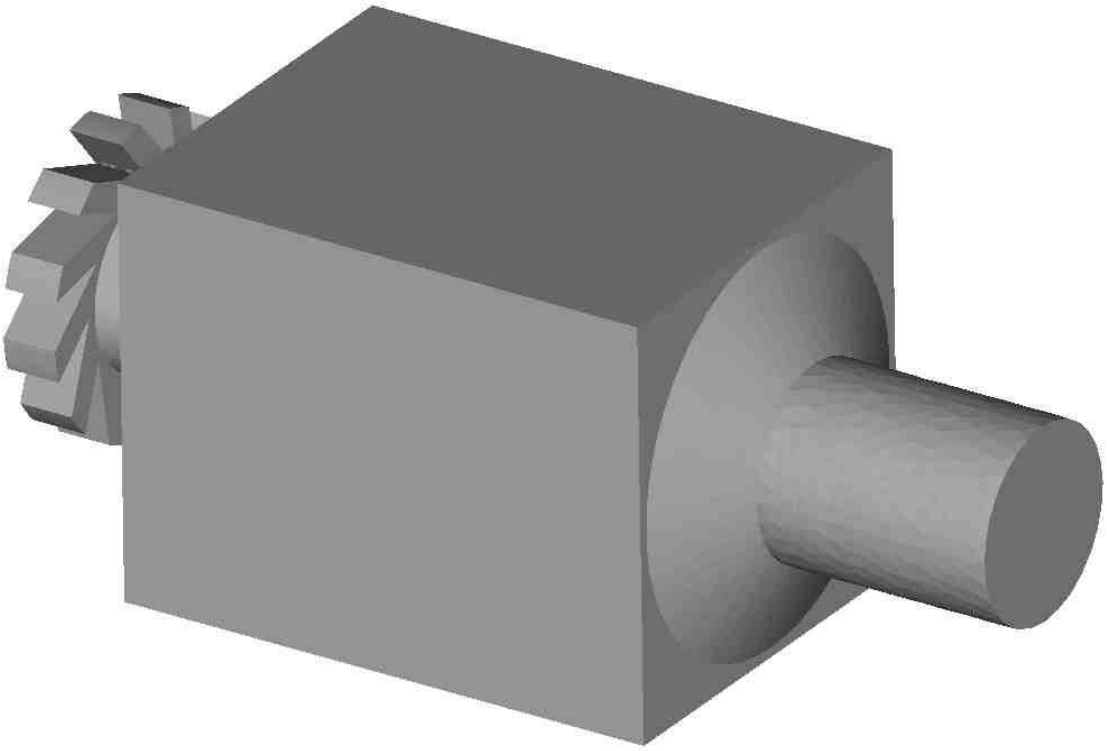


FIG. 3.10 – *Vue avant de la CAO utilisée pour la LES (sans l'atmosphère ni le plénum)*

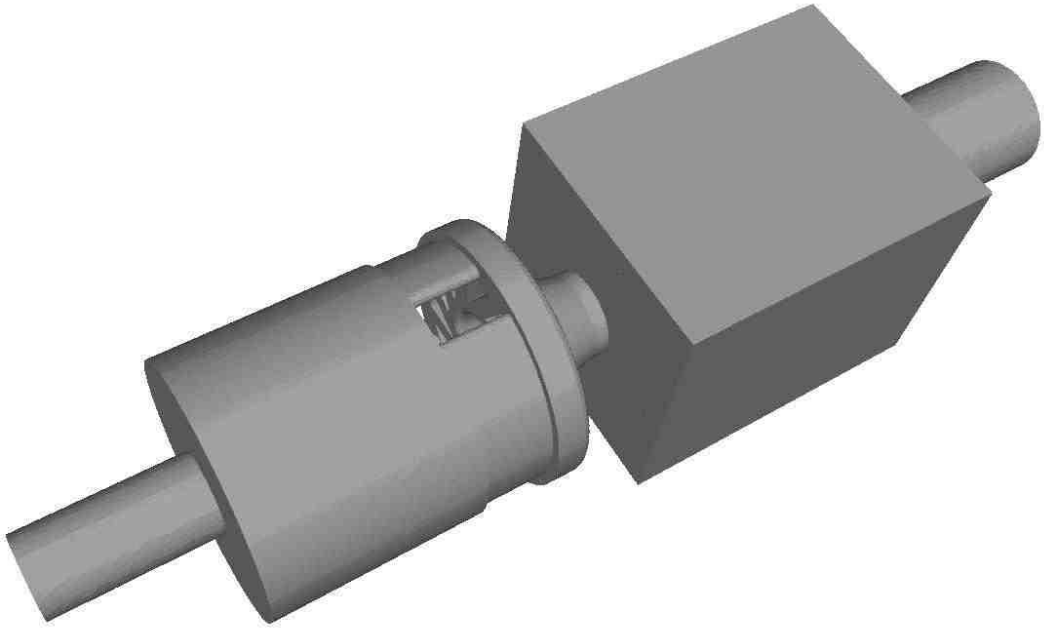


FIG. 3.11 – *Vues complètes de la CAO utilisée pour la LES (sans l'atmosphère mais avec le plénum)*

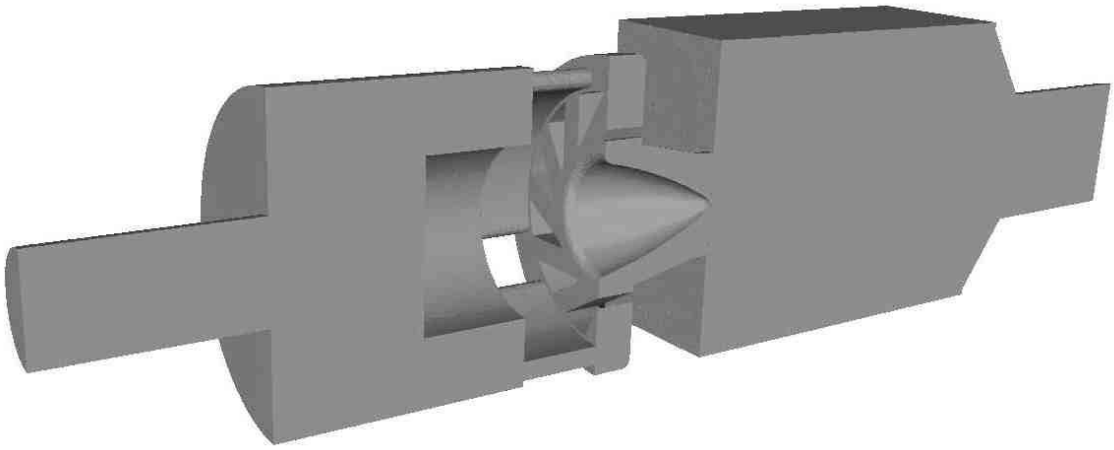


FIG. 3.12 – *Vues éclatées de la CAO utilisée pour la LES (sans l'atmosphère mais avec le plénum)*

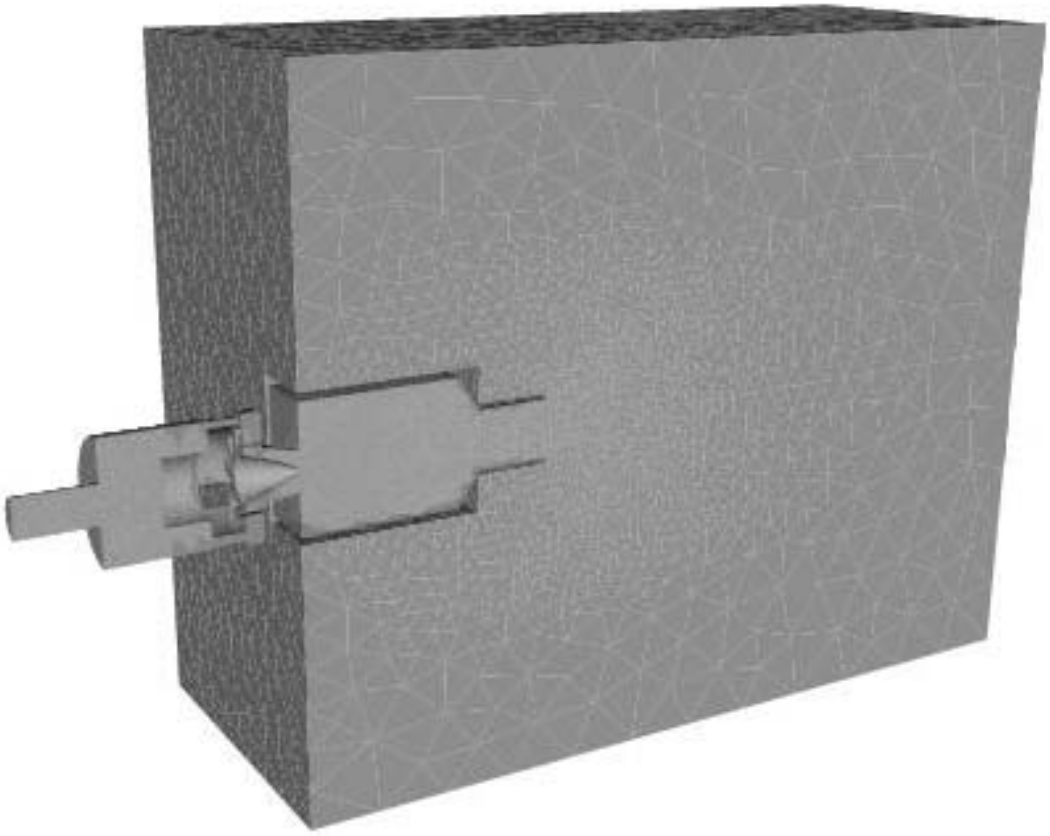


FIG. 3.13 – *Vues éclatées de la CAO utilisée pour la LES (avec l'atmosphère et le plénum)*

3.2.2 Les conditions aux limites

Le fait que le domaine simulé soit très étendu aussi bien en amont qu'en aval présente également un avantage du point de vue des conditions aux limites.

En effet, les simulations effectuées jusqu'à présent commençaient en général juste avant ou juste après l'injecteur et il était difficile (voir impossible) de définir précisément le comportement acoustique de ce type de condition à la limite. Le fait de prendre en compte le plénum et même une partie du flexible d'arrivée d'air permet au contraire de commencer le calcul à un endroit où la condition à la limite est plus simple à imposer (ici une entrée acoustiquement non-réfléchissante).

Le raisonnement est également valable pour la condition à la limite de sortie. Plutôt que d'arrêter la simulation au niveau de l'échappement (dont le comportement acoustique est inconnu), une partie de l'atmosphère en aval de la sortie de la chambre est prise en compte dans le maillage: là encore l'hypothèse de condition à la limite non-réflechissante est pleinement justifiée puisqu'elle est appliquée sur une surface qui est localisée hors de la chambre, à l'air libre.

Il s'agit là d'une réelle innovation: cette méthodologie apporte de nombreux avantages par rapport à la méthode habituelle où seule la partie réactive de l'installation est simulée (la chambre de combustion et éventuellement une partie de l'injecteur). En effet, le réglage des paramètres des conditions aux limites (qui constitue souvent une part importante du temps de calcul) est très simplifié. En outre, la simulation est beaucoup plus représentative de la physique que des contraintes numériques. Enfin, on se prémunit ainsi contre d'éventuels ajustages *ad-hoc* pour faire coller les résultats de la simulation aux résultats expérimentaux: des profils uniformes sont imposés en entrée et une condition non-réfléchissante en sortie et c'est le code qui fait le reste.

Comme il a été mentionné plus haut, il a été impossible de prendre en compte les injections de fuel du fait de leurs très faibles dimensions (de l'ordre du millimètre). Pour le cas non-réactif, cela ne pose pas de problème puisque les essais ont été effectués sans injection

de carburant. Par contre, pour le cas réactif, il faut faire l'hypothèse d'un prémélange parfait: le carburant est introduit dans les bonnes proportions en même temps que l'air, par la condition à la limite d'entrée au niveau du flexible. Cette hypothèse peut être justifiée du fait de la position très amont de l'injection de fuel et de la vitesse d'injection élevée qui garantissent un bon taux de mélange.

Enfin, en ce qui concerne les parois, elles sont considérées comme adiabatiques et non-glissantes. Dans le cas non-réactif, la première hypothèse est très bien vérifiée puisque les écarts de température entre l'intérieur de la chambre et l'extérieur sont très faibles (quelques Kelvin, dus à la compressibilité). Par contre, dans le cas réactif, cette hypothèse est moins bien vérifiée à cause des pertes de chaleur aux parois. Les deux mécanismes principaux de transfert thermique au niveau des parois sont d'une part la convection (l'air ambiant refroidit les parois) et d'autre part le rayonnement (les parois sont transparentes). Ne disposant pas de données sur ces pertes thermiques, l'hypothèse d'adiabaticité reste cependant la plus logique et la plus simple à mettre en œuvre.
L'hypothèse d'adhérence (paroi non-glissante) est plus délicate à justifier puisque l'on ne résoud pas la couche limite dans la LES. Cependant, dans les chambres de combustion, la turbulence près des parois joue un rôle mineur sur la structure de l'écoulement, et ce genre d'approximation est tout à fait acceptable. Les comparaisons avec l'expérience exposées aux sections 3.3 et 3.4 montrent bien que ce choix n'a de l'influence qu'en proche paroi et que les résultats dans le reste de la chambre n'en sont pas affectés.

3.2.3 Le maillage

La complexité géométrique de la configuration nous a incité à utilisé un maillage tétrahèdrique non-structuré dans tout le domaine simulé (Fig. 3.14 à 3.17). Le maillage final contient environ $500'000$ noeuds et $3'000'000$ cellules. La taille des mailles varie beaucoup d'un point à l'autre du maillage: dans le swirler et dans la première moitié de la chambre $\Delta \approx 1$ mm, alors que dans l'atmosphère $\Delta \approx 10$ mm. En effet, dans cette zone, on ne s'intéresse qu'aux phénomènes acoustiques et non pas à une résolution exacte du jet.

3.2.4 Remarques sur la taille du maillage

3 millions de cellules constituent une taille caractéristique de "gros" calculs qui peuvent être réalisés avec les moyens informatiques dont nous disposons à l'heure actuelle. La Table 3.1 donne un ordre de grandeur du coup de calcul associé à ce maillage pour les deux cas étudiés. Enfin, en plus de la puissance de calcul nécessaire pour réaliser de telles simulations, se posent également les problèmes liés au stockage des données instationnaires (une solution instantanée occupe environ 100 Mo), à la visualisation et au post-traitement.

	cas non-réactif	cas réactif
efficacité	250 μs	400 μs
1 itération sur 1 processeur	3 minutes	5 minutes
1 temps convectif sur 64 processeurs	14 heures	24 heures

TAB. 3.1 – *Ordre de grandeurs du temps de calcul pour les deux cas simulés.*

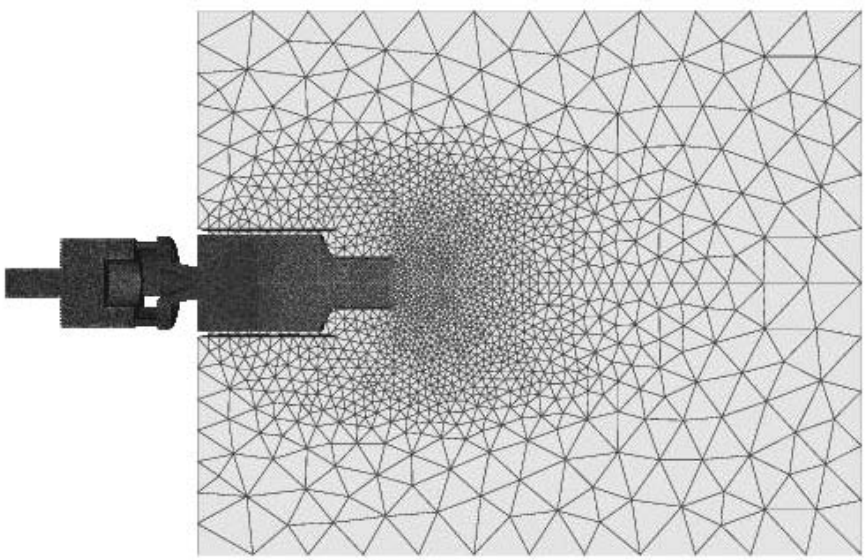


FIG. 3.14 – *Vue globale du maillage (avec l'atmosphère)*

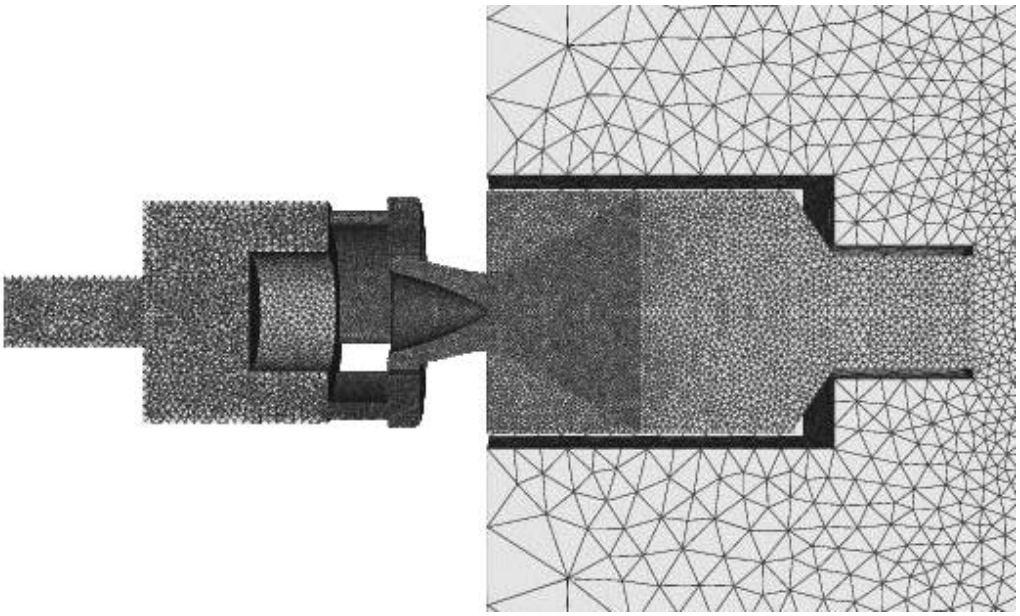


FIG. 3.15 – *Vue détaillée du maillage*

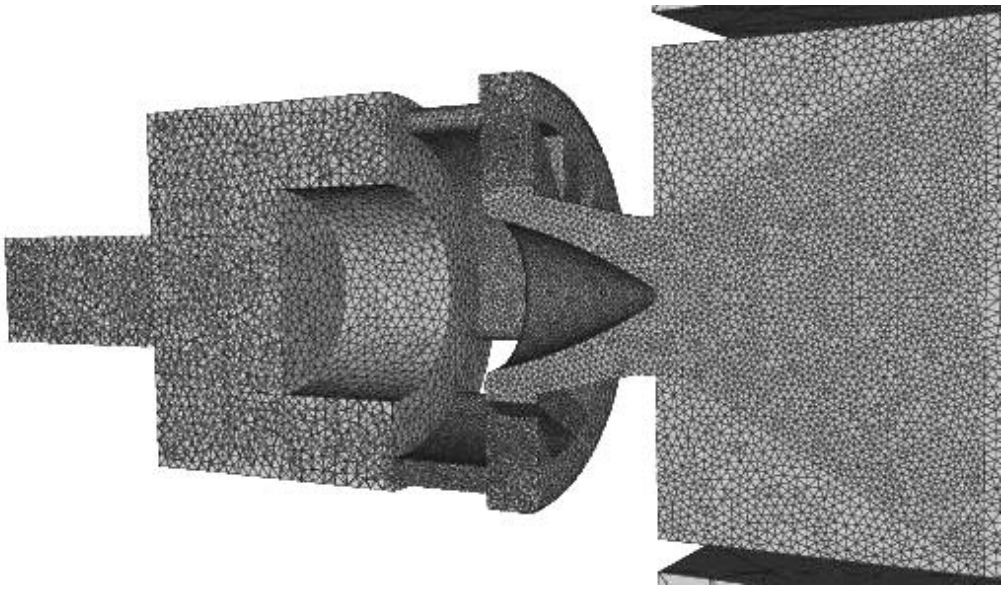


FIG. 3.16 – *Agrandissement au niveau du plénum, de l'injecteur et de la zone où la flamme est attendue*

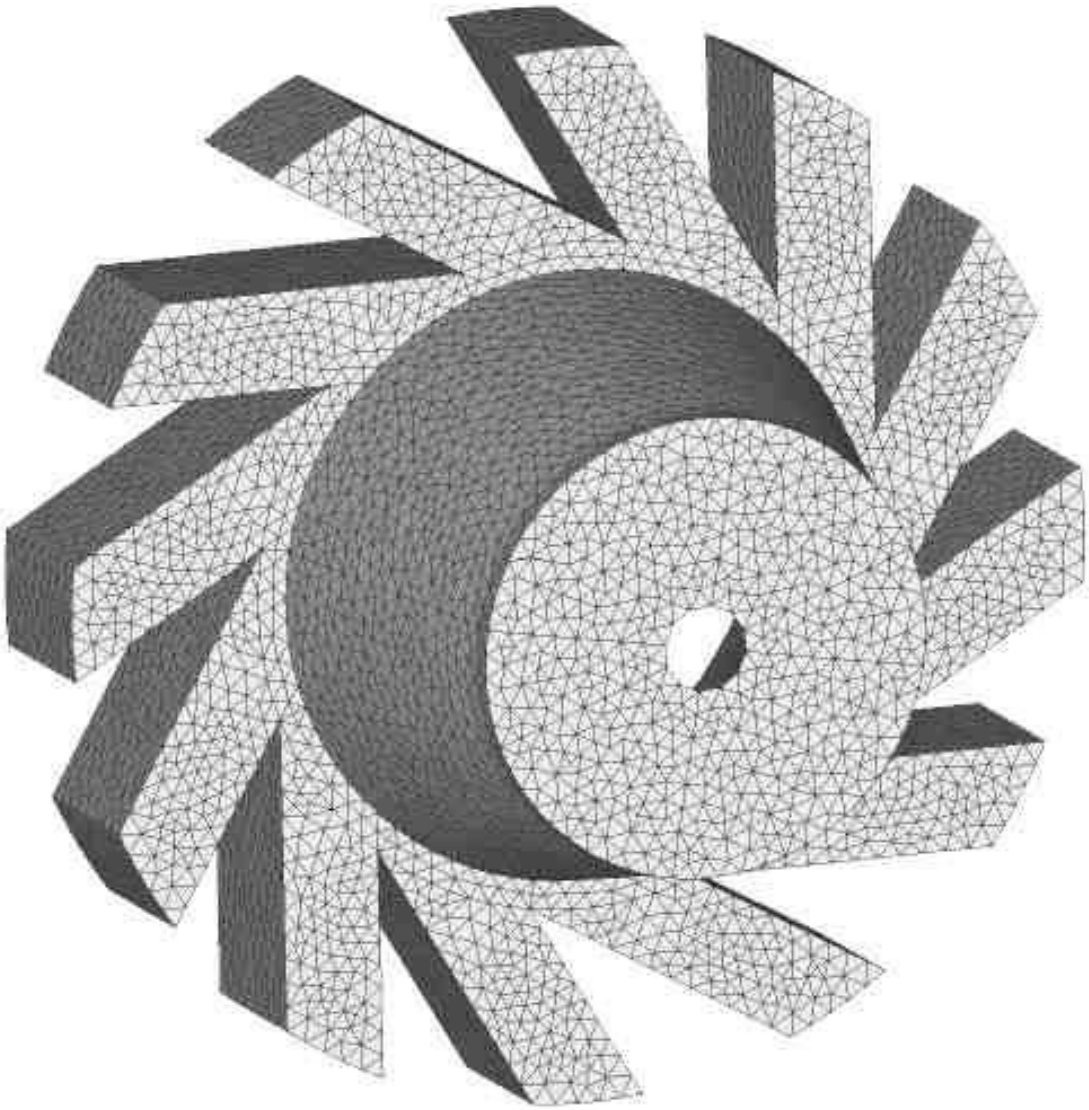


FIG. 3.17 – *Détail du maillage de l'injecteur*

3.3 Le cas non-réactif

Cette simulation correspond au cas d'un écoulement sans flamme. Les conditions de pression et de température sont celles décrites à la section 3.1.2: 101300 Pa et 300 K. L'intérêt de ce cas est de permettre de valider la partie non-réactive du code LES sur un écoulement similaire au cas réactif. Pour cela, l'alimentation en fuel a simplement été supprimée et la perte de débit dû à l'abscence de fuel a été compensée par un débit d'air équivalent. L'augmentation du débit d'air se fait par l'alimentation principale et non pas par l'injecteur: ce choix est beacoup plus simple à mettre en oeuvre d'un point de vue expérimental et s'accorde également bien avec la LES puisque l'injection n'est pas simulée. La difficulté avec ce choix vient du fait que l'air et le méthane n'ont pas la même masse molaire et donc des densités différentes. Il est donc impossible de conserver simultanément le débit volumique et le débit massique par rapport au cas avec injection de méthane. La proportion de méthane utilisée étant cependant relativement faible (moins de 10%), la différence avec l'écoulement réactif reste négligeable.

La table 3.2 rappelle les principales grandeurs thermodynamiques de l'air et du méthane. Pour mémoire, l'air est considéré comme un mélange comptant 1 mole d'O_2 pour 3.76 moles de N_2.

	W	ρ	C_p	C_v	r	γ	c
Unités	g/mol	kg/m^3	J/K/kg	J/K/kg	J/K/kg	-	m/s
Air	28.85	1.172	1015	727	288	1.40	347
Méthane	16.04	0.6515	2366	1847	518	1.28	446

TAB. 3.2 – *Rappel des principales grandeurs thermodynamiques de l'air et du méthane à* $P = 101300$ *Pa et* $T = 300$ *K*

La valeur du débit dans la LES n'est pas rigoureusement égale à celle de l'expérience car il est impossible d'imposer un débit exact avec des conditions de type NSCBC non-

réfléchissante. En effet, le débit en entrée fluctue au cours du temps afin de laisser sortir les ondes acoustiques. La valeur moyenne du débit n'est donc connue qu'après avoir fini le calcul. La Fig. 3.18 montre cependant que le débit utilisé dans la LES est très proche du débit expérimental puisque $\dot{m}_{\text{air}}^{\text{LES}} = 12.69$ g/s alors que $\dot{m}_{\text{air}}^{\text{Exp}} = 13.20$ g/s, soit une erreur relative d'environ 4%.

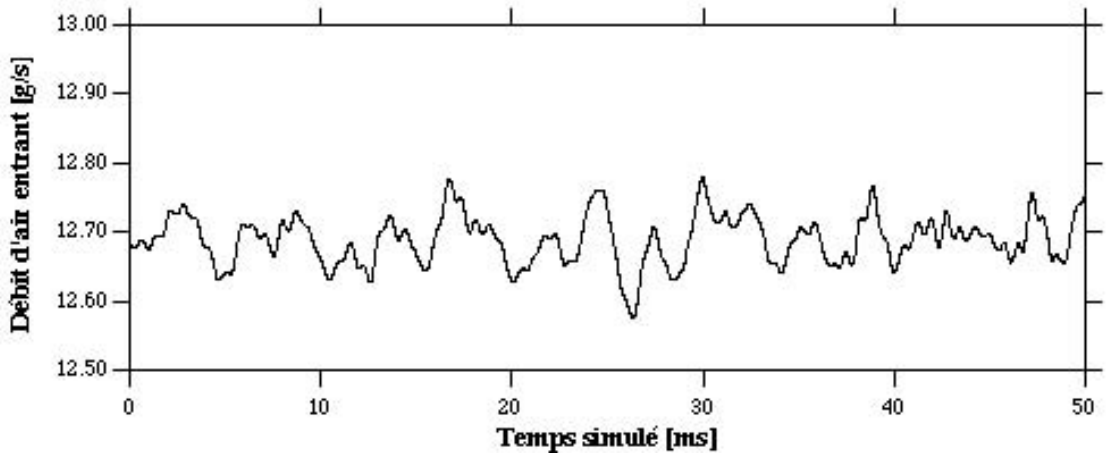


FIG. 3.18 – *Débit d'air passant par le flexible au cours du temps dans la LES. Ce débit varie de façon instantanée car la LES utilise des conditions aux limites non-réflechissantes.*

L'écoulement qui sort de l'injecteur pour entrer dans la chambre de combustion peut être assimilé à un jet et son nombre de Reynolds vaut:

$$Re = \frac{U_{\text{i}} D_{\text{i}}}{\nu} \tag{3.1}$$

où $U_{\text{i}} = 17.6$ m/s est la vitesse débitante en sortie d'injecteur et $D_{\text{i}} = 28$ mm est le diamètre de l'injecteur. La viscosité est prise égale à $\nu = 1.5\ 10^{-5}$ m^2/s. Avec ces valeurs, on trouve $Re \approx 33'000$. Le jet qui sort de l'injecteur est donc pleinement turbulent.

Le but de cet injecteur est évidemment de permettre l'admission d'un mélange inflammable dans la chambre de combustion. Ce n'est cependant pas suffisant pour garantir que la combustion aura bien lieu. En effet, il faut que la flamme reste dans la chambre ce qui n'est pas évident étant donné les vitesses caractéristiques de l'écoulement. Par exemple

la vitesse débitante en sortie d'injecteur est $U_\mathrm{i} \approx 20$ m/s alors que la vitesse de flamme laminaire est largement inférieure à 1 m/s. Même si la turbulence permet d'augmenter un peu la vitesse de flamme réelle, il est clair qu'une flamme ne peut pas exister dans un écoulement uniforme à cette vitesse. Il est donc nécessaire de modifier la structure de l'écoulement afin de permettre à la flamme de s'accrocher

Pour cela, une technique de plus en plus répandue chez les concepteurs de turbines à gaz est l'utilisation de jets swirlés. L'intérêt de ce dispositif est que sous l'effet de la force centrifuge, le jet a tendance à éclater (il est dévié vers l'extérieur) alors qu'une zone de basse pression est créée sur l'axe. Dans certaines conditions, il est même possible d'observer l'apparition d'une zone de recirculation sur l'axe du jet: l'ARZ (Axial Recirculation Zone). Des zones de faible vitesse, propices à la survie de la flamme, sont ainsi créées et permettent de stabiliser la combustion.
L'apparition de cette zone de recirculation est due à une déstabilisation du jet par un mécanisme d'instabilités naturelles: c'est le Vortex Breakdown. De nombreux modes de déstabilisation ont été recensés (Bubble Vortex, Spiral Vortex, Helicoidal Vortex, ...) et il existe une littérature abondante sur le sujet [Lucca-Negro, 2001]. Pour simplifier il y a deux paramètres essentiels qui conditionne l'apparition d'une ARZ:

- une vitesse de rotation importante, caractérisée par le nombre de swirl

$$S = \frac{\int_0^R u_\theta u_x r^2 \, \mathrm{d}r}{R \int_0^R u_x^2 r \, \mathrm{d}r} \tag{3.2}$$

- et le fait que le jet débouche dans un élargissement brusque.

Le nombre de swirl est le rapport du débit de quantité de mouvement dans la direction orthoradiale sur le débit de quantité de mouvement dans la direction axiale, dans une section donnée. La valeur critique du nombre de swirl pour observer une ARZ est $S^c = 0.6$. Dans le cas de la chambre LabScale et en utilisant les champs moyens trouvés par la LES pour effectuer l'intégration, le nombre de swirl vaut environ 0.75 dans l'injecteur, juste avant le changement de section: une ARZ est donc attendue dans la chambre.

La Fig. 3.19 expose schématiquement la structure d'un écoulement swirlé dans le cas

sub-critique ($S < S^c$) et super-critique ($S > S^c$).

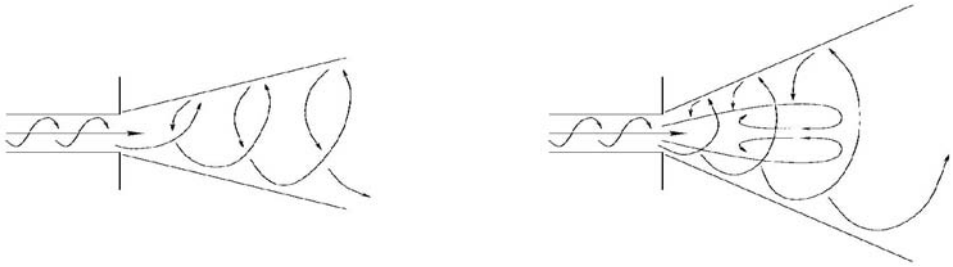


FIG. 3.19 – *Structure de l'écoulement créé par un jet swirlé dans le cas $S < S^c$ (à gauche) et dans le cas $S > S^c$ (à droite)*

Des zones de recirculation sont également créées dans les coins de la chambre à cause de l'élargissement brusque: ce sont les CRZ (Corner Reciculation Zone). Ces CRZ favorisent elles aussi l'attachement de la flamme.

Il faut enfin noter que ce type d'écoulement est fortement instationnaire. D'une part des structures turbulentes sont naturellement créées par le cisaillement du jet au niveau de l'ARZ et de la CRZ, mais un autre type de phénomène peur également être observé: le Precessing Vortex Core (ou PVC). Il s'agit d'une seconde instabilité naturelle de ce type d'écoulement: l'ARZ se met alors a tourner autour de son propre axe selon un mouvement périodique.
Il est important de noter qu'il s'agit là du mouvement d'une région fluide possédant une caractéristique donnée mais qu'en aucun cas il ne s'agit de trajectoires réelles suivies par des particules. La Fig. 3.20 montre ce type de mouvement.

L'analyse des résultats obtenus se fera en quatre parties:

- champs moyens et RMS,
- champs instationnaires,
- analyse numérique des modes acoustiques,
- analyse spectrale de la LES et de l'expérience.

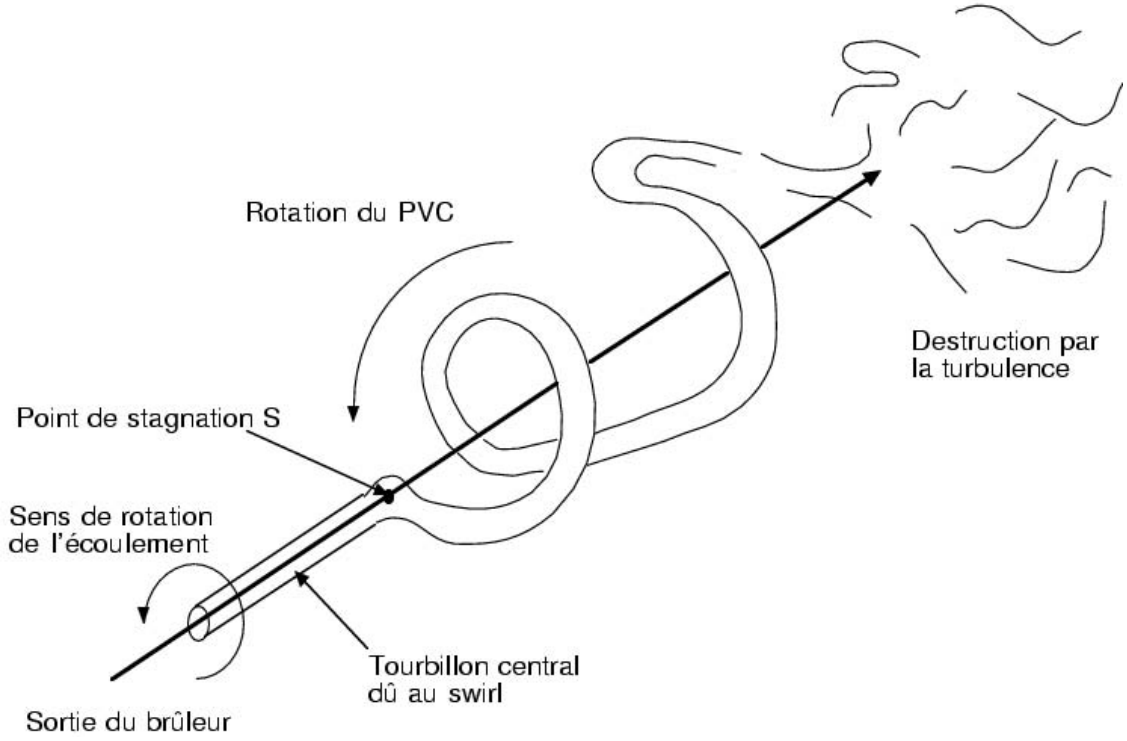


FIG. 3.20 – *Topologie de l'écoulement lors de l'apparition d'un Precessing Vortex Core*

3.3.1 Champs des grandeurs moyennes et RMS

Ces champs ont été obtenus en moyennant les simulations LES pendant un temps $\tau_{av} = 100$ ms. La première question à se poser est de savoir si les moyennes obtenues sont suffisament convergées. Pour cela il faut comparer le temps sur lequel s'effectue les moyennes τ_{av} avec un temps caractéristique de l'écoulement, par exemple le temps mis par une particule pour traverser la chambre. En prenant pour vitesse moyenne de l'écoulement la vitesse débitante en sortie d'injecteur U_{i} et pour longueur caractéristique la taille de la chambre L_{c} on trouve un temps convectif qui vaut:

$$\tau_c = \frac{L_{\mathrm{c}}}{U_{\mathrm{i}}} \approx 10 \text{ ms} \tag{3.3}$$

La moyenne a donc été effectuée sur environ 10 temps convectifs ce qui permet d'espèrer une convergence relativement bonne.

Les valeurs moyennes des trois composantes de la vitesse dans le plan de symétrie de la chambre sont représentées sur la Fig. 3.21 (vitesse axiale), la Fig 3.23 (vitesse orthoradiale) et la Fig. 3.25 (vitesse radiale). La bonne symétrie axiale de ces 3 champs semble prouver que les moyennes sont suffisamment convergées. La première constatation est la présence d'une importante zone de recirculation sur l'axe de la chambre (ARZ), matérialisée par la ligne en gras sur les trois figures, qui vient s'accrocher sur le nez de l'injecteur. Cette ARZ provoque comme prévu un éclatement et une déviation du jet. Le nombre de swirl de l'écoulement avant l'élargissement brusque ($S = 0.75$) étant supérieur à la valeur critique pour observer un tel phénomène ($S^c = 0.6$), c'est une première confirmation de la bonne structure générale de l'écoulement. Cette zone de recirculation axiale s'étend jusqu'à environ la moitié de la chambre. L'écoulement est ensuite plaqué sur les parois de la chambre car il doit contourner l'ARZ qui agit comme un obstacle solide. L'écoulement passe donc préférentiellement le long des murs.

En conséquence, la zone proche de l'axe dans la seconde moitié de la chambre est une zone d'eaux mortes où la vitesse est relativement faible. Enfin, l'écoulement est accéléré au niveau du convergent à cause du rétrécissement de section: on le remarque aussi bien sur la vitesse axiale U_x que sur la vitesse tangentielle U_θ qui augmentent toutes les deux.

On observe également comme prévu une autre zone de recirculation dans les coins de la chambre (CRZ).
La Fig. 3.27 montre le champ de pression moyenne: une forte dépression est observée au niveau du nez de l'injecteur. Cette dépression résulte de l'équilibre entre la force centrifuge et le gradient de pression. Une dépression d'intensité moindre est également observée au niveau de l'échappement car l'écoulement possède une vitesse plus élevée à cet endroit du fait du rétrécissement (conservation du débit et du moment cinétique).

Les Fig. 3.22, 3.24 et 3.26 montrent les valeurs RMS des composantes de la vitesse et la Fig. 3.28 expose le champ RMS de la pression. On remarque tout d'abord, que les champs des valeurs RMS ont un aspect plus perturbé que les champs des valeurs moyennes. Cela semble indiquer que si les champs moyens sont relativement bien convergés en moyennant pendant $\tau_{av} = 100$ ms, il n'en est pas de même pour les champs RMS qui nécessitent d'être moyenné sur un temps plus long. Ces quatres champs RMS présentent tous le même aspect: les fluctuations sont maximales sur le nez de l'injecteur et le long de la couche de cisaillement entre l'ARZ et le jet. Par endroit, la vitesse moyenne est même presque nulle alors que les valeurs RMS sont de l'ordre de 15 à 20 m/s. Ce comportement laisse présager qu'il se produit un autre phénomène en plus de la simple agitation turbulente. On observe également des fluctuations importantes sur l'axe de la chambre jusqu'en sortie pour les trois composantes de la vitesse. Il sera démontré à la section 3.3.2 que ces observations ont pour origine l'intermitence provoquée par le PVC.

Pour pouvoir comparer quantitativement le calcul LES avec les expériences, des coupes ont été réalisées dans les champs de vitesses. La Fig. 3.29 montre les positions des 5 lignes de coupe utilisée.

Les Fig. 3.30 à 3.35 montrent les comparaison entre les calculs LES et les mesures effectuées au DLR pour les 5 positions décrites ci-dessus. La comparaison est globalement très satisfaisante pour les trois composantes de la vityesse, tant pour les valeurs moyennes que RMS. La longueur de l'ARZ est bien prédite ainsi que son intensité. Un léger désaccord est cependant observé dans les zones proches de parois, près des murs ou du nez de l'injecteur.

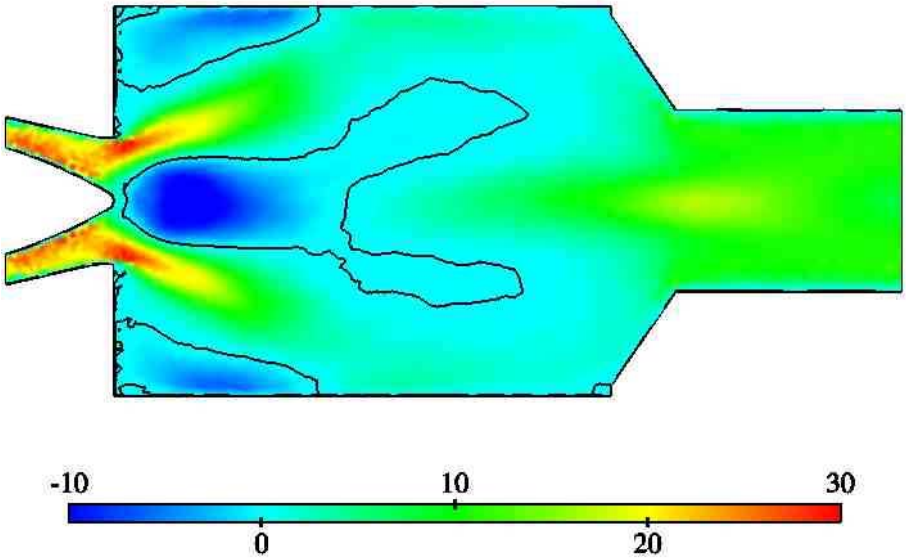


FIG. 3.21 – *Champ moyen de la vitesse axiale*

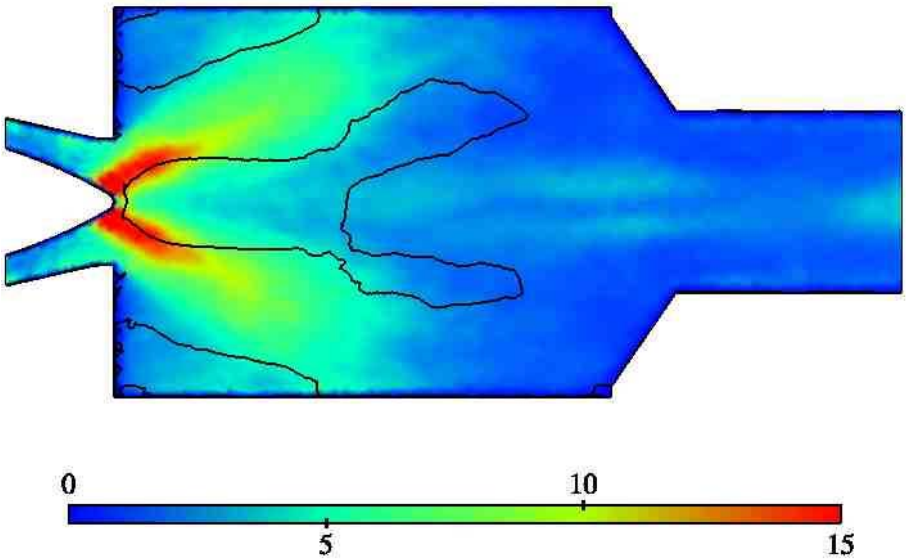


FIG. 3.22 – *Champ RMS de la vitesse axiale*

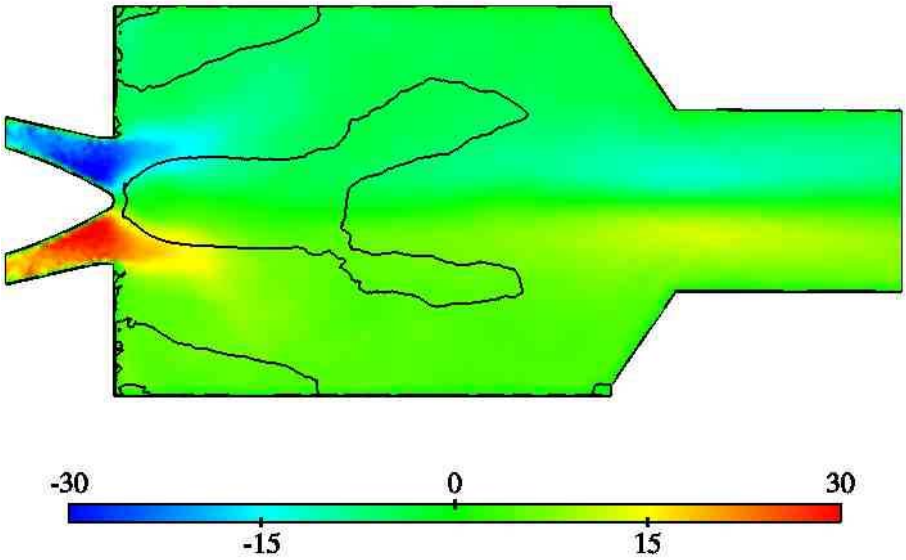


FIG. 3.23 – *Champ moyen de la vitesse orthoradiale*

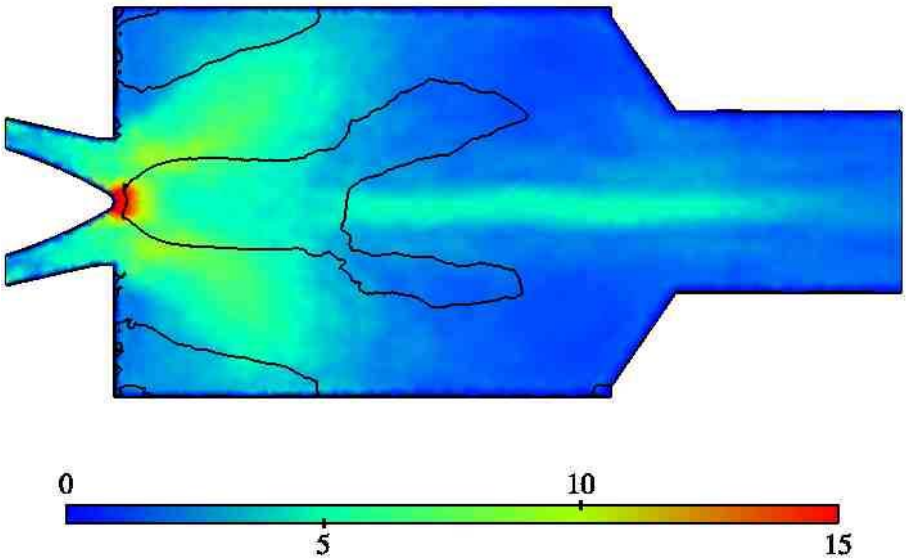


FIG. 3.24 – *Champ RMS de la vitesse orthoradiale*

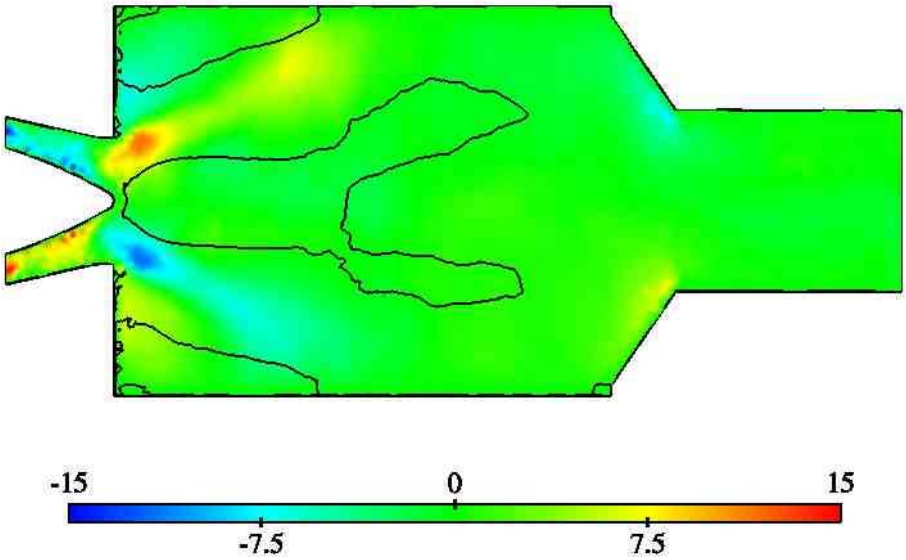


FIG. 3.25 – *Champ moyen de la vitesse radiale*

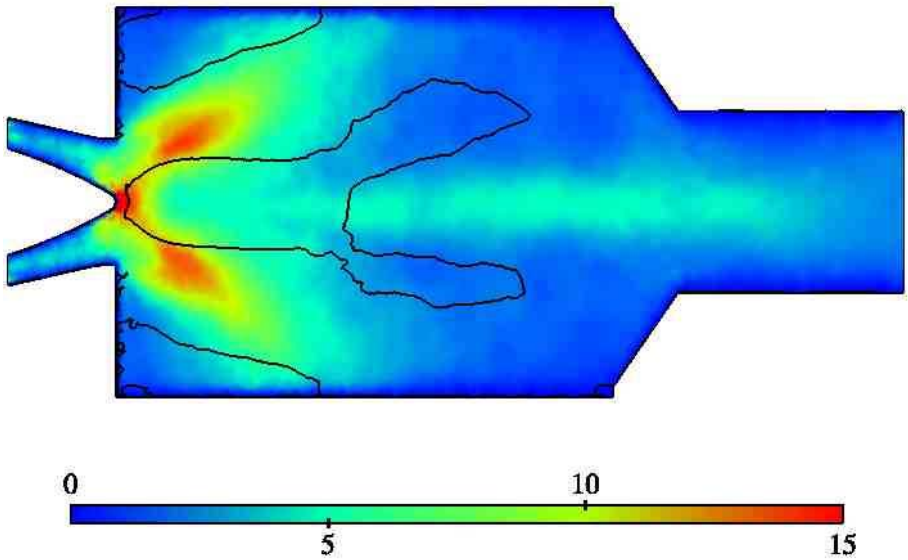


FIG. 3.26 – *Champ RMS de la vitesse radiale*

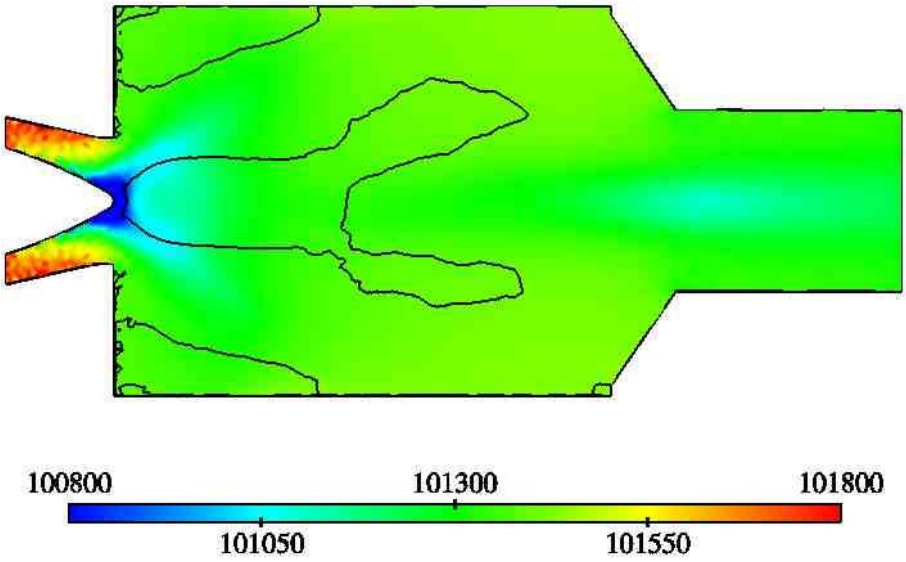


FIG. 3.27 – *Champ moyen de la pression*

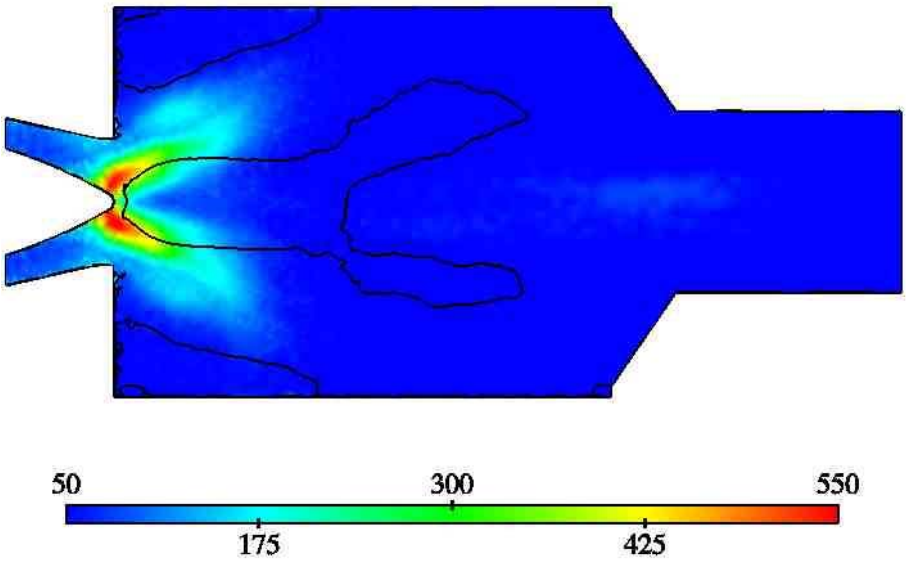


FIG. 3.28 – *Champ RMS de la pression*

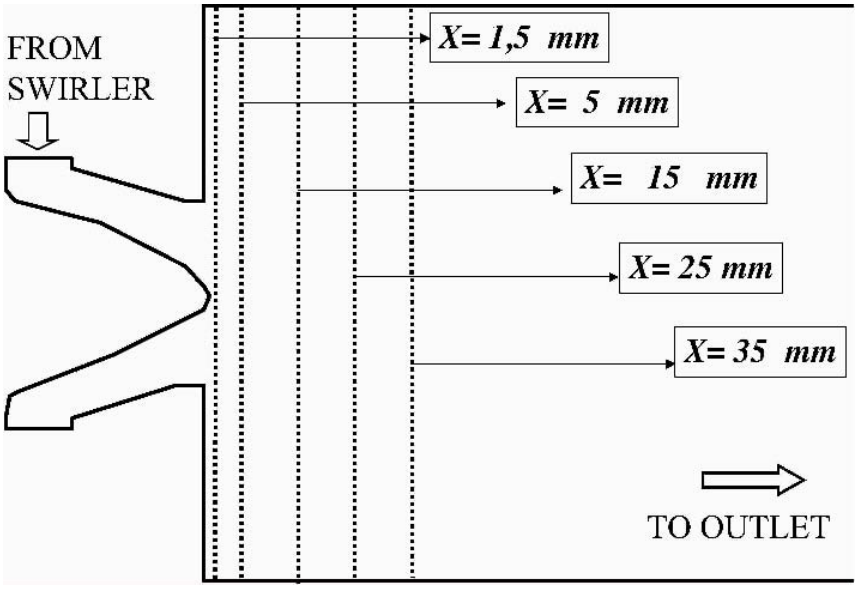


FIG. 3.29 – *Positions des coupes pour la comparaison des profils de vitesse*

Cela s'explique par le fait que d'une part les couches limites ne sont pas résolues dans la LES et d'autre part les mesures expérimentales sont moins précises à ces endroits à cause de la proximité des parois qui gènent l'instrumentation.

Les Fig. 3.36 et 3.37 montrent les valeurs moyennes et RMS de la pression dans le calcul LES seulement, les mesures expérimentales n'étant pas disponibles. On retrouve bien la présence d'une zone de dépression sur l'axe à proximité du nez de l'injecteur ainsi que de fortes fluctuations de la pression au niveau du jet.

3.3.2 Analyse des champs instantanées

L'intérêt de la LES par rapport aux méthodes classiques de type RANS est double:

- les résultats moyennés en temps sont en général très bons comme l'a montré la section précédente,
- mais surtout la LES permet d'accéder aux champs instantanés, ce qui est impossible avec les méthodes stationnaires comme le RANS.

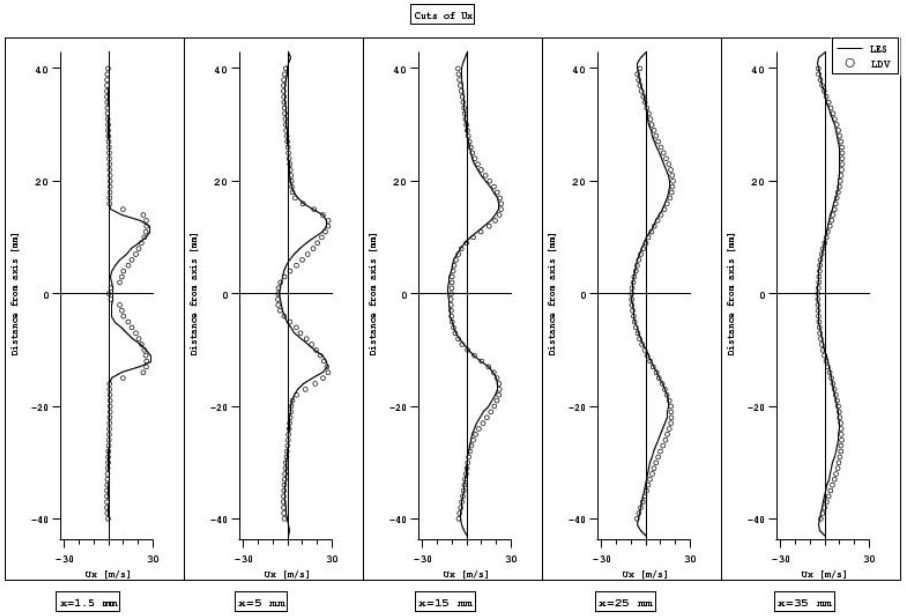


FIG. 3.30 – *Coupes des valeurs moyennes de la vitesse axiale*

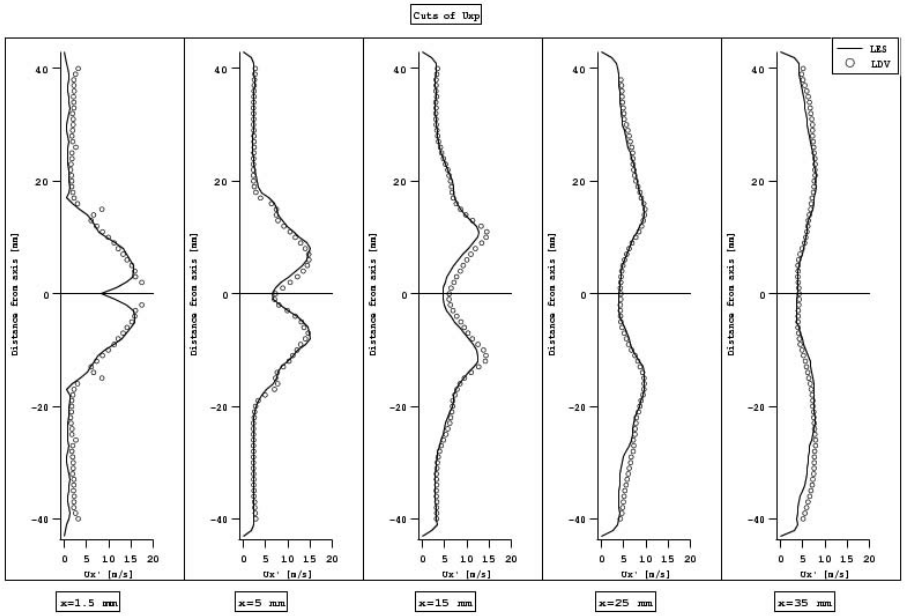


FIG. 3.31 – *Coupes des valeurs RMS de la vitesse axiale*

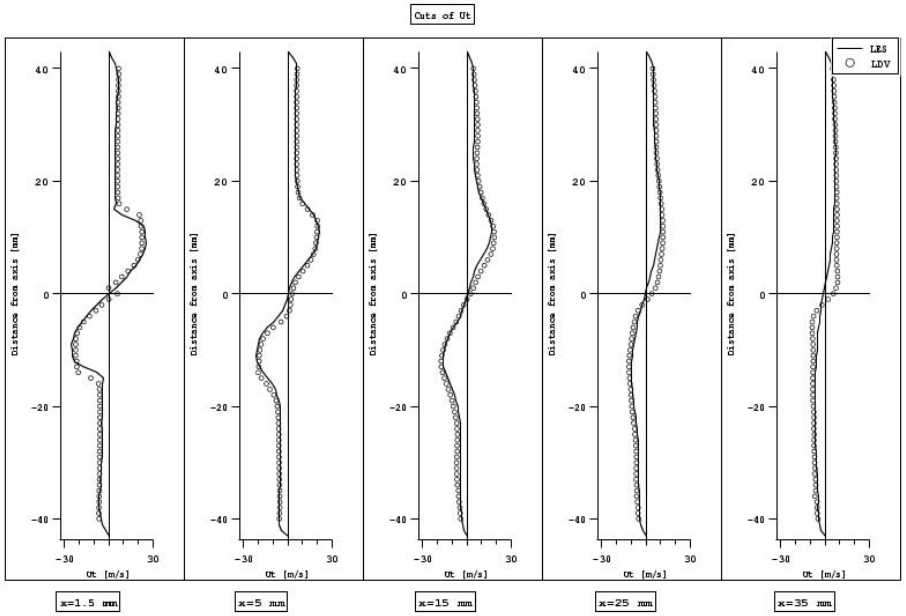


FIG. 3.32 – *Coupes des valeurs moyennes de la vitesse orthoradiale*

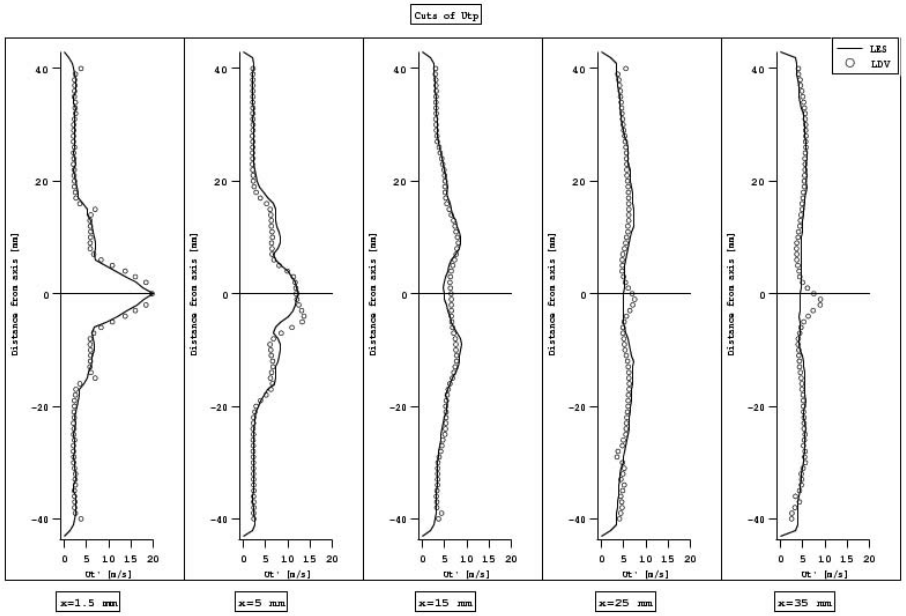


FIG. 3.33 – *Coupes des valeurs RMS de la vitesse orthoradiale*

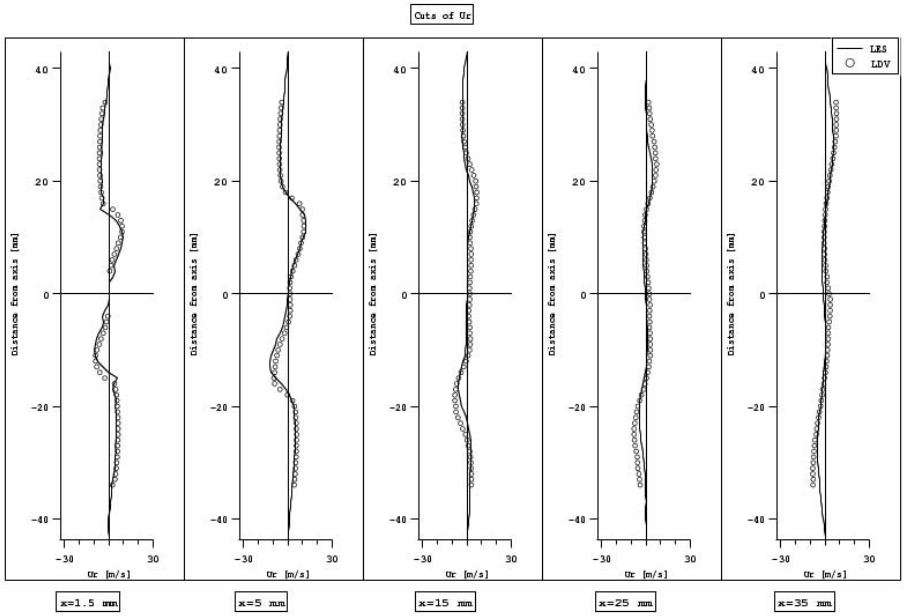


FIG. 3.34 – *Coupes des valeurs moyennes de la vitesse radiale*

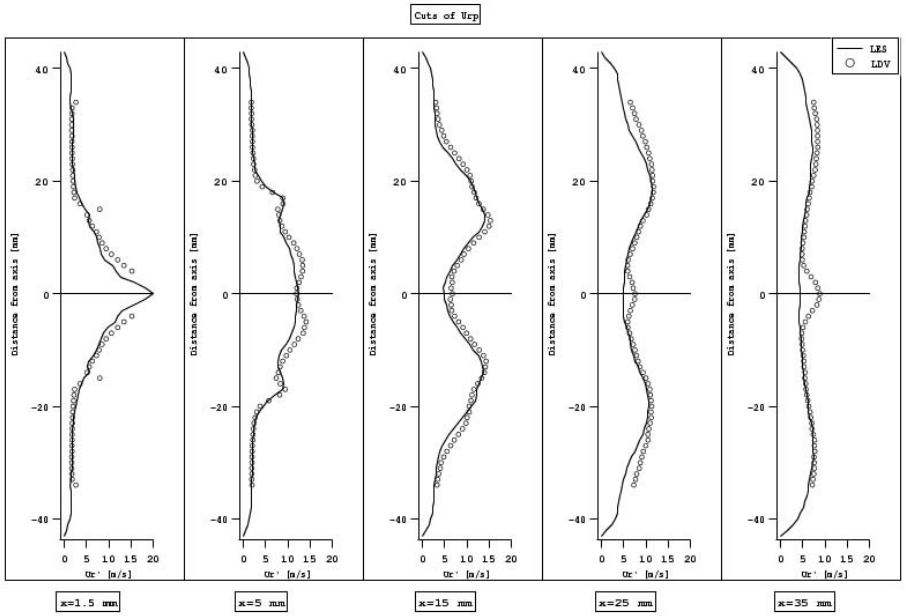


FIG. 3.35 – *Coupes des valeurs RMS de la vitesse radiale*

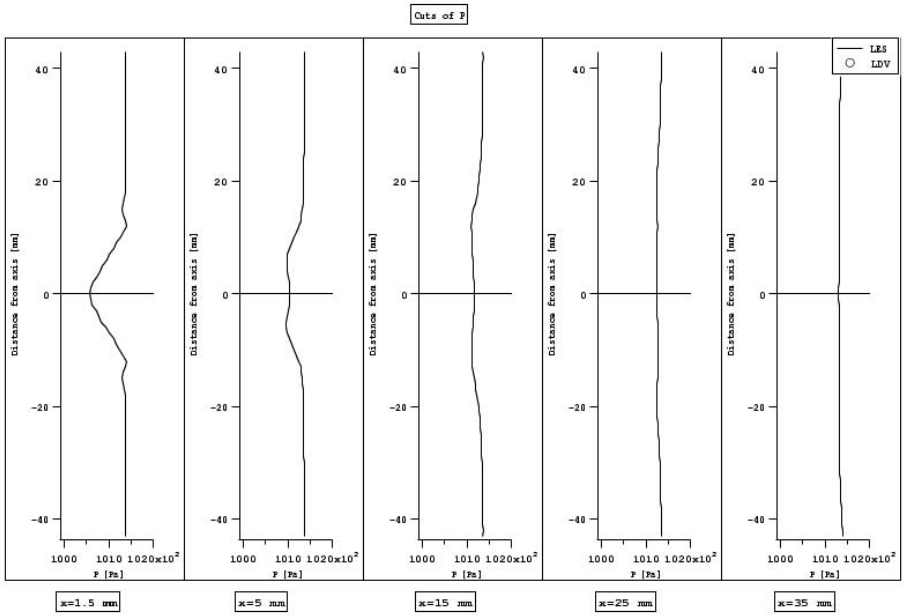


FIG. 3.36 – *Coupes des valeurs moyennes de la pression*

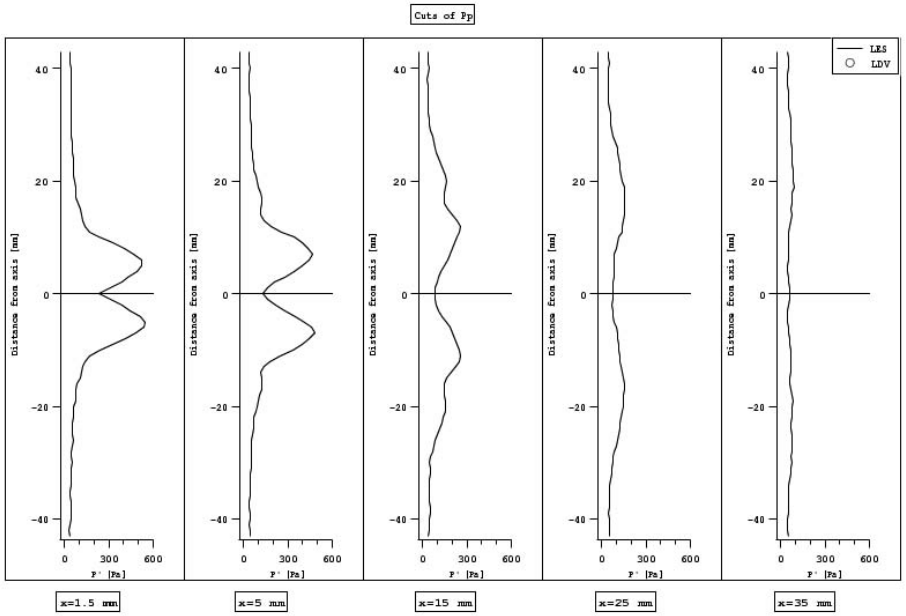


FIG. 3.37 – *Coupes des valeurs RMS de la pression*

Avec la LES, il est donc possible d'étudier directement les divers mécansimes instationnaires présents dans l'écoulement, ce qu'une vision moyennée en temps ne permet pas. Pour s'en convaincre, la Fig. 3.38 représente la norme de la vitesse ainsi sa direction pour le champ moyen et pour un champ instantané quelconque. Il est clair que de nombreux phénomènes instationnaires ont été masqués par l'opération de moyennage temporel. L'accès aux champs instantanés constitue donc un outil d'analyse très puissant pour la compréhension des phénomènes instationnaires.

La Fig. 3.38 permet en outre de constater que sur le champ instantané, deux phénomènes semblent gouvernés l'écoulement dans la chambre:

- la turbulence classique, créant des tourbillons de toutes les tailles dans l'intégralité de la chambre,
- et un phénomène plus localisé en sortie de l'injecteur qui se traduit sur cette coupe par l'apparition de gros tourbillons décalés les uns par rapport aux autres. On constate en outre une antisymétrie de l'écoulement, surtout visible en sortie d'injecteur: l'écoulement est très rapide dans la partie supérieure de l'injecteur et plutôt lent dans la partie inférieure.

Ces observations sont la manifestation du phénomène de PVC évoqué plus haut.

Enfin, il est important de souligner que l'ARZ, qui est très clairement présente sur les champs moyens, n'a pas d'existence propre de manière instantanée. En effet, cette ARZ est la résultante du comportement moyen des tourbillons instationnaires générés par l'injecteur (qui s'enroulent dans le sens propice). Le PVC ne correspond donc pas simplement à la rotation de l'ARZ sur son axe, puisque cette zone recirculée n'existe pas de manière instantanée. Ce PVC est en fait le résultat du mouvement de précession des tourbillons créés par l'injecteur lorsqu'ils traversent la chambre. La Fig. 3.39 présente une vue de l'intérieure de la chambre qui permet de mieux visualiser la structure tridimensionnelle de ce PVC: le centre du Vortex y est matérialisé par une isosurface de basse pression en forme de spirale.

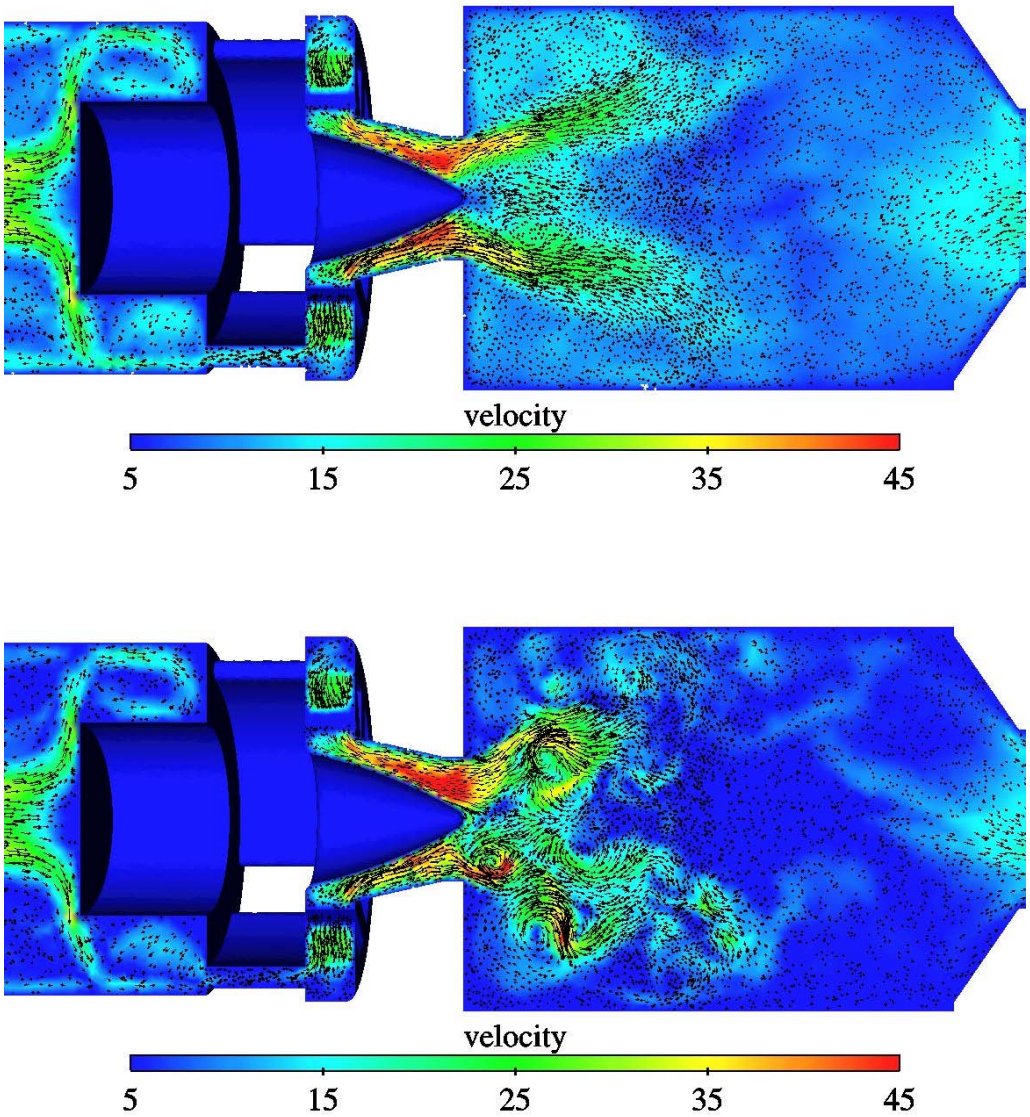


FIG. 3.38 – *Norme et direction du vecteur vitesse pour un champ moyen (en haut) et pour un champ instantané (en bas)*

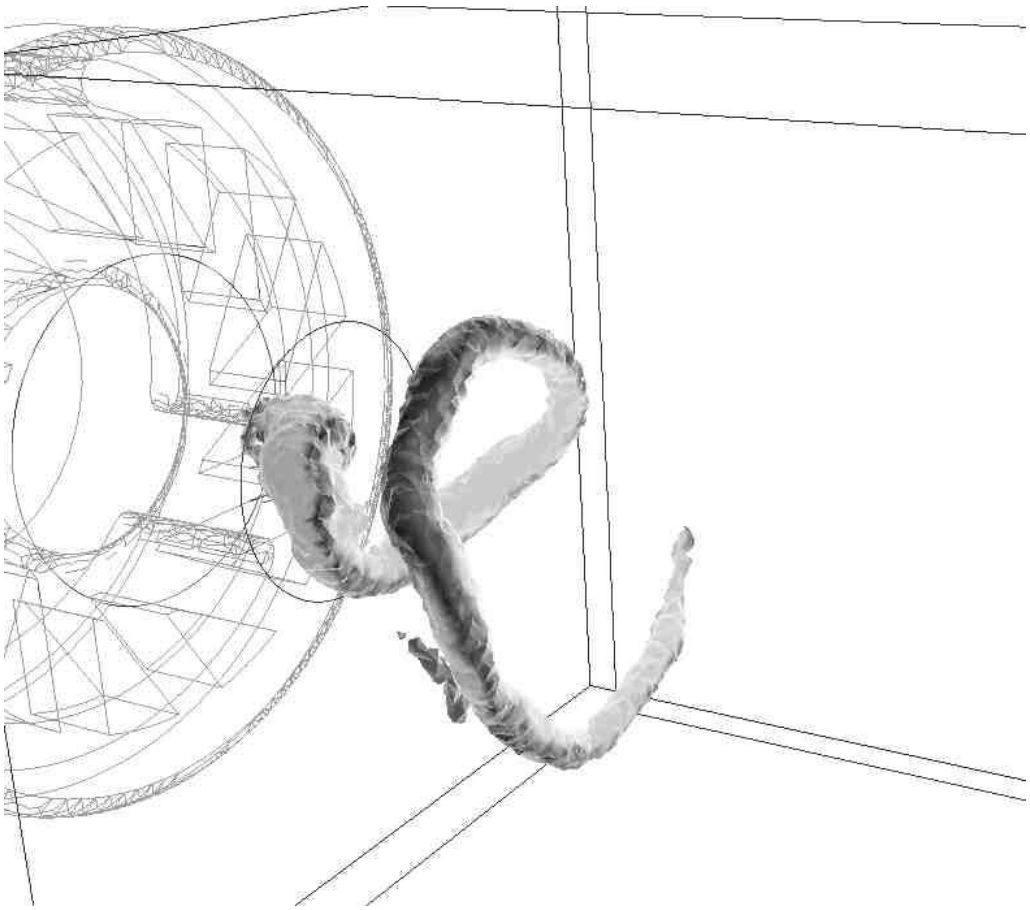


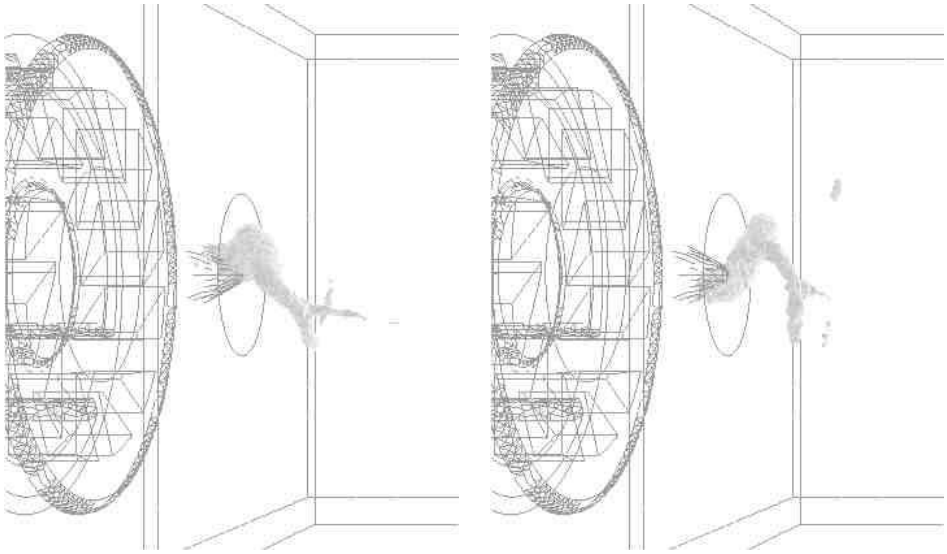
FIG. 3.39 – *Visualisation du PVC par une isosurface de basse pression (on reconnait à gauche les fentes et le nez de l'injecteur)*

Rappelons une fois encore que cette spirale ne représente pas la trajectoire des particules fluides mais uniquement la position du Centre du Vortex à un instant donné. Cette vue permet également de mieux comprendre l'aspect de la Fig. 3.38: les gros tourbillons observés près de l'injecteur sont en fait la trace laissée par le PVC dans le plan de coupe choisi. Notons enfin que la composante orthoradiale de la vitesse tourne dans le sens horaire lorsque l'on regarde l'injecteur depuis la chambre (cela se voit à l'orientation des fentes de l'injecteur sur la Fig. 3.39), alors que la spirale du PVC s'enroule dans le sens anti-horaire. Comme mentionné plus haut, la spirale matérialisant le PVC est animée d'un mouvement propre: elle tourne autour de son axe. C'est ce mouvement qui est la principale source de fluctuations au sein de l'écoulement dans la zone proche de l'injecteur, du fait de sa forte amplitude. Ce phénomène permet donc d'expliquer les valeurs élevées des grandeurs RMS sur la vitesse et la pression dans cette zone, comme cela a été remarqué à la section précédente: le vitesse et la pression varient en effet très fortement localement en fonction de la présence ou pas du Centre du Vortex. La rotation du PVC est représentée sur la Fig. 3.40 qui montre cette spirale à divers instants.

La Fig. 3.40 montrent clairement que le mouvement de rotation du Centre du Vortex se fait dans le sens horaire. Le PVC tourne donc dans le même sens que le swirl et dans le sens opposé à son enroulement instantané.

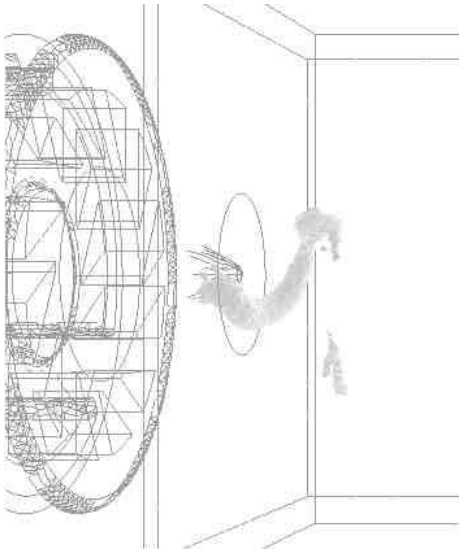
Notons enfin que toute la dynamique du champ de pression est localisée dans le PVC et qu'il n'y pas de mode propre acoustique visible. Si ces modes sont présents, leur amplitude reste faible en comparaison de celle du PVC.

Il faut également signaler que ce PVC ne radie pas de perturbations de pression en champ lointain, contrairement aux ondes acoustiques. En effet, aussi bien sur les visualisations instantanées que sur les coupes moyennes, les perturbations de pression sont très localisées au niveau du PVC et ne produisent pas de bruit notable loin de cette structure.

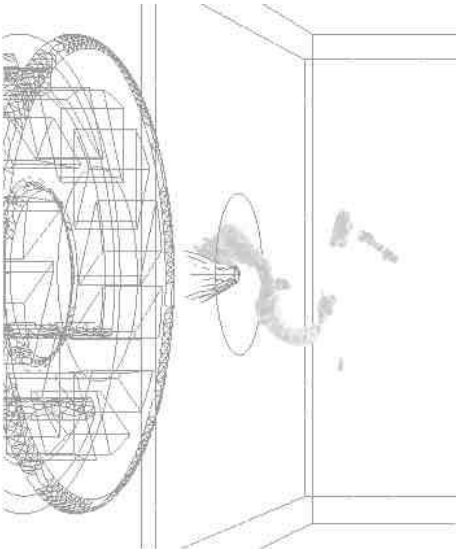


$t = t^0$

$t = t^1$



$t = t^3$



$t = t^4$

FIG. 3.40 – *Visualisation du PVC par isosurface de basse pression à divers instants au cours d'une période de rotation*

3.3.3 Analyse acoustique de la configuration LabScale avec le code AVSP

AVSP est un code de calcul acoustique développé par L. Benoit lors de sa thèse au CERFACS. Ce code permet d'étudier le comportement acoustique de configurations complexes sans faire d'hypothèse sur la géométrie. La comparaison avec la LES et l'expérience est donc immédiate. Il s'agit d'un code complètement tridimensionnel qui permet de résoudre les équations de Helmoltz sur un domaine maillé:

$$\frac{1}{c_0^2}\frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} = \nabla^2 p' \tag{3.4}$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t} = -\nabla p' \tag{3.5}$$

où p' et $\mathbf{u}'$ sont les perturbations acoustiques de pression et de vitesse. Les grandeurs c_0 et ρ_0 sont respectivement la vitesse du son et la densité de l'écoulement non-perturbé. Les équations 3.4 et 3.5 sont obtenues directement à partir des équations d'Euler compressibles et non-réactives en faisant les hypothèses suivantes:

- pas de forces volumiques,
- faible nombre de Mach,
- perturbations de faible amplitude (acoustique linéaire),
- et écoulement isentropique.

Pour résoudre les Eq. 3.4 et 3.5, les solutions sont écrites sous la forme de modes harmoniques monochromatiques stationnaires.

$$p'(x,y,z,t) = \Re\left(\widehat{p'}(x,y,z)e^{-j\omega t}\right) \tag{3.6}$$

$$u_i'(x,y,z,t) = \Re\left(\widehat{u_i'}(x,y,z)e^{-j\omega t}\right) \tag{3.7}$$

où ω est la pulsation du signal.
Les termes spatiaux $\widehat{p'}(x,y,z)$ et $\widehat{u_i'}(x,y,z)$ s'écrivent alors:

$$\widehat{p'}(x,y,z) = |p'(x,y,z)|e^{j\phi_p(x,y,z)} \tag{3.8}$$

$$\widehat{u_i'}(x,y,z) = |u_i'(x,y,z)|e^{j\phi_{u_i}(x,y,z)} \tag{3.9}$$

Les termes $|u_i'|$ et $|p'|$ sont les amplitudes de ces signaux et ϕ_{u_i} et ϕ_p leurs phases. Toutes ces grandeurs sont des nombres réels qui dépendent de la position. L'équation 3.4 s'écrit alors:

$$-\frac{\omega^2}{c_0^2}\widehat{p'} = \nabla^2\widehat{p'} \tag{3.10}$$

C'est cette équation qui est résolue numériquement par AVSP.
Les valeurs de $\widehat{u_i'}$ sont ensuite calculées grâce à la relation:

$$j\omega\rho_0\widehat{\mathbf{u}'} = \nabla\widehat{p'} \tag{3.11}$$

Il est important d'insister sur le fait que les équations 3.10 et 3.11 portent uniquement sur des termes spatiaux et ne contiennent plus de termes temporels: il faut alors trouver les valeurs et les vecteurs propres d'un système linéaire. Dans AVSP la méthode retenue a été d'utiliser la librairie d'algèbre linéaire ARPACK, spécialement conçue à cet effet .

Pour étudier la chambre LabScale, la configuration retenue prend en compte toute la géométrie de la LES mis à part l'atmosphère: le flexible, le plenum, l'injecteur, la chambre et l'échappement. En effet, il n'a pas été nécessaire de mailler l'atmosphère dans AVSP car l'hypothèse $p' = 0$ est très bien vérifiée au niveau de l'échappement. Pour cela il faut néanmoins modifier la longueur du tube d'échappement pour prendre en compte les pertes radiatives présente dans la réalité: la longueur de l'échappement dans la configuration AVSP est donc $L_e' = L_e + R_e$, où L_e est la longueur réelle de l'échappement et R_e son rayon. Cette correction est tout à fait classique et est préconisée par de nombreux auteurs [Poinsot, 2001 £1555].

Signalons enfin que le maillage utilisé dans AVSP est différent de celui de la LES: $44'000$ noeuds et $222'000$ cellules, soit environ 10 fois moins que dans le maillage initial. En effet, on ne s'intéresse qu'à des phénomènes de grande longueur d'onde et il ne sert à rien de garder un maillage aussi raffiné que celui utilisé pour la LES, qui doit permettre de résoudre des strcutures très fines. En ce qui concerne les conditions aux limites, une condition de type $u' = 0$ a été choisie en entrée et une condition de type $p' = 0$ a été adoptée pour la sortie. Comme cela a été signalé plus haut, la condition de sortie est très bien vérifiée expérimentalement et dans la LES. Le choix $u' = 0$ est moins justifié pour

l'entrée car il s'agit normalement d'une entrée non-réflechissante: ce type de condition à la limite n'étant pas encore disponible dans AVSP, c'est cependant le choix le plus logique. Les Fig. 3.41 à 3.50 présentent le paramètre $|p'|$ pour les dix premiers modes obtenus par AVSP. La vue appelée "complète" est une visualisation directe du résultat d'AVSP: il s'agit de l'amplitude des perturbations de pression acoustique dans la configuration. Cette amplitude est normée: elle varie entre 0 et 1. En effet, seule l'acoustique linéaire est prise en compte dans AVSP et donc l'amplitude des modes n'est pas définie: seul leur forme est pertinente. La vue appelée "projection sur l'axe des abscisses" est une manière de représenter quantitativement ces résultats sur un graphique. Pour cela, les amplitudes des perturbations de pression ont simplement été représentées en fonction de leur abscisse. Cela revient donc à projeter les résultats sur l'axe des X. Cette repésentation est très bien adaptée aux modes essentiellement longitudinaux (bien que la définition d'un mode longitudinal pose problème dans le cas d'une géométrie complexe, la chambre LabScale est globalement orientée dans la direction de l'axe X). Par contre, la représentation des modes transverses ou composés n'est pas très pertinente par cette méthode, puisque justement ces modes présentent majoritairement des fluctuations dans les directions Y et Z.

- Le mode de fréquence f_1 Hz est le mode fondamental de l'installation complète: $|p'|$ est maximal en entrée, nul en sortie et $|p'|$ ne s'annule nul part. C'est l'équivalent du mode quart d'onde d'un tube simple.
- Les modes f_2 et f_3 correspondent aux "harmoniques" suivantes: mode trois quarts d'onde et cinq quarts d'onde. Pour ces deux modes, l'amplitude de la pression acoustique s'annule respectivement une et deux fois. Pour le mode f_2 l'injecteur est situé dans un noeud de pression ($|p'|$ petit) alors que dans le mode f_3 l'injecteur est situé sur un ventre de pression ($|p'|$ grand): si du carburant était injecté dans les fentes, ces deux modes auraient donc des comportement très différents vis à vis de l'injection.
- Le mode f_4 présente des fluctuations de pression localisée essentiellement dans le flexible et n'est donc pas physique puisque la longueur de ce flexible dans la simulation est complètement arbitraire.

- Le mode f_5 est quand à lui plutôt associé au plénum.
- Les modes f_6 et f_7 possèdent la même fréquence propre. Il s'agit de modes transverses et les Fig. 3.45 et 3.46 démontre bien que la forme de ces modes est identique, à la différence près qu'ils sont décalées d'un quart de tour par rapport à l'axe de la chambre. Cela est confirmé par le fait que les projections sur l'axe des abscisses de ces deux modes sont identiques. En réalité, la fréquence propre de ces modes n'est pas exactement identique car la configuration n'est pas parfaitement symétrique: en effet les trois fentes d'injection d'air viennent briser cette symétrie. Il s'agit cependant d'un détail et la différence sur les fréquences propres n'apparait que sur la troisième décimale, ce qui les rend indiscernables dans la pratique. Les fluctuations de pressions sont maximales dans la chambre et quasiment nulles ailleurs: il s'agit donc de modes propres de la chambre seule.
- De même, les modes f_8 et f_9 sont des modes transverses de fréquences identiques mais décalés d'un quart de tour. Ces modes sont par contre plutôt associés au plénum.
- Enfin le mode f_{10} est un harmonique encore plus élevé du quart d'onde initial. Ce mode s'annule cinq fois et présente un maximum dans le convergent.

Il existe en fait une infinité de modes propres pour cette configuration, mais dans la pratique, il est rare que des modes dépassant quelques milliers de Hertz puissent interagir avec la flamme. Ces modes ne présentent donc pas d'intérêt du point de vue des instabilités de combustion.

3.3.4 Analyse spectrale des données expérimentales et de la LES

À partir des enregistrements temporels des signaux de pression et de vitesse, il est possible de procéder à une analyse spectrale de l'écoulement. Une fois les fréquences dominantes identifiées, les résultats obtenus avec le code AVSP vont permettre de trier ces fréquences entre celles qui sont acoustiques (prédites par le code) et celle qui sont hydrodynamiques (les autres).

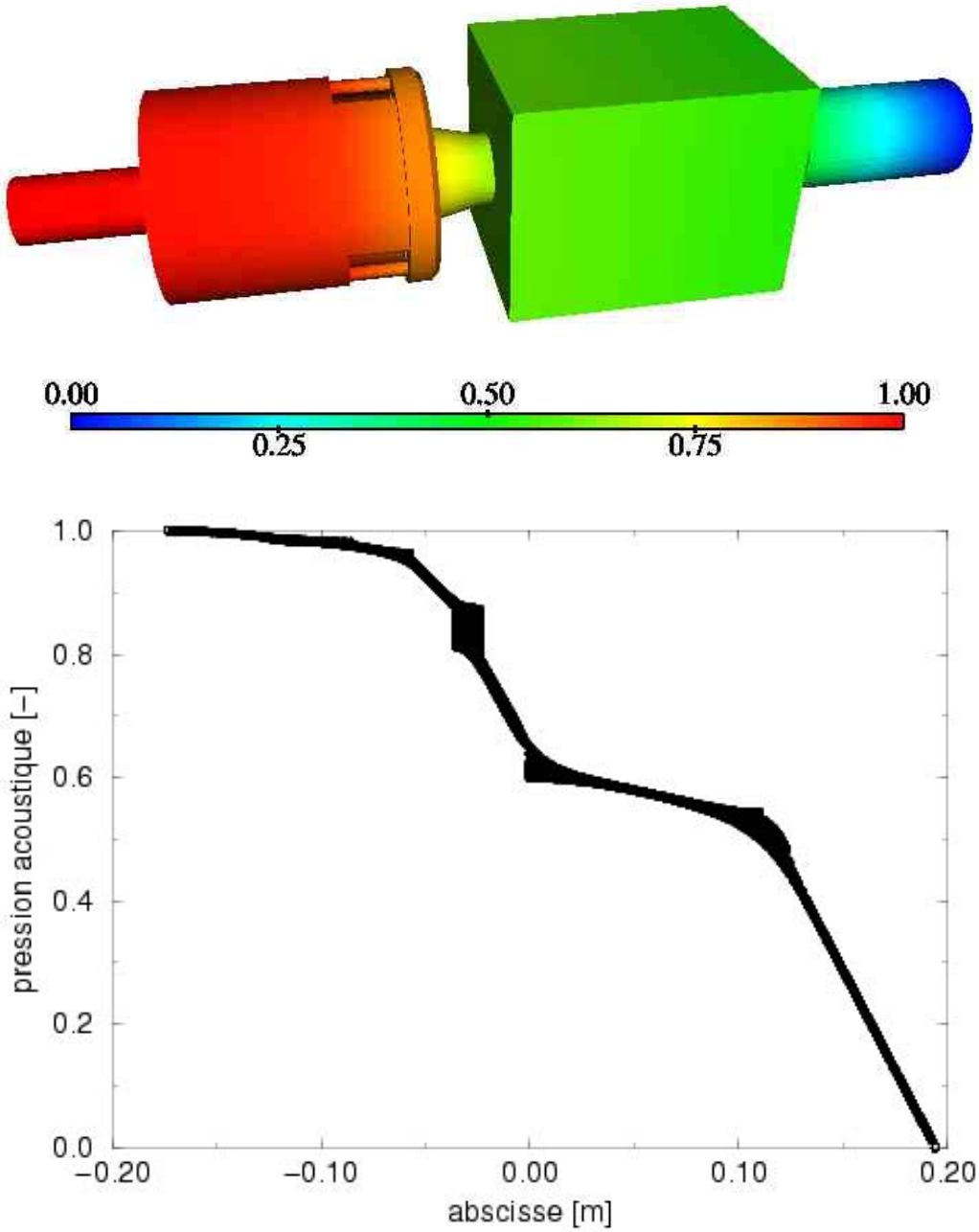


FIG. 3.41 – *Pression acoustique du mode n°1 (171 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

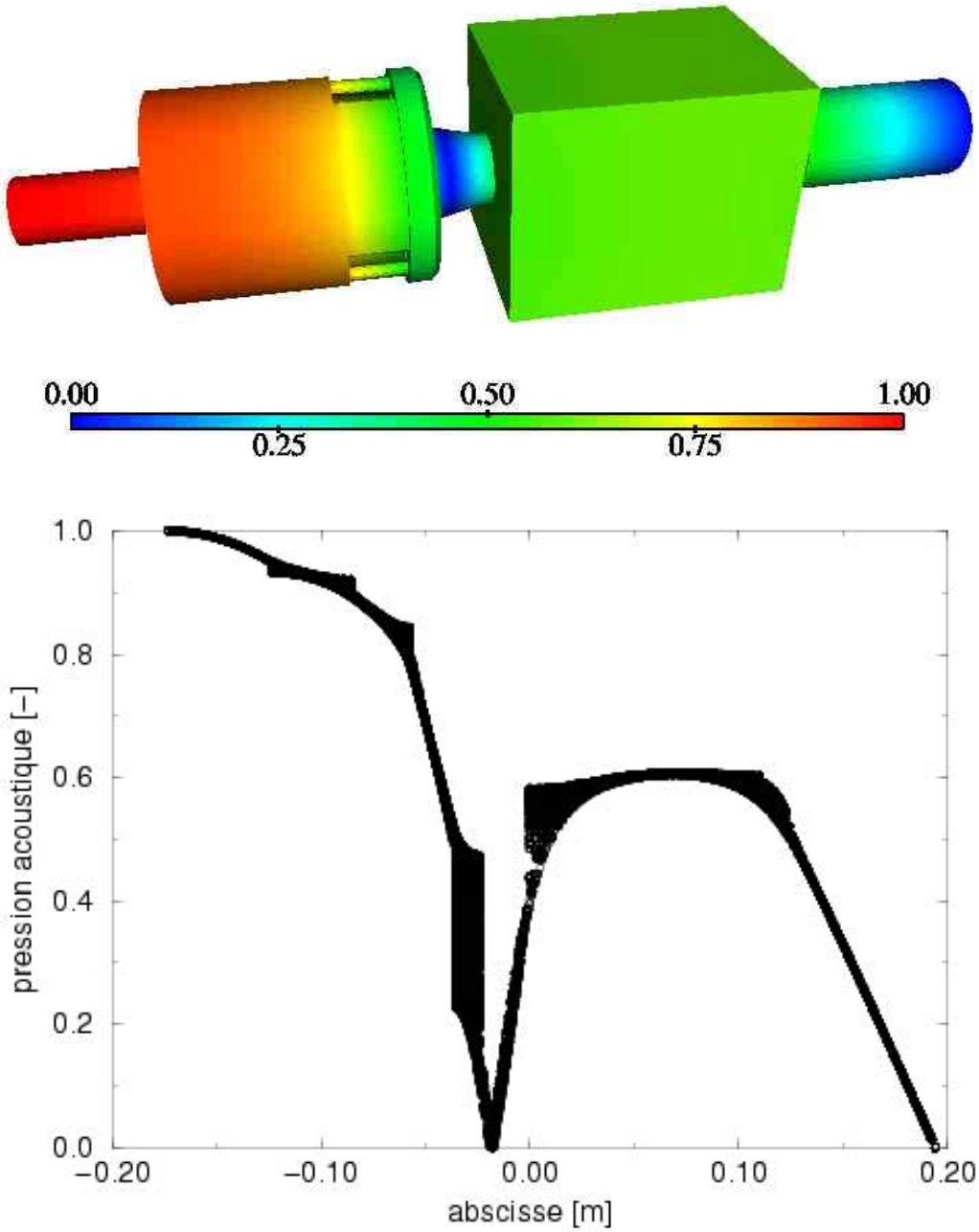


FIG. 3.42 – *Pression acoustique du mode n°2 (362 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

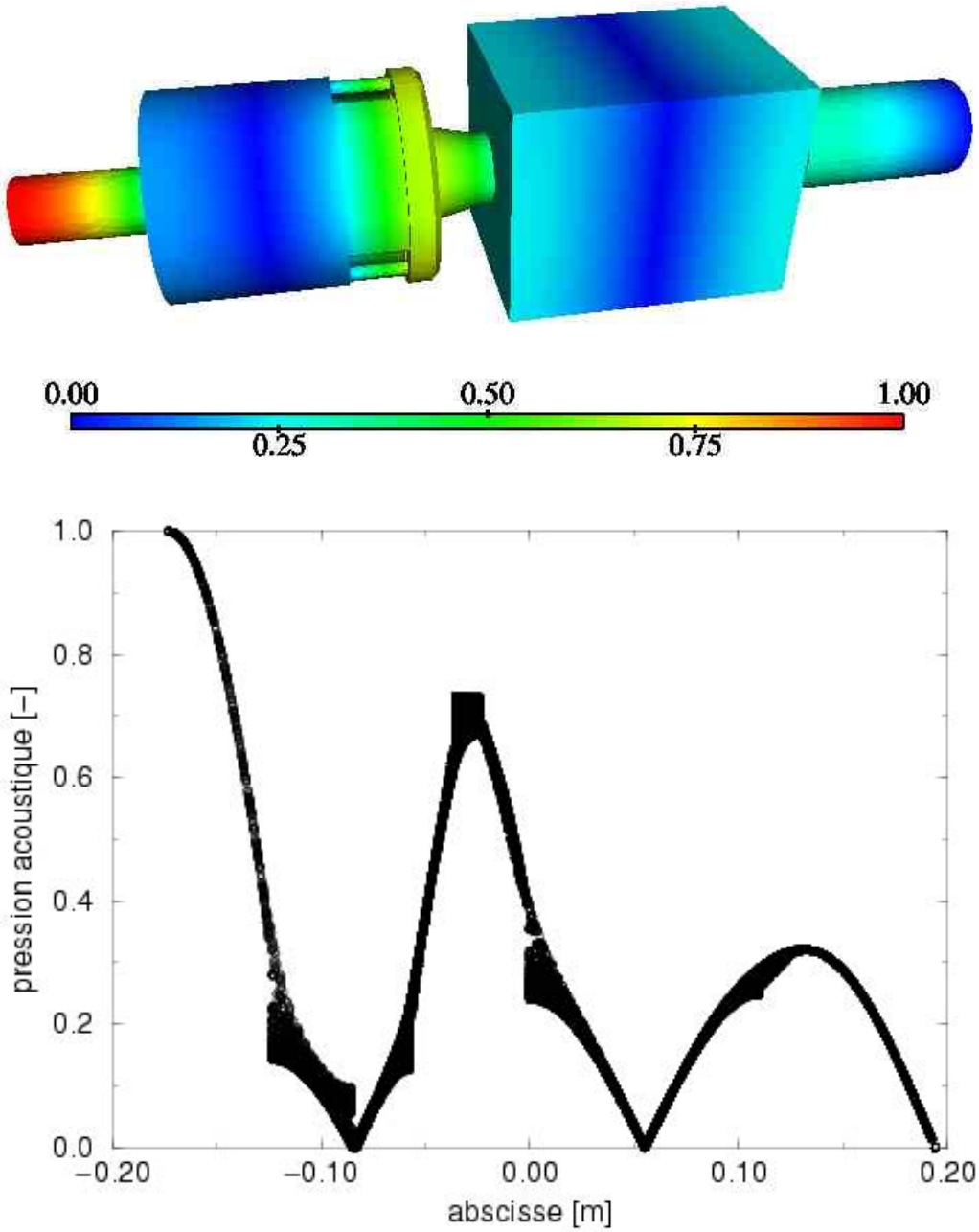


FIG. 3.43 – *Pression acoustique du mode n°3 (1403 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

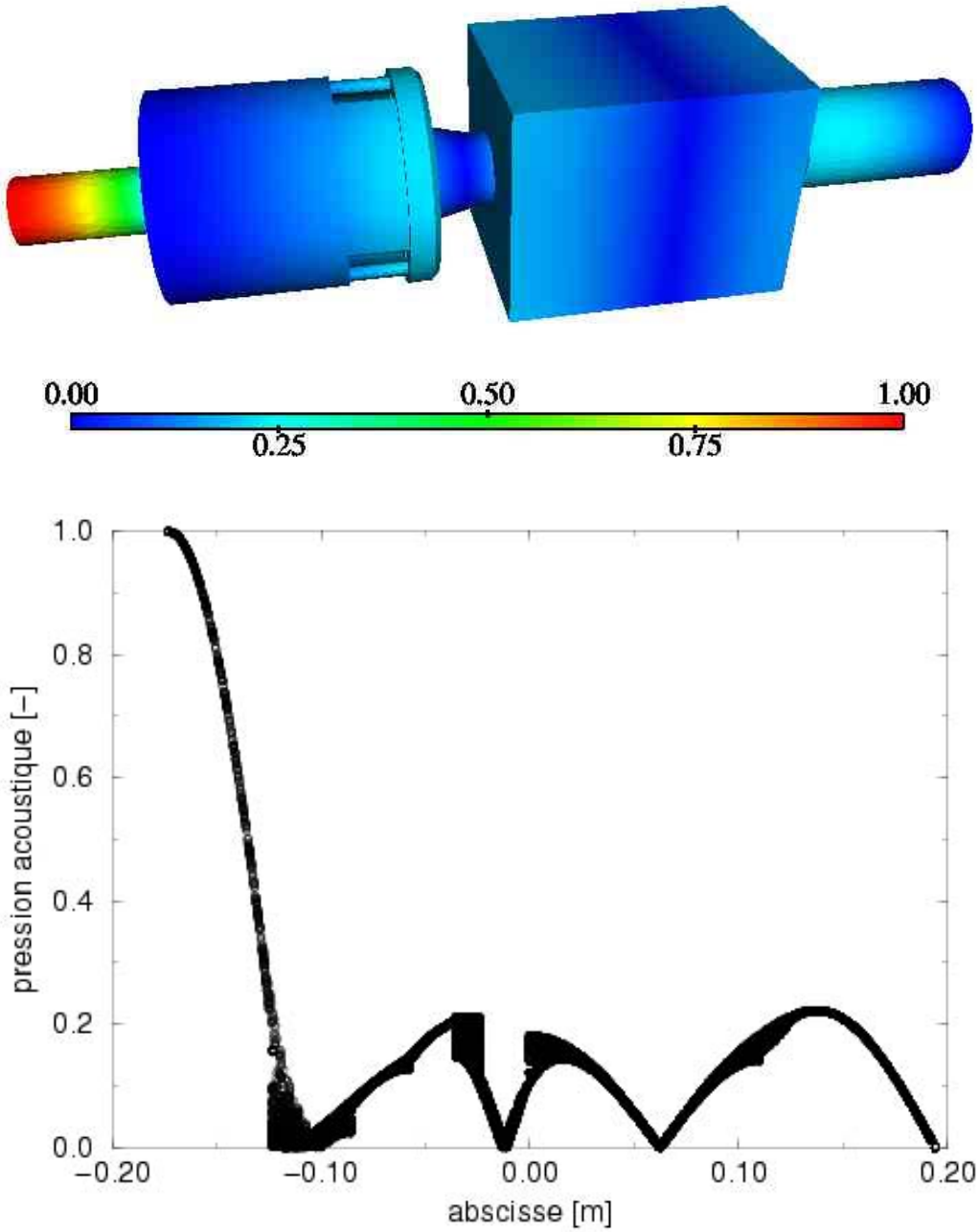


FIG. 3.44 – *Pression acoustique du mode n°4 (1540 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

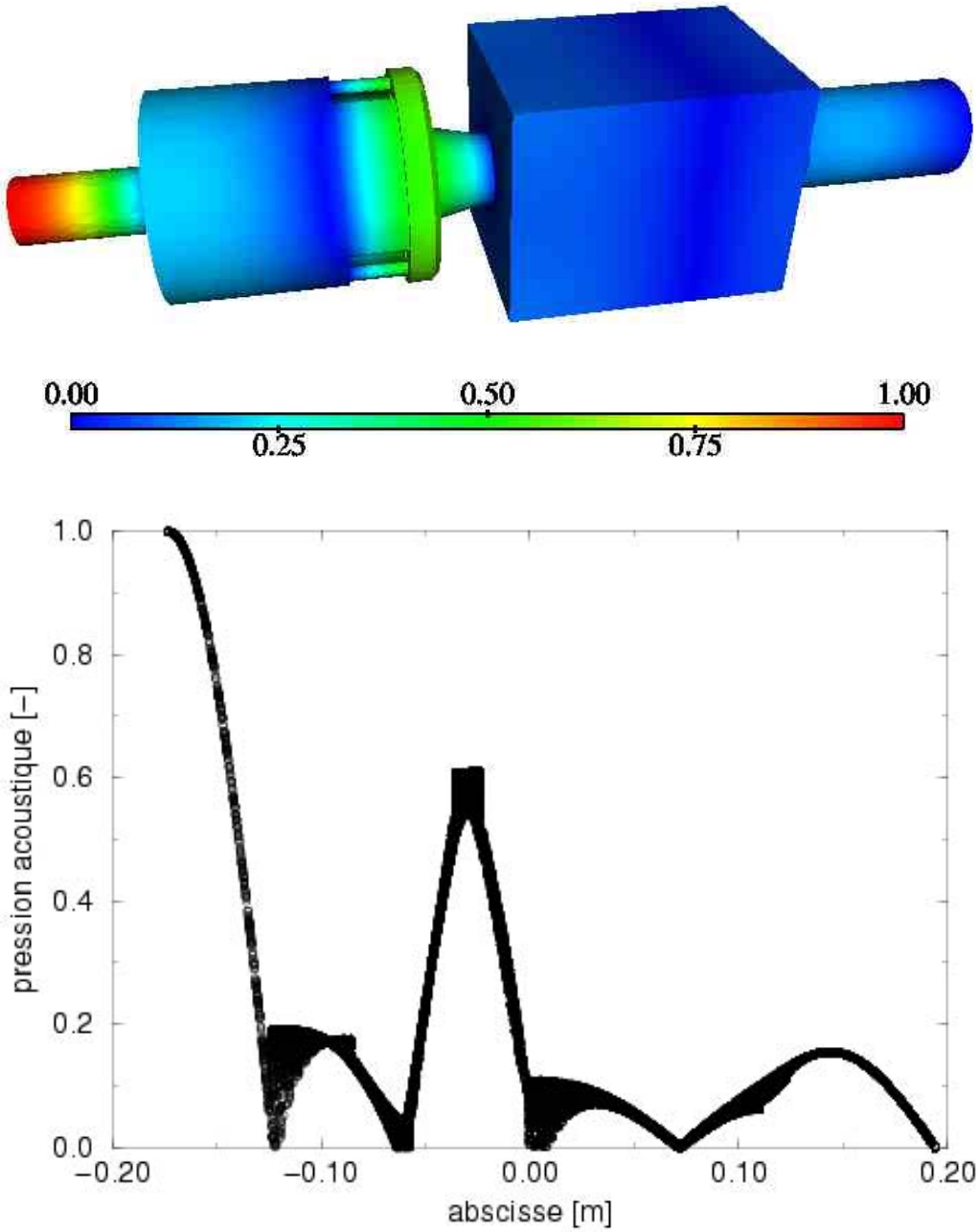


FIG. 3.45 – *Pression acoustique du mode n°5 (1732 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

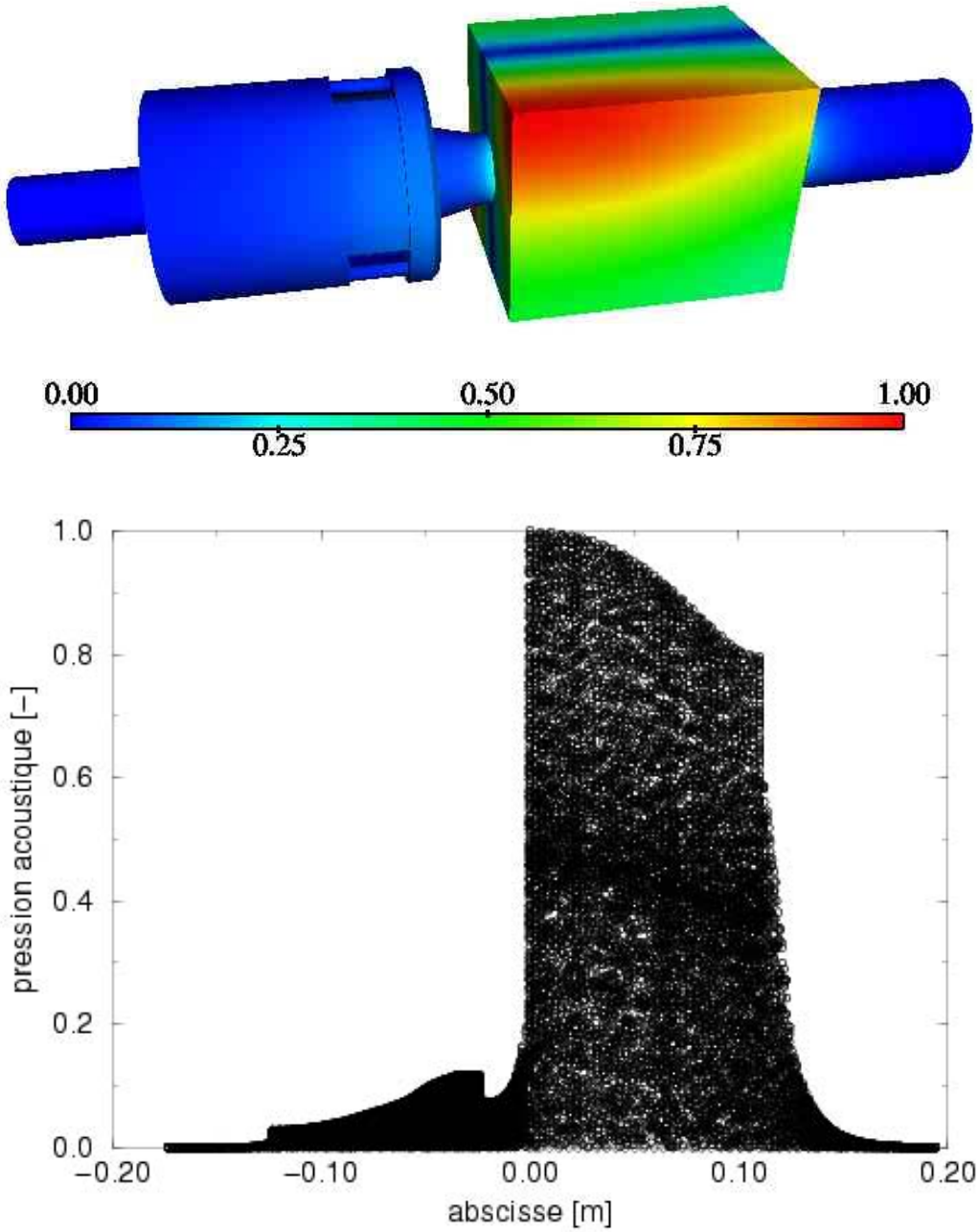


FIG. 3.46 – *Pression acoustique du mode n°6 (2091 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

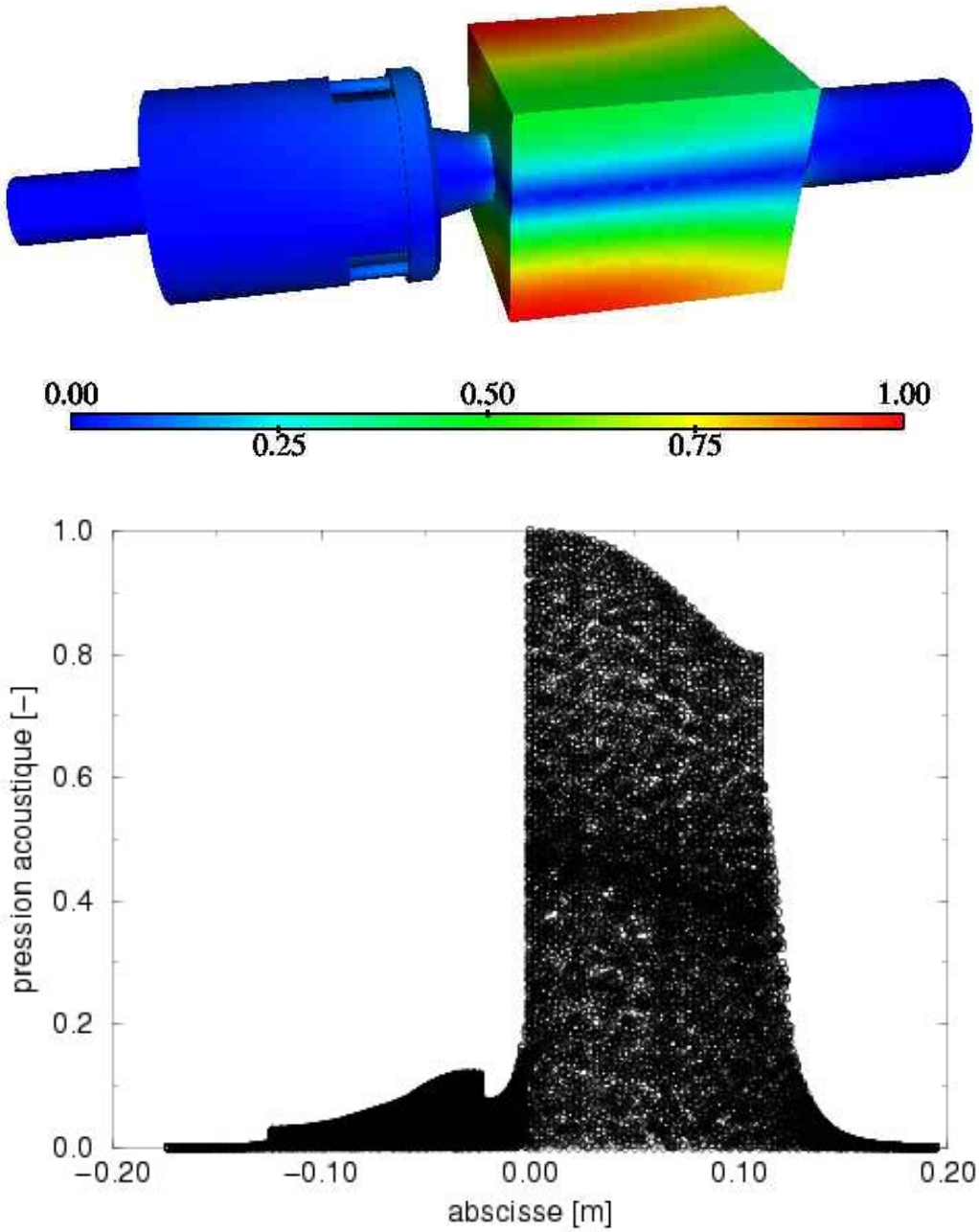


FIG. 3.47 – *Pression acoustique du mode n°7 (2091 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

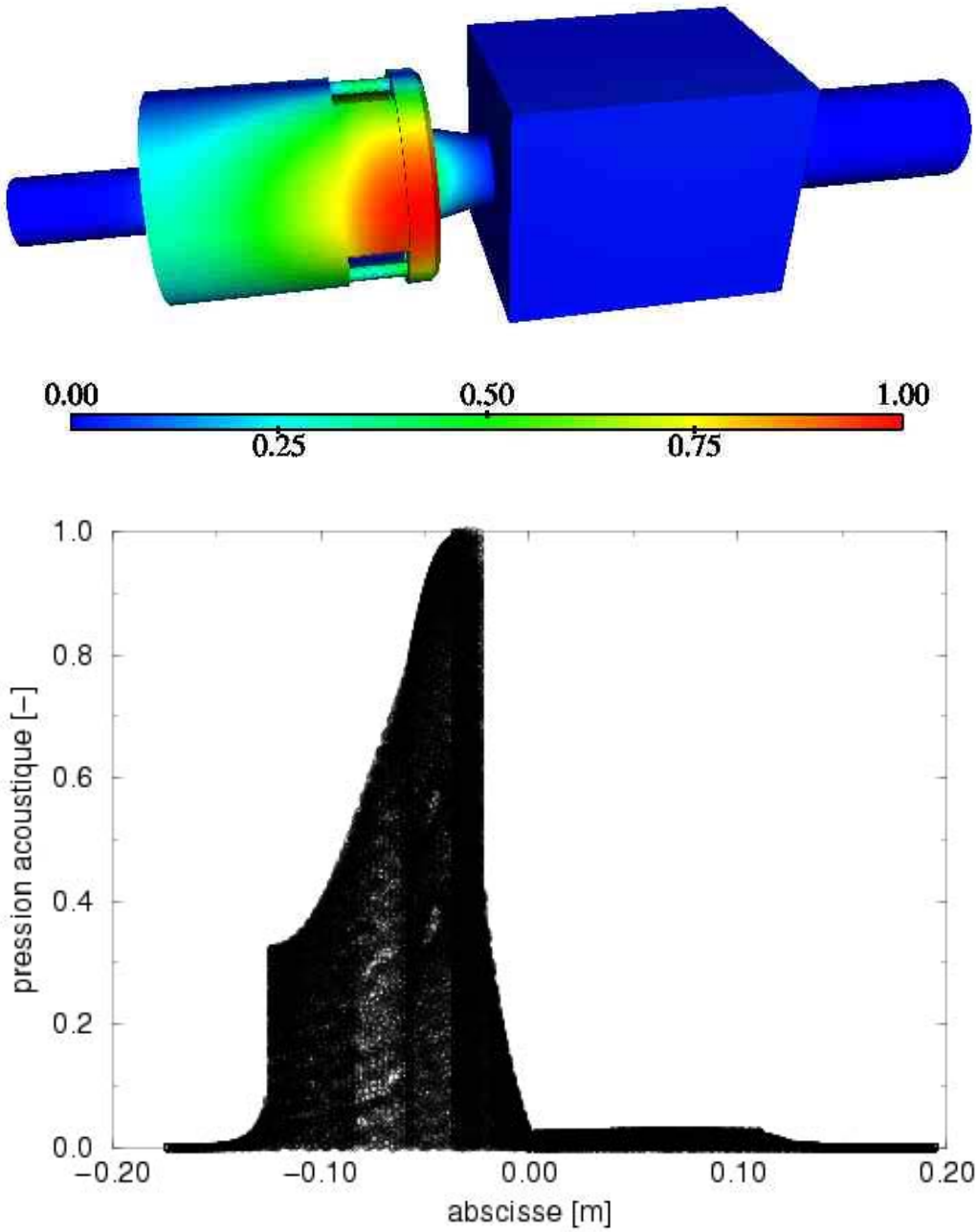


FIG. 3.48 – *Pression acoustique du mode n°8 (2158 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

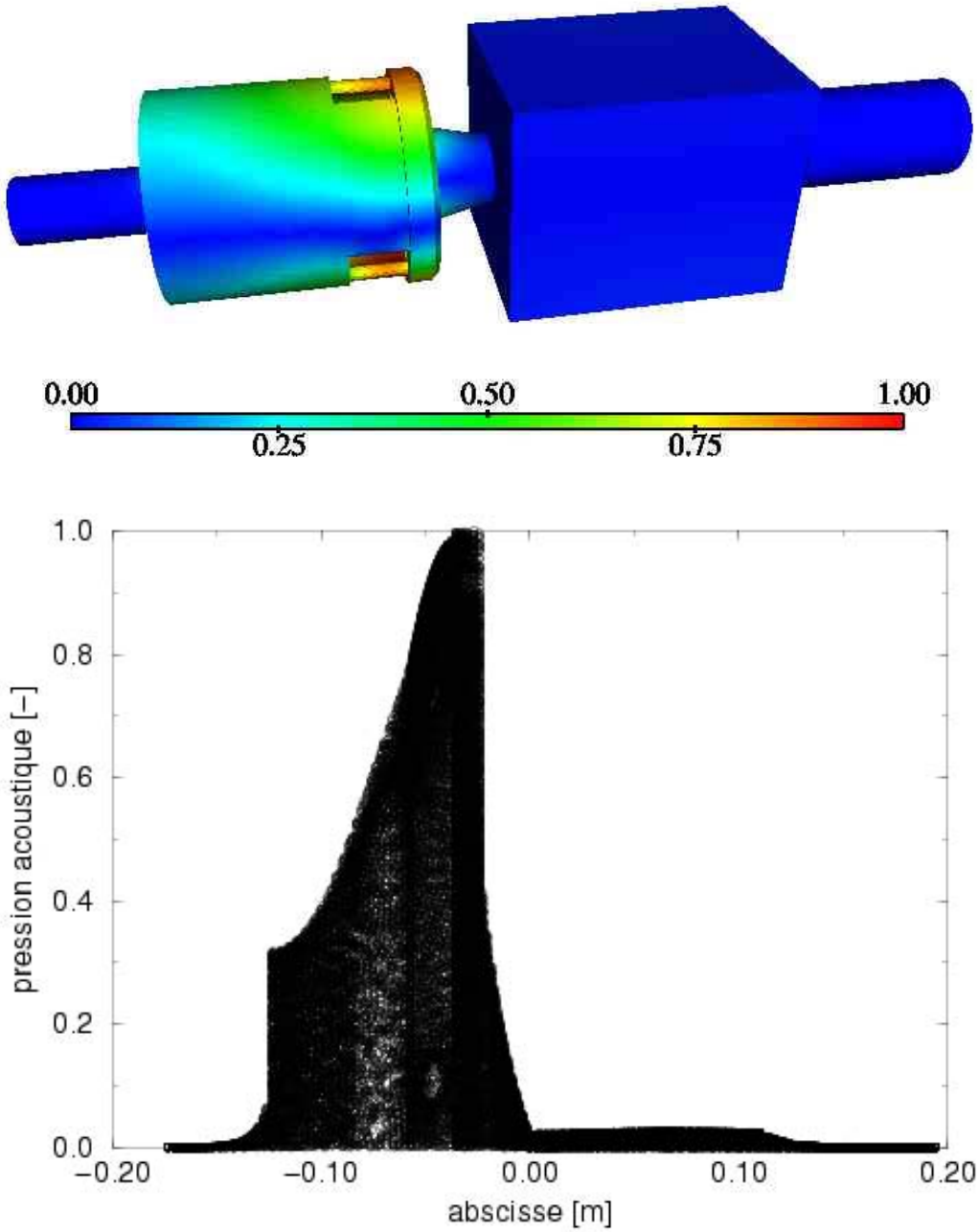


FIG. 3.49 – *Pression acoustique du mode n°9 (2158 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

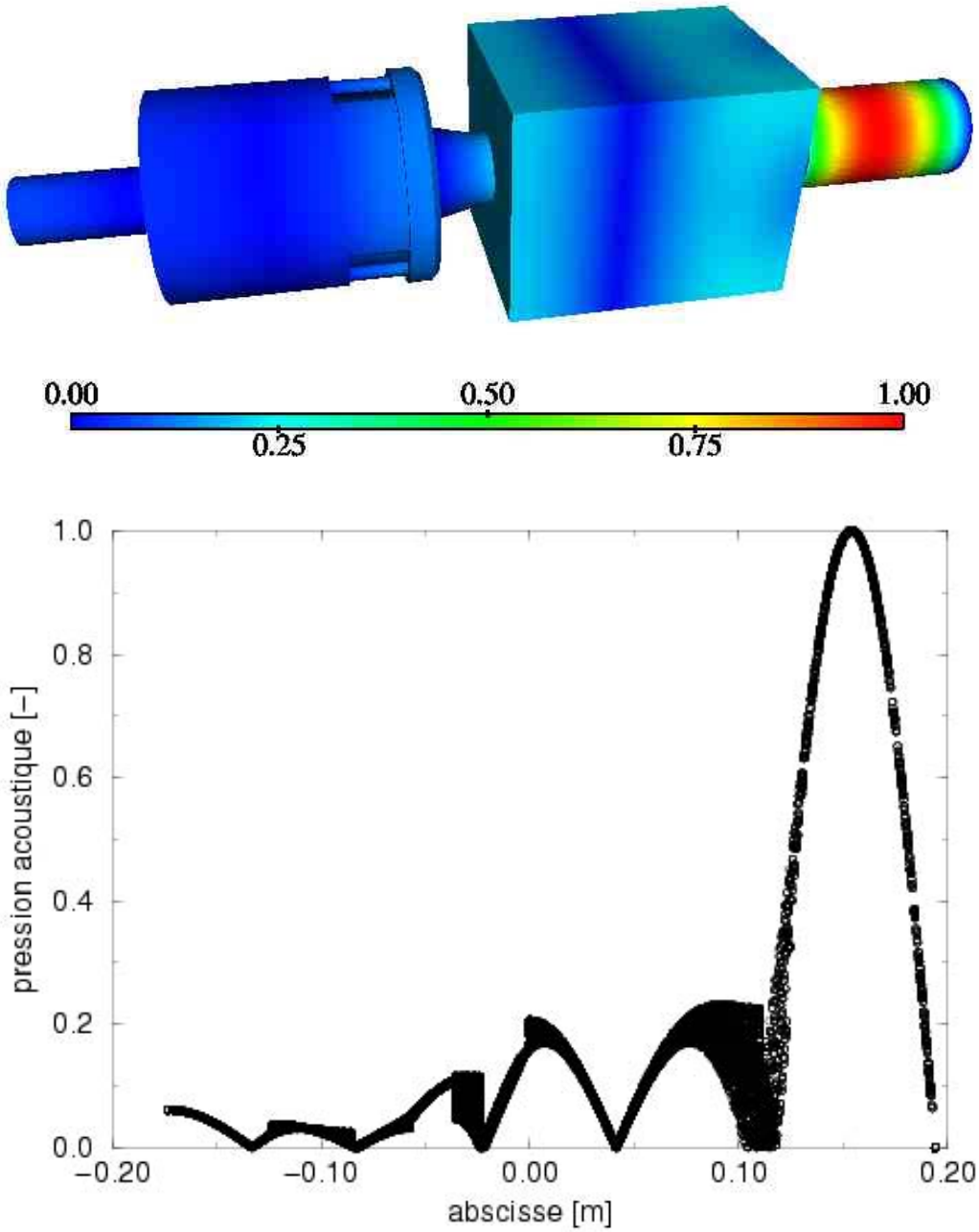


FIG. 3.50 – *Pression acoustique du mode n°10 (2189 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

Les mesures effectuées par le DLR-Stuttgart sont essentiellement de trois types:

- des mesures de pression grâce à un microphone,
- des mesures de vitesses par fil chaud,
- et des mesures de vitesses par LDV (Laser Doppler Velocimetry).

La LDV a été utilisée pour produire les cartes de champs moyen et RMS de la vitesse mais elle ne permet pas de produire de signaux temporels pouvant donner lieu à une analyse spectrale: seuls les deux premières techniques permettent de réaliser cette analyse.

La Fig. 3.51 présente une comparaison des spectres obtenus expérimentalement et avec le calcul LES en mesurant la pression dans la chambre, au niveau de la sortie de l'injecteur.

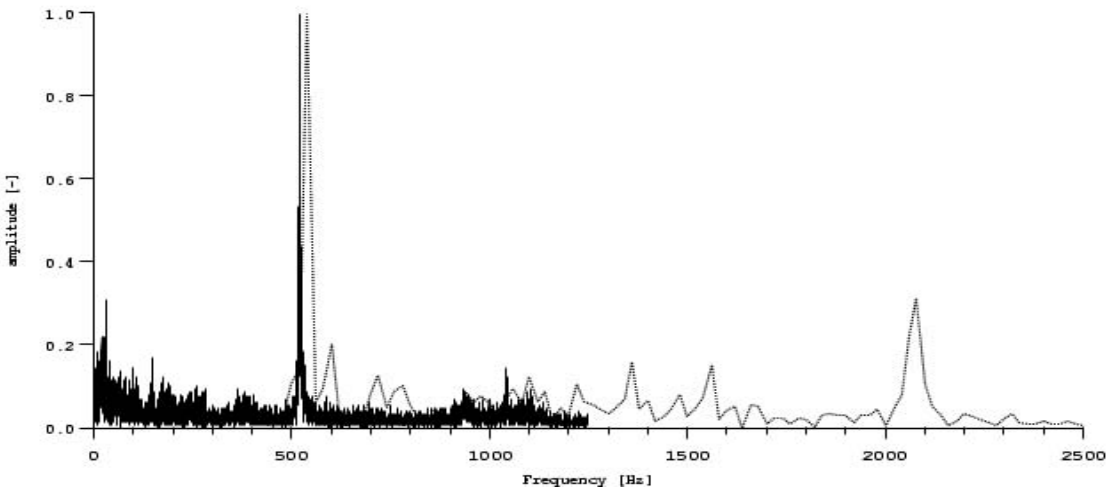


FIG. 3.51 – *Spectre de pression expérimentale (—) et LES (···) dans la chambre, en face de la sortie de l'injecteur*

On constate un excellent accord pour la prédiction de la fréquence dominante: $f^{\text{exp}} = 522$ Hz et $f^{\text{LES}} = 540$ Hz. Cette fréquence n'apparaît pas dans la série des modes propres calculés par AVSP: il ne s'agit donc pas d'un mode acoustique. Cette fréquence est en fait associée à la rotation du PVC: par simple observation, on s'apperçoit que celui-ci fait un tour complet en environ 2 ms, soit à une fréquence de 500 Hz. En outre, le signal a été mesuré précisément à l'endroit où le PVC a été observé numériquement.

On constate en outre la présence du premier harmonique aux environs de 1050 Hz, dans l'expérience comme dans le calcul. On remarque également la présence de deux petits pics à 1360 Hz et 1560 Hz qui peuvent correspondre aux modes acoustiques f_3 et f_4 prédits par AVSP. Enfin il faut noter la présence d'un pic important à 2080 Hz qui peut correspondre soit aux modes transverses f_6 et f_7 soit à la quatrième harmonique du fondamental à 520 Hz.

Afin de déterminer l'origine de cette fréquence, la Fig. 3.52 présente des spectres de pression (obtenus par la LES) sur les parois de la chambre. On constate d'une part que plus on s'éloigne de l'injecteur plus le mode à 520 Hz diminue en intensité mais on remarque surtout un mode à 2080 Hz qui est toujours présent. Cela confirme donc l'origine acoustique de ce mode et permet de l'identifier formellement comme le mode transverse de la chambre évoqué plus haut.

La Fig. 3.53 montre également une comparaison de spectre de pression entre l'expérience et le calcul mais pour un signal pris dans le plénum.

Là encore, les résultats expérimentaux et le calcul LES fournissent tous les deux des valeurs proches pour la fréquence dominante: $f^{\text{exp}} = 300$ Hz et $f^{\text{LES}} = 360$ Hz. L'écart entre les deux est légèrement supérieur que précédemment mais il ne faut pas oublier deux choses:

- d'une part la résolution spectrale du calcul est de l'ordre de 20 Hz (le calcul a duré 50 ms),
- et d'autre part, dans le calcul LES, la condition à la limite en entrée n'est pas exactement identique à celle de l'expérience: le flexible a été tronqué et la condition à la limite n'est pas parfaitement non-réfléchissante.

Ces deux phénomènes peuvent expliquer cette légère déviation. En outre, cette fréquence est très proche de la fréquence $f_2 = 362$ Hz prédite par AVSP: il s'agit donc du second mode acoustique de la configuration.

Comme sur le spectre précédent, on remarque la présence d'un petit pic aux environs

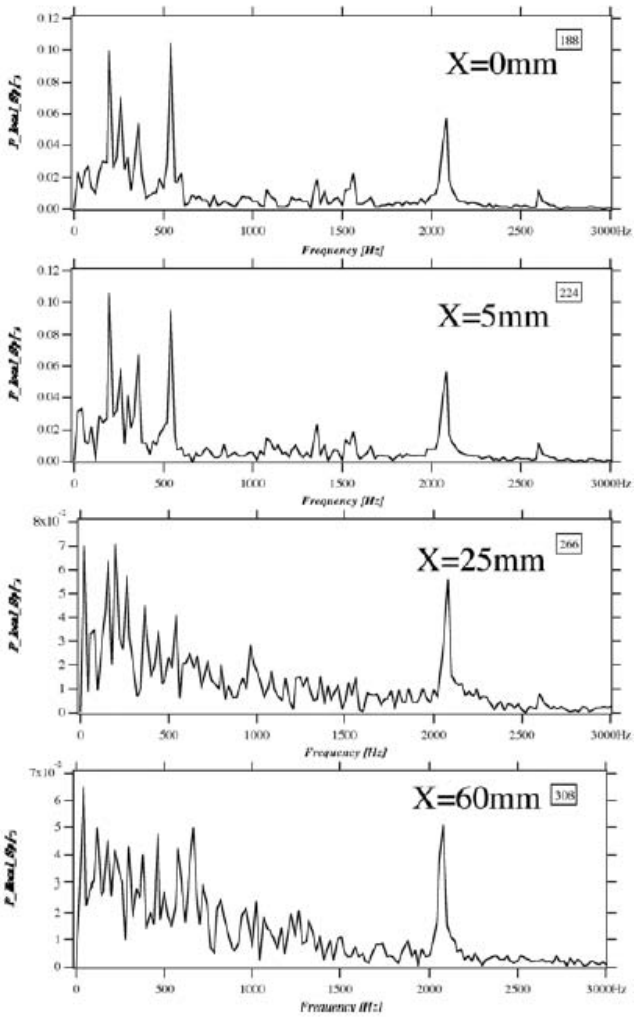


FIG. 3.52 – *Spectres de pression obtenus par LES sur les parois de la chambre pour différentes abscisses*

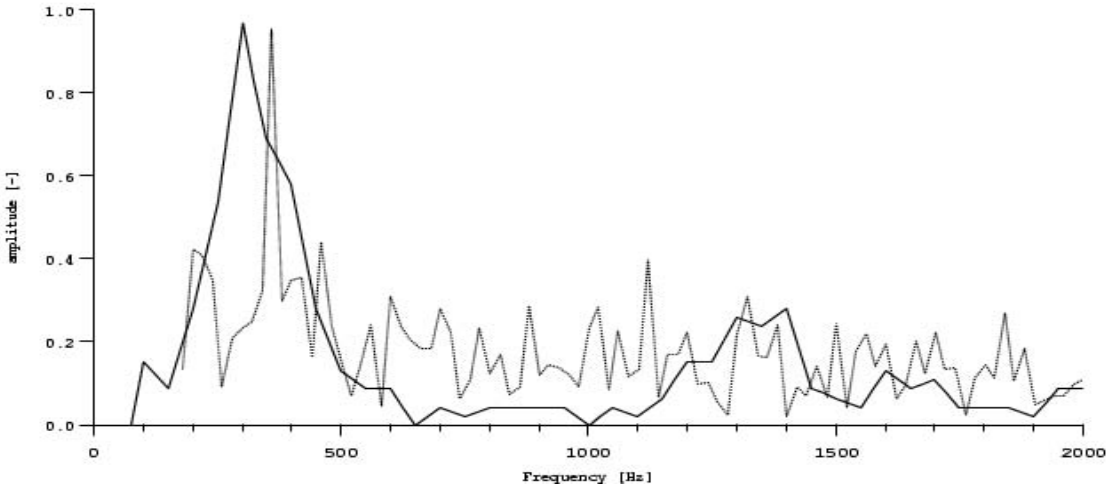


FIG. 3.53 – *Spectre de pression expérimentale (—) et LES (···) dans le plénum*

de 1300 – 1400 Hz qui fait penser au mode f_3 d'AVSP.

Afin de confirmer les conclusions faites sur les spectres, la Fig. 3.54 présente les amplitudes de pression prédites par AVSP et par la LES. Il s'agit d'une vue en projection sur l'axe des abscisses, comme à la section 3.3.3.

Pour la LES les symboles représentent la valeur RMS de la pression locale.

Pour AVSP il s'agit de l'amplitude du mode $f_2 = 362$ Hz.

Il faut noter deux points importants:

- il n'y a pas de notion de modes propres dans la LES: le signal $p^{'}$ regroupe l'amplitude de toutes les fluctuations, qu'elles soient d'origine acoustique ou hydrodynamique,
- les résultats du calcul AVSP est adimensionné: il a donc été multiplié par une pression de référence pour pouvoir être comparé à la LES.

La Fig. 3.54 met clairement en évidence le fait que presque partout dans l'installation, c'est le mode acoustique $f_2 = 362$ Hz qui domine, avec une amplitude maximale d'environ 50 Pa soit 64 dB en entrée. Les codes LES et acoustiques sont en très bon accord sur ce point.

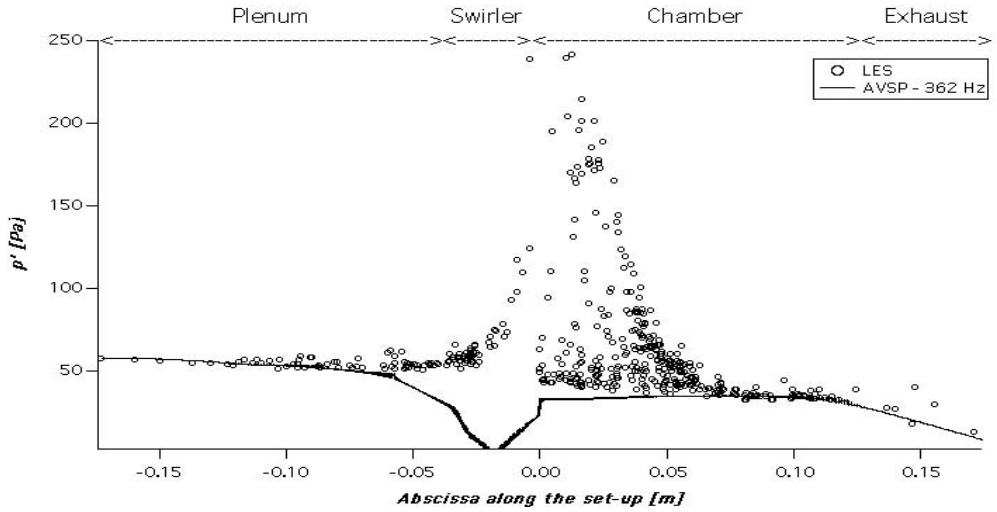


FIG. 3.54 – *Projection sur l'axe des abscisses des amplitudes des variations de pression prédites par* AVSP *(—) et la LES (○ ○ ○)*

Les deux codes présentent cependant des résultats différents au niveau de l'injecteur et dans la première moitié de la chambre. En effet, la LES présente un surplus de perturbation de pression par rapport au code acoustique: il s'agit des fluctuations de pression dûes au PVC. L'amplitude de ces fluctuations (250 Pa environ) est très supérieure à celle du mode acoustique. Ces perturbations restent cependant très localisées en sortie d'injecteur et n'atteignent quasiment pas les parois de la chambre: c'est la raison pour laquelle elles sont indécelables "à l'oreille".

3.4 Le cas réactif

La section précédente a décrit l'application du nouveau code AVBP 5 à la chambre PRECCINSTA sans combustion. Cette derniere partie présente l'ensemble des calculs effectués sur la configuration PRECCINSTA avec combustion au cours de la thèse. Une part importante du travail a là encore été effectuée avec le code AVSP afin d'analyser le comportement acoustique de la configuration réactive.

L'ensemble des résultats numériques (LES avec AVBP et acoustique avec AVSP) est comparé avec les résultats expérimentaux du DLR en termes de champs moyens de vitesses axiales, radiales et tangentielles. Pour chaque champ de vitesse, on compare les champs moyens ainsi que les valeurs RMS. Ensuite, on s'intéresse aux champs instationnaires, caractérisés par des mesures par microphone et fil chaud au DLR. Ces mesures sont comparées avec les résultats de AVBP et AVSP.

Le texte qui suit présente la totalité de ces résultats. Il est extrait d'un article soumis à Combustion and Flame en 2004 et intitulé:
"Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and Large Eddy Simulations"
G. Lartigue, S. Roux, T. Poinsot, U. Meier et C. Bérat.

3.4.1 Description de la configuration

Le cas réactif choisi pour cette thèse correspond à une richesse $\phi = 0.75$ et est stable expérimentalement. Les conditions expérimentales sont identiques à celles du cas non-réactif: 101300 Pa et 300 K. Les débits utilisés expérimentalement pour l'air et le méthane sont respectivement $\dot{m}_{\text{air}} = 12.2$ g/s et $\dot{m}_{\text{CH}_4} = 0.54$ g/s. La puissance thermique du brûleur pour ces débits est $P_{\text{th}} = 27$ kW.

Il est nécesaire de rappeler qu'une hypothèse majeure a été faite pour mener à bien les calculs LES: le mélange entre l'air et le méthane est supposé homogène en sortie d'injecteur. Dans le montage expérimental, l'air et le méthane sont cependant injectés séparément: l'air est amené dans le tourbilloneur via le plénum, tandis que le méthane est injecté par des orifices pratiqués dans chacune des douzes fentes de l'injecteur. L'objectif de cette hypothèse est de ne pas calculer le mélange entre l'air et le méthane dans l'injecteur. En effet, grâce à elle, les injections de méthane ne sont plus prises en compte dans la LES et un mélange homogène de richesse $\phi = 0.75$ est introduit directement dans le plénum. Dans la réalité, le mélange entre l'air et le méthane s'effectue sur une distance de l'ordre de 3 cm avant d'entrer dans la chambre de combustion: il est donc clair que même si le taux de mélange de l'injecteur est très bon, il existera des hétérogénéités de richesse quand le mélange entrera dans la chambre. Cette hypothèse est donc très simplificatrice mais c'est le seul moyen d'effectuer le calcul sans avoir à mailler les injections de méthane. Il faut donc être très prudent sur la pertinence des résultats obtenus, notamment en terme de stabilité de l'écoulement. En effet, les ondes acoustiques présentes dans la chambre peuvent remonter jusque dans le tourbilloneur, modifier l'injection de méthane et finalement affecter la flamme. Il se crée alors un couplage nouveau par rapport au cas parfaitement prémélangé qui peut modifier le comportement des instabilités.

Comme dans le cas non-réactif, l'utilisation d'une entrée non-réflechissante ne permet pas d'imposer le débit exact à chaque instant. Le débit moyen utilisé dans la LES est cependant très proche du débit expérimental:
$\dot{m}_{\text{tot}}^{\text{LES}} = 12.71$ g/s alors que $\dot{m}_{\text{tot}}^{\text{Exp}} = 12.76$ g/s.

Dans un calcul LES réactif, la chimie laminaire doit être modélisée afin de fournir les taux de production de chaque espèce. Pour le méthane, il existe des mécanismes réactionnels détaillés comme par exemple le schéma GRI 3.0 qui contient 325 mécanismes et 53 espèces. Ce genre de schéma est cependant beaucoup trop coûteux en temps de calcul pour pouvoir être utilisé en LES et il faut donc le remplacer par un schéma réduit. Le problème est que la réduction d'un tel schéma ne peut se faire sans dégrader la qualité des résultats.

Dans notre cas, il y a deux propriétés essentielles à conserver: la température de fin de combustion et la vitesse de flamme. Pour cette simulation, c'est un schéma à 2 étapes et 6 espèces qui a été retenu:

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O \tag{3.12}$$

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons CO_2 \tag{3.13}$$

La première réaction est irréversible et exprime l'oxydation du méthane. L'espèce carbonnée produite par cette réaction est le monoxyde de carbone CO. La deuxième réaction est réversible et traduit l'oxydation du CO en CO_2. Cette réaction est endothermique dans le sens inverse et permet donc d'abaisser la température de fin de combustion par rapport à l'utilisation de la réaction unique:

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 \tag{3.14}$$

En effet ce mécanisme (qui traduit juste le bilan global) ne prédit pas correctement la température de fin de combustion pour les richesses proches de la stœchiométrie car il ne tient pas compte des processus de dissociations qui peuvent apparaitre pour des températures élevées (supérieures à 2000 K). Ce schéma est plus largement décrit dans [Selle, 2002] (cf. annexe).

La Fig. 3.4.1 présente la température adiabatique de fin de combustion ainsi que la vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse pour le schéma GRI 3.0 et pour le schéma réduit. On constate que le mécanisme réduit à deux étapes est très efficace pour des richesses comprises entre 0.6 à 1.2: il permet de retrouver la température finale, la vitesse de flamme ainsi que l'épaisseur de flamme avec une grande précision. L'accord entre le schéma réduit et le schéma complet est excellent pour la richesse qui nous intéresse ($\phi = 0.75$). Pour cette richesse, la vitesse de flamme laminaire est $s_L^1 \approx 24$ cm/s, la température de fin de combustion vaut $T^{ad} \approx 1920$ K et l'épaisseur thermique du front de flamme est $\delta_L^1 \approx 0.5$ mm.

En ce qui concerne l'épaississement, la valeur utilisée pour les calculs de cette thèse est $F = 17$. Les cellules du maillage ayant une taille caractéristique de l'ordre de 1 à 2 mm dans

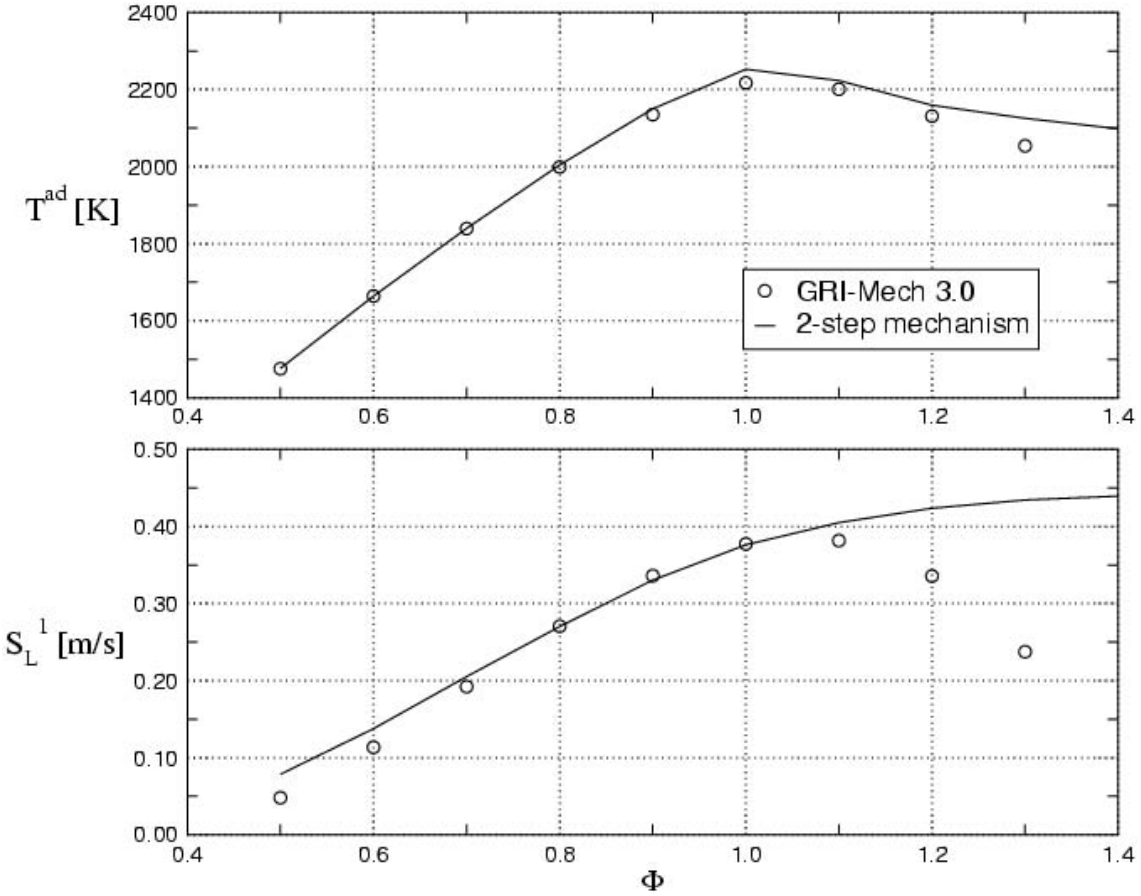


FIG. 3.55 – *Température adiabatique de fin de combustion et vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse pour le mécansime GRI 3.0 et le mécanisme réduit utilisé dans nos calculs*

la zone de flamme, cette valeur permet de résoudre correctement le front de flamme sur le maillage LES (avec une dizaine de points dans la flamme). Utiliser une valeur plus faible crée des problémes numériques, mais une valeur trop élevée modifie beacoup l'interaction de la flamme avec la géométrie (problème de confinement).

L'allumage du calcul réactif se fait à partir du calcul non-réactif, en conservant le champ de vitesse et le champ de pression. Ensuite, la composition ainsi que les propriétés thermodynamiques du mélange sont modifiées pour permettre l'allumage de l'écoulement. Pour cela, la configuration est séparée en deux parties:

- la partie située en amont de la chambre (flexible, plenum et injecteur) est remplie avec des gaz frais (à $T = 300$ K et composés d'un mélange air/méthane de richesse 0.75),
- et la partie avale (chambre, convergent et atmosphère) est remplie de gaz brûlés. La température et la composition de ces gaz brûlés sont calculées à partir d'une flamme air/méthane à 300 K et $\phi = 0.75$.

La densité est également modifiée pour que l'équation d'état soit vérifiée. Le passage des gaz frais au gaz brûlés se fait sur une distance de l'ordre de 5 mm: cette longueur est approximativement l'ordre de grandeur de l'épaisseur thermique de la flamme dans notre calcul. Cette méthode revient donc à créer artificiellement une "flamme" située en sortie de l'injecteur. La solution générée n'est évidemment pas physique car les profils à travers le front ne sont pas ceux d'une flamme réelle et en outre l'équation de continuité n'est pas vérifiée au passage de ce front. Les perturbations non-physiques générées par cette initialisation sont évacuées au cours d'un régime transitoire dont la durée est de l'ordre d'un temps convectif.

Pour en finir avec cette description succinte, la Fig. 3.56 présente un vue d'une isosurface instantanée de température qui révèle une flamme très compacte située à proximité du nez de l'injecteur.

3.4.2 Profils moyens

Les profils de température moyenne et RMS sont représentés Fig. 3.57. Comme le laissait deviné la Fig. 3.56, la combustion est quasiment terminée à $x = 35$ mm et on ne retrouve plus de gaz frais au delà de cette section (en moyenne). Les fluctuations de température sont assez élevées à proximité du nez de l'injecteur (300 K), ce qui indique une forte intermitence et une agitation intense de la flamme dans cette zone. Aucune comparaison avec l'expérience n'est possible ici car la température n'a pas encore été mesurée au DLR.

Les champs de vitesse ont cependant été mesuré et sont représentés aux Fig. 3.58 (vitesse axiale moyenne), 3.59 (vitesse axiale RMS), 3.60 (vitesse tangentielle moyenne), 3.61 (vitesse tangentielle RMS), 3.62 (vitesse radiale moyenne), 3.63 (vitesse radiale RMS). L'accord global entre les résultats de la LES et de l'expérience est très bon. La LES restitue à la fois les valeurs moyennes et les fluctuations précisément, excepté dans la zone juste en aval du nez de l'injecteur Ce manque de precision peut être attribué à une insuffisance du maillage dans cette région mais un autre phénomène plus fondamental, liée aux techniques de moyennage dans les écoulements à densité variable, est plus probablement responsable de ces différences: les moyennes LES ont été obtenues par une moyenne de Favre tandis que les résultats expérimentaux proviennent de mesures LDV, dans lesquelles il est difficile de déterminer si le processus de moyenne est de type Favre ou Reynolds [Chen, 1991][Poinsot,2001,edw]. La plupart des zones où LES et expériences divergent dans la Fig. 3.59 ou 3.61 sont des régions où les fluctuations de température (Fig. 3.57) sont importantes, i.e. des zones avec une forte intermitence. Dans ces zones, moyennes de Reynolds et de Favre peuvent être très différentes [Poinsot, 2001,edw] et cela peut être une explication aux erreurs relevées. Pour confirmer cet argument, les régions présentant de faibles fluctuations de température et donc de densité (par exemple après $x = 35$ mm), les données expérimentales et LES sont beaucoup plus proches. Evidemment, ces résultats suggèrent qu'une étude plus approfondie serait nécessaire pour éclaircir ce point: cette question n'a pas été traitée ici.

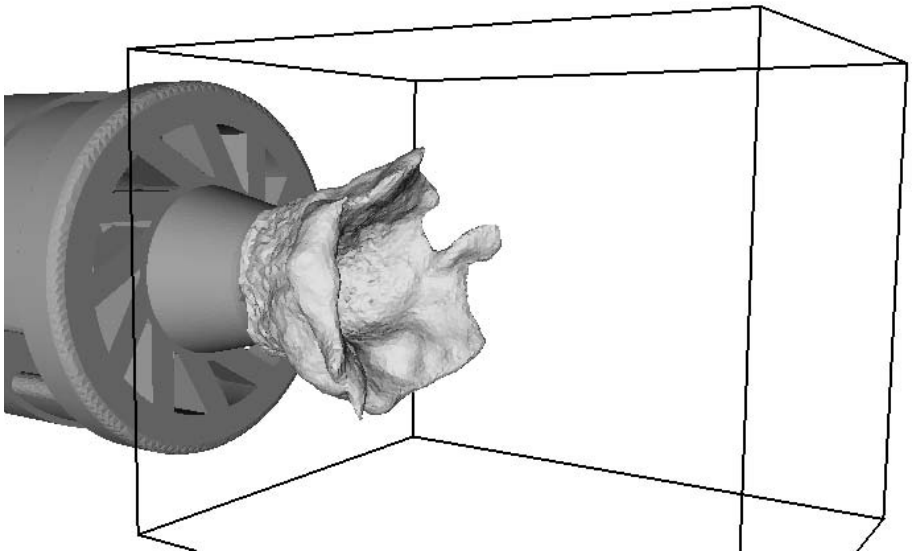


FIG. 3.56 – *Isosurface instantanée de température à* 1250 *K (résultat LES).*

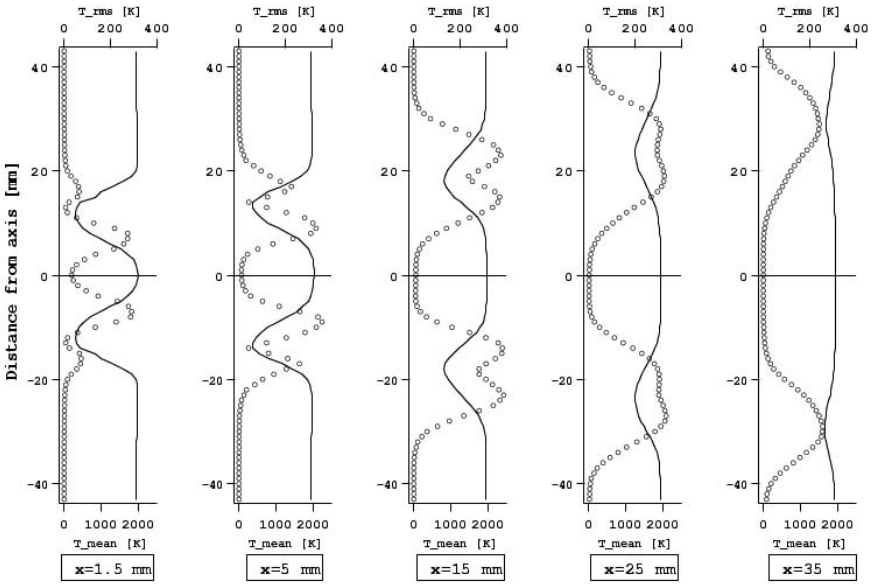


FIG. 3.57 – *Température moyenne (trait plein) et RMS (cercles) dans le plan central de la chambre de combustion (résultat LES).*

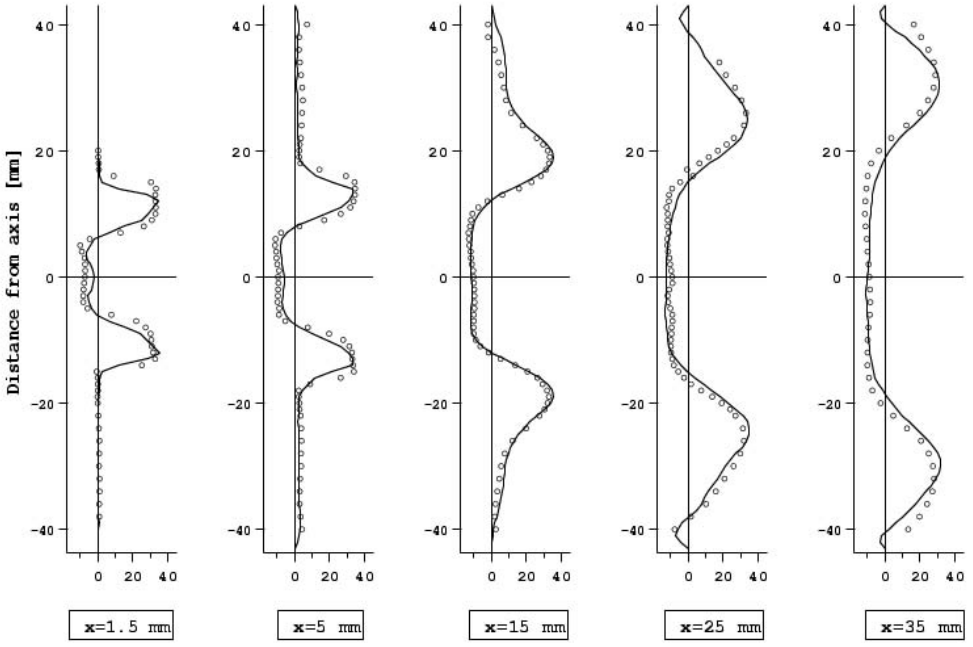


FIG. 3.58 – *Vitesse axiale moyenne dans le plan central.* ∘ *LDV;* —— *LES.*

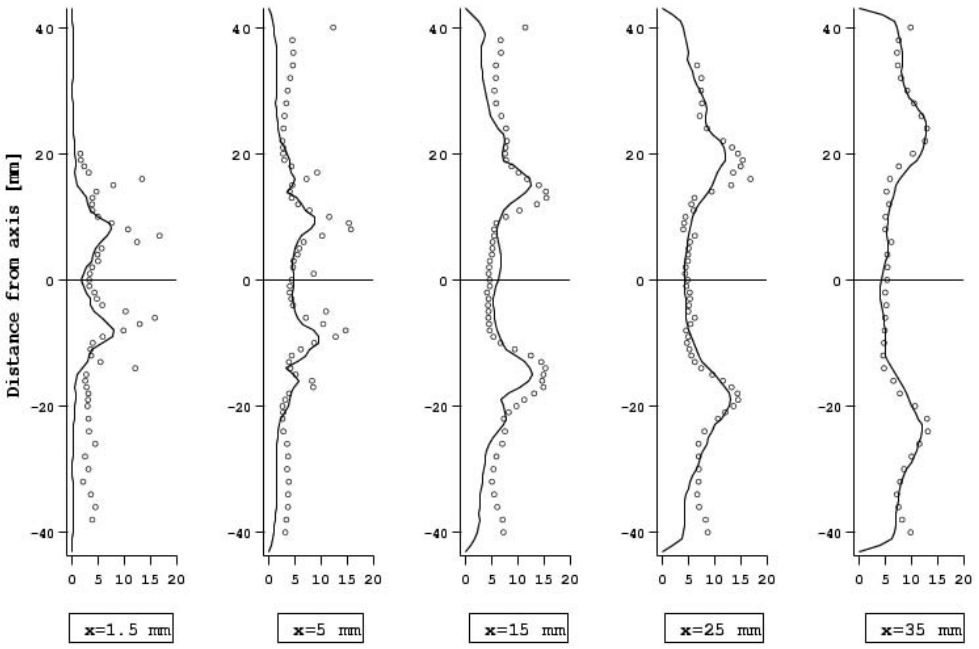


FIG. 3.59 – *Vitesse axiale RMS dans le plan central.* ∘ *LDV;* —— *LES.*

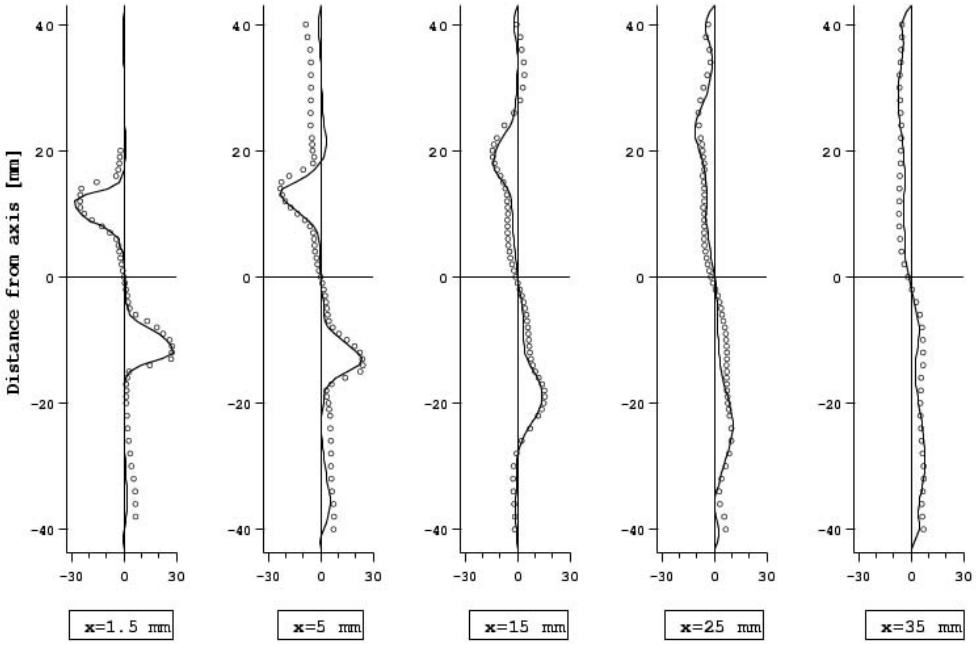


FIG. 3.60 – *Vitesse tangentielle moyenne dans le plan central.* ∘ *LDV;* —— *LES.*

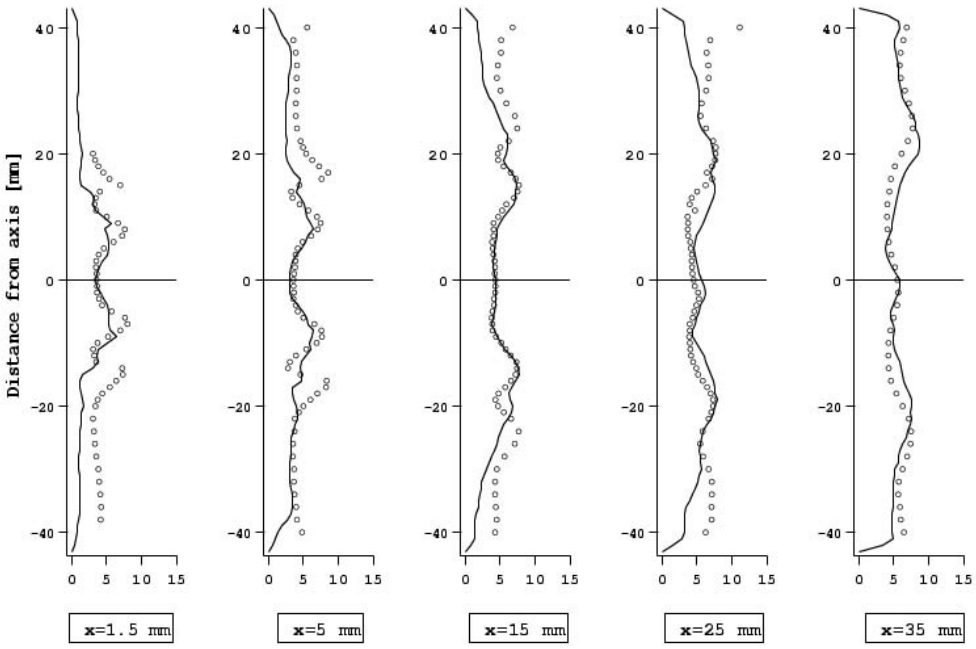


FIG. 3.61 – *Vitesse tangentielle RMS dans le plan central.* ∘ *LDV;* —— *LES.*

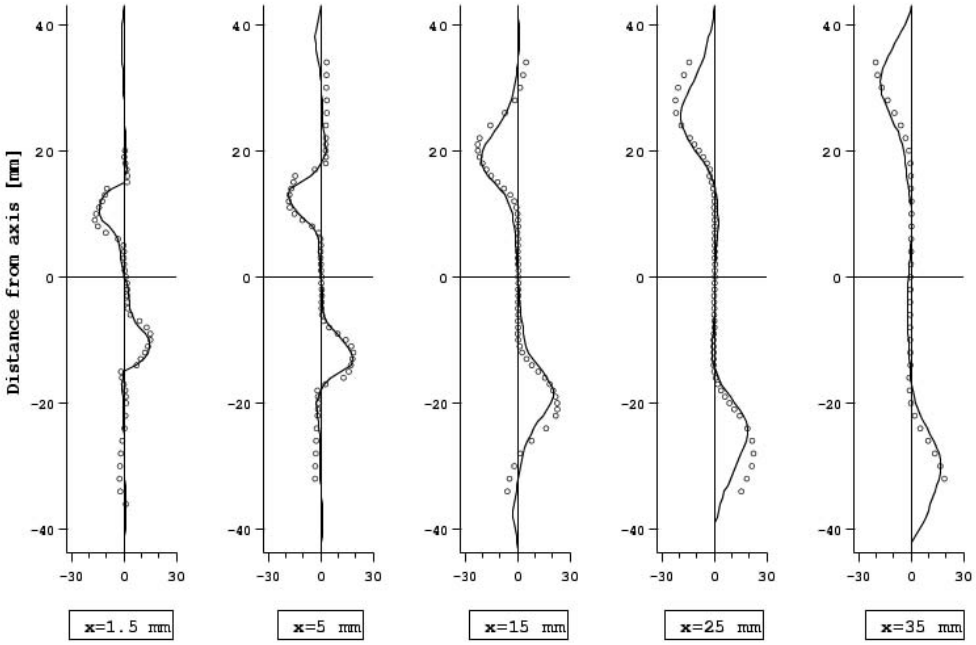


FIG. 3.62 – *Vitesse radiale moyenne dans le plan central.* ∘ *LDV;* —— *LES.*

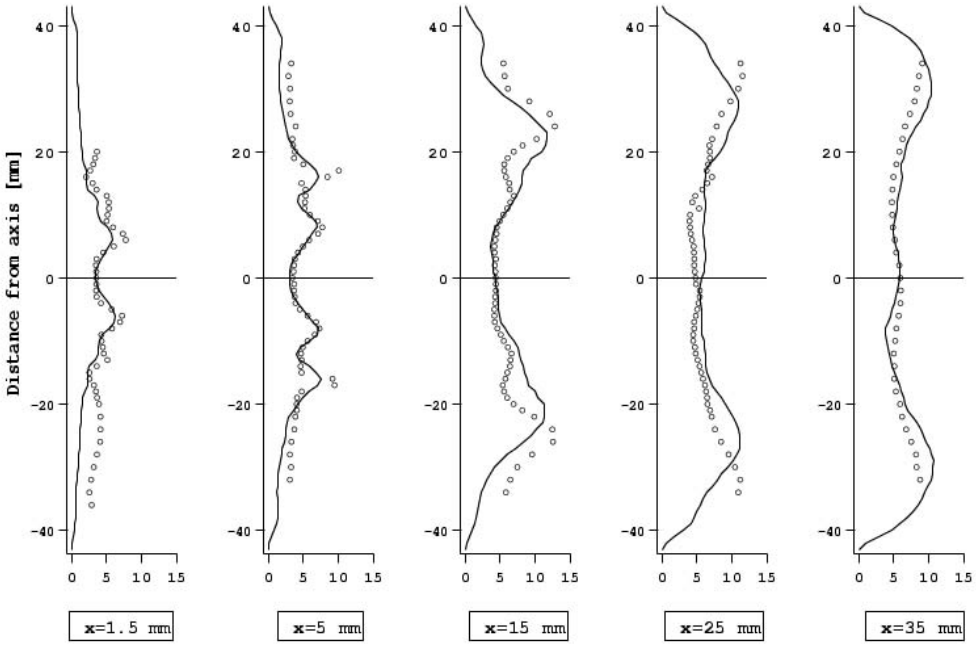


FIG. 3.63 – *Vitesse radiale RMS dans le plan central.* ∘ *LDV;* —— *LES.*

3.4.3 Analyse instationnaire et acoustique

La conséquence majeure de la combustion est de faire disparaitre le PVC que l'on avait observé dans l'écoulement non-réactif (section 3.3). Bien que ce mécanisme ne puisse être considéré comme commun à toutes les chambres de combustion à écoulement swirlés, il a déja été observé dans d'autres cas [Selle, 2004]. En effet, avec la combustion, la dilatation et l'augmentation de la viscosité dans les gaz brulés semble amortir le PVC: sa trace sur la pression instantannée disparait et est remplacée par celle de modes acoustiques.

Pour cet écoulement réactif particulier, deux résonances apparaissent expérimentalement aux environs de 300 Hz et 570 Hz. Pour identifier la nature de ces modes, le solver de Helmoltz AVSP a été utilisé avec le champ de température moyenne de la LES pour obtenir la liste des modes propres acoustiques de la configuration avec combustion. Les trois premiers modes obtenus sont présentés dans les Fig. 3.64 à 3.66.
La table 3.3 confirme que les deux fréquences observées expérimentalement sont les deux premiers modes (1/4 d'onde et 3/4 d'onde) de la chambre.

Mode		Non-réactif (Hz)			Réactif (Hz)		
numéro	nom	Helm	Exp	LES	Helm	Exp	LES
(1)	1/4 d'onde	172	amorti	amorti	265	300	290
(2)	3/4 d'onde	363	340	360	588	570	500
(3)	5/4 d'onde	1409	amorti	amorti	1440	amorti	amorti

TAB. 3.3 – *Fréquences des modes longitudinaux prédits par le solver de Helmoltz (Helm), mesurés expérimentalement (Exp) et dans la LES (LES).*

L'accord entre les mesures et le solveur de Helmoltz est très bon: environ 10% pour le mode 1/4 d'onde et moins de 2% pour le mode 3/4 d'onde. Le mode le plus 'actif' est toujours le mode 3/4 d'onde, déja observé dans l'écoulement non-réactif (Section 3.3): sa fréquence est décalée de 360 Hz (en non-réactif) à 570 Hz (en réactif). Dans la LES, pour

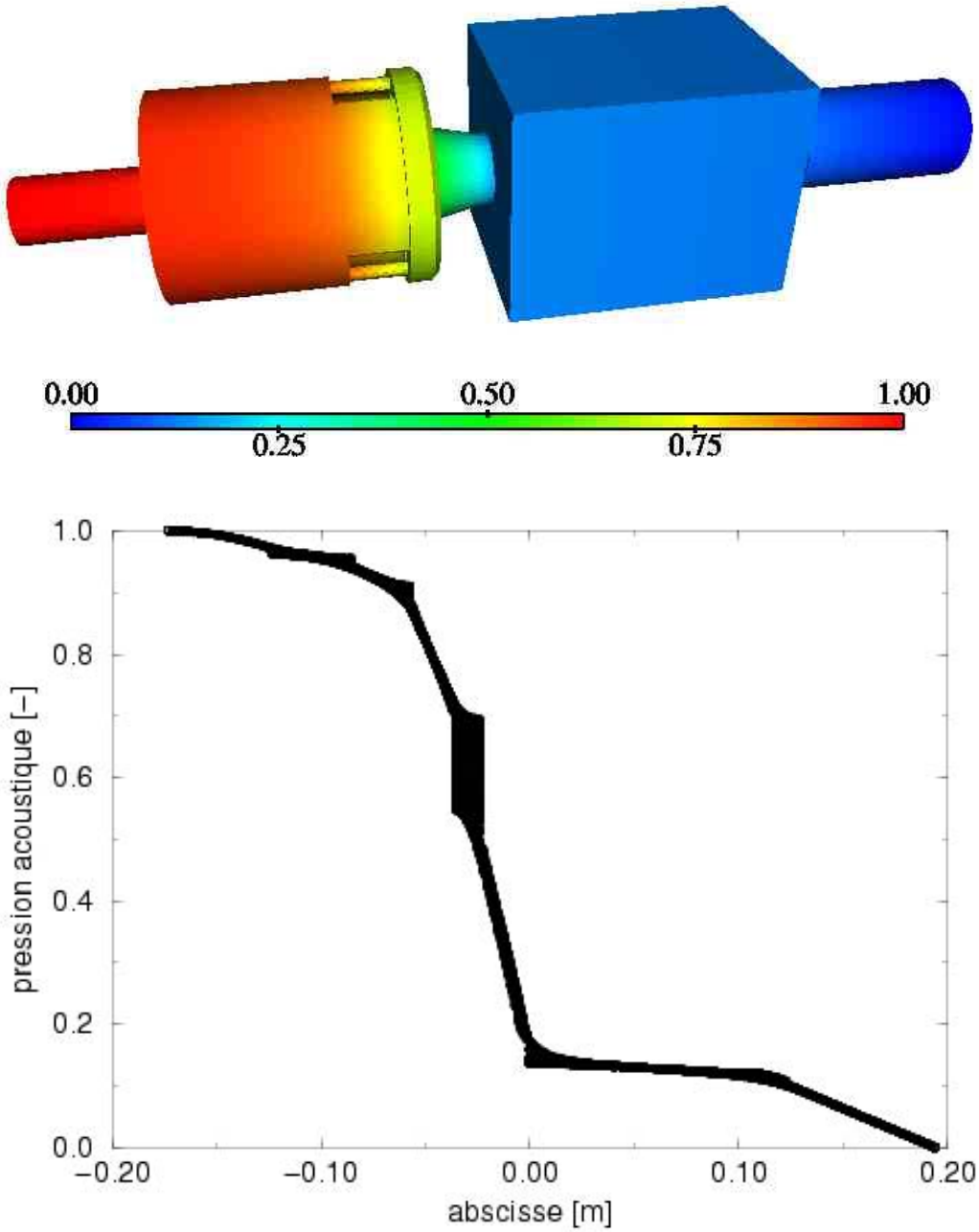


FIG. 3.64 – *Pression acoustique du mode n°1 (265 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

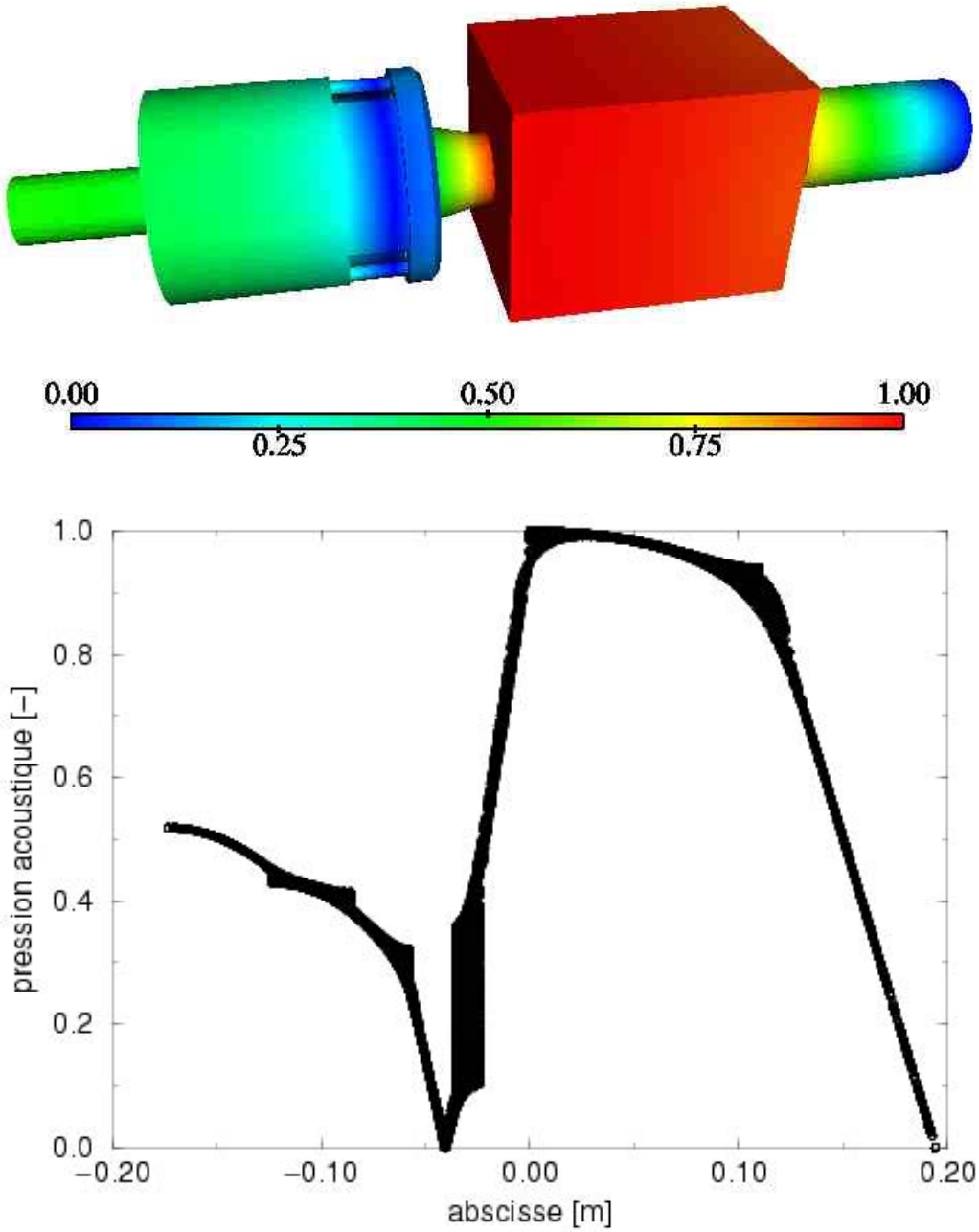


FIG. 3.65 – *Pression acoustique du mode n°2 (588 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

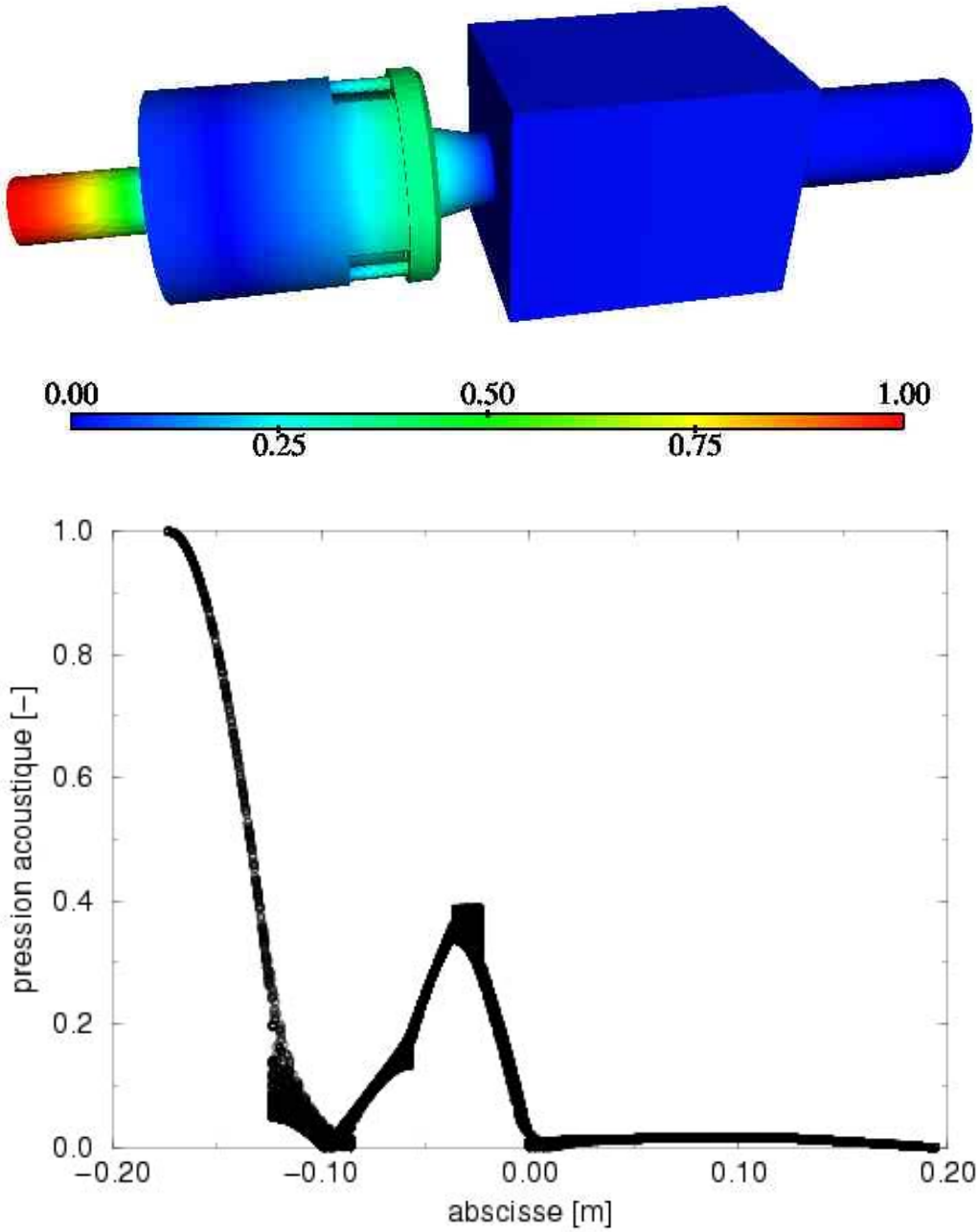


FIG. 3.66 – *Pression acoustique du mode n°3 (1440 Hz): vue complète (en haut) et projection sur l'axe des abscisses (en bas)*

le régime considéré, une seule fréquence est observée dans la chambre 500 Hz. Ce mode est identifié comme étant le mode 3/4 d'onde de la configuration. La différence entre la fréquence mesurée dans la LES (500 Hz) et l'expérience (570 Hz) ou le code Helmoltz (588 Hz) est probablement due aux définitions des conditions aux limites. Il n'y a cependant pas de doutes que ces trois résultats correspondent aux même mode: cela peut être vérifié en représentant le champ RMS de pression obtenu par la LES le long de l'axe de la chambre et la structure du mode prédit par AVSP pour le mode 3/4 d'onde sur la même figure (Fig. 3.67).

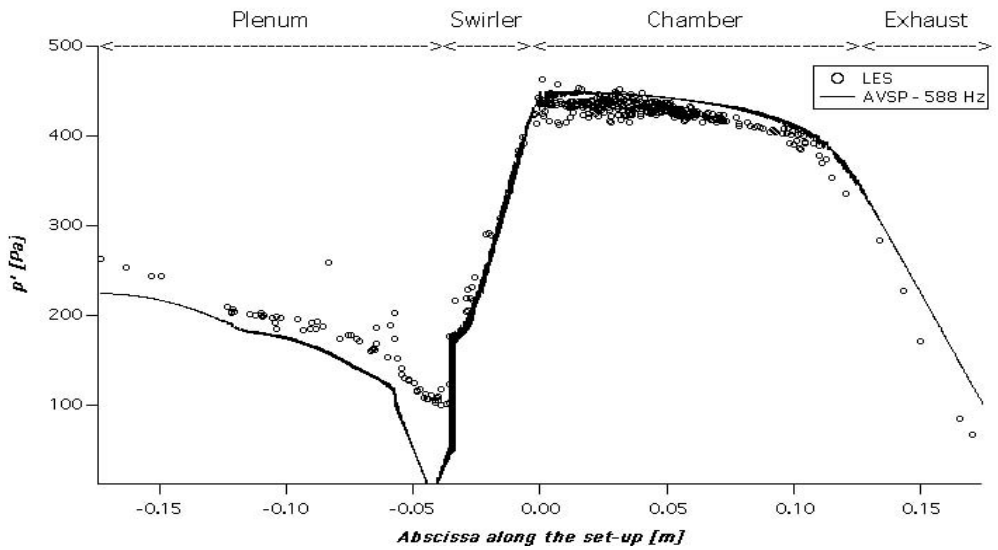


FIG. 3.67 – *Amplitude des fluctuations de pression prédites par la LES (cercles) et par le solveur de Helmoltz (trait plein) pour l'écoulement réactif.*

Bien que le signal obtenu par la LES contienne la trace de tous les modes (et pas seulement le mode 3/4 d'onde), sa structure correpond précisément à celle du mode 3/4 d'onde prédit par le solveur de Helmoltz. Contrairement au champ de pression RMS obtenu pour le cas non-réactif (Fig. 3.54), l'accord entre LES et solveur de Helmoltz est bon partout, même dans la chambre de combustion, ce qui prouve que tout l'écoulement est calé sur le mode 3/4 d'onde.

Conclusion

Plusieurs avancées importantes dans le domaine de la LES des écoulements réactifs ont été réalisées au cours de cette thèse:

- Un code de LES essentiellement dédié à l'aérodynamique externe (AVBP 4) a été reformulé (AVBP 5) pour prendre en compte l'influence des propriétés thermochimiques du mélange sur l'écoulement. Cette étape à notamment été l'occasion de mettre en avant les points durs de cette modélisation: choix du jeu d'équation à utiliser (variables primitives, filtrage LES, modèle de combustion, ...), réécriture des schémas numériques, des conditions aux limites et des calculs thermochimiques. Des solutions ont été apportées à chacun de ces problèmes et le nouveau code AVBP 5 est aujourd'hui totalement satisfaisant. A l'heure actuel, ce code est utilisé par une vingtaine de personne (CERFACS, IFP, EM2C, ...).
- Ces nombreux développements ont étés validés sur une géométrie complexe correspondant à une configuration réelle (le brûleur PRECCINSTA montée expérimentalement au DLR Stuttgart en Allemagne). Des comparaisons ont donc pu être menées, à la fois sur des écoulements réactifs et des écoulements non réactifs. Dans chacun de ces deux cas, la comparaison entre la LES et les expériences est excellente.
- Pour tous ces calculs, une méthodologie innovante a été mise en place: les conditions aux limites du domaine de calcul ont été repoussées le plus loin possible de la zone d'activité principale de l'écoulement afin de reproduire au mieux les conditions acoustiques réelles.

– Enfin, l'analyse des résultats expérimentaux et du calcul ont été éclairés par l'utilisation d'un code de calcul purement acoustique basé sur les équations de Helmoltz tridimensionnelles et qui permet de prédire les modes propres du système sur la même configuration que le calcul LES.

En conclusion, cette étude démontre que la LES compressible réactive a atteint aujourd'hui un niveau de maturité suffisant pour l'étude quantitative des phénomènes instationnaires présents dans une configuration réelle comme le foyer PRECCINSTA.

Cette progression très rapide des capacités de la LES est due en partie à la croissance des moyens de calcul, à l'amélioration des schémas numériques, des conditions aux limites, des modèles de combustion, des capacités de maillage et de visualisation sur des géométries complexes et enfin de l'existence de résultats expérimentaux détaillés et de qualité.

Pour terminer, signalons que les travaux effectués au cours de cette thèse ont fait l'objet de plusieurs publications qui sont reportées en annexes.

Bibliographie

1 - Rayleigh, L., The explanation of certain acoustic phenomena," *Royal Institution Proceedings* VIII : 536-542 (1878).

2 - Putnam, A. A., *Combustion driven oscillations in industry.* American Elsevier, 1971.

3 - Williams, F. A., *Combustion theory.* Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

4 - Kolmogorov, A. N., The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers," *C.R. Acad. Sci. USSR* 30 : 301 (1941).

5 - Hinze, J. O., *Turbulence.* McGraw-Hill, New-York, 1975.

6 - Lesieur, M., *Turbulence in fluids.* Kluwer Academic Publishers, 1990.

7 - Piquet, J., *Turbulent flows, models and physics.* Springer-Verlag, 1999.

8 - Piomelli, U. and Chasnov, J. R., in *Turbulence and Transition Modelling* H. HallbŁck, D. S. Henningson, A. V. Johansson and P. H. Alfredsson, Kluwer Academic Publishers, 1996, p. 269 - 336.

9 - Sagaut, P., *Large Eddy Simulation for incompressible flows.* Springer-Verlag, 2000.

10 - Ferziger, J., in *New tools in turbulence modelling* O. MŐtais and J. Ferziger, Les Editions de Physique - Springer Verlag, 1997, p. 29 - 47.

11 - Poinsot, T. and Veynante, D., *Theoretical and numerical combustion.* R.T. Edwards, 2001.

12 - Sarkar, S., Erlebacher, G., Hussaini, M. Y. and Kreiss, H. O., The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence," *Journal of Fluid Mechanics* 227 : 473-491 (1991).

13 - Pierce, C. D. and Moin, P., A dynamic model for subgrid scale variance and dissipation rate of a conserved scalar," *Phys. Fluids* 10 : 3041-3044 (1998).

14 - Mahesh, K., Constantinescu, G., Apte, S., Iaccarino, G., Ham, F. and Moin, P., in *Annual Research Briefs* Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002, p. 115-142.

15 - Pitsch, H. and Duchamp de la Geneste, L., Large Eddy Simulation of Premixed Turbulent Combustion using a level-set approach," *Proc of the Comb. Institute* 29 : 2001-2008 (2002).

16 - Menon, S., McMurthy, P. A. and Kerstein, A. R., in *Large eddy simulation of complex engineering and geophysical flows* B. Galperin and S. A. Orzag, Cambridge University Press, 1993, p. 87 - 314.

17 - Forkel, H. and Janicka, J., Large-Eddy Simulation of a Turbulent Hydrogen Diffusion Flame," *Flow Turb. and Combustion* 65 : 163-175 (2000).

18 - Colin, O., Ducros, F., Veynante, D. and Poinsot, T., A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion, Report No. HEP/123-qed, CERFACS, 1999.

19 - Selle, L., Lartigue, G., Poinsot, T., Kaufman, P., Krebs, W. and Veynante, D., in *Proc. of the Summer Program* Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002, p. 333-345.

20 - Lartigue, G., Moureau, V., Sommerer, Y., Angelberger, C., Colin, O. and Poinsot, T., High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids," *J. Comput. Phys.* : submitted (2003).

21 - Colin, O. and Rudgyard, M., Taylor-Galerkin Schemes in AVBP, Report No. 98/56, CERFACS, 1998.

22 - Schönfeld, T. and Rudgyard, M., Steady and Unsteady Flows Simulations Using the Hybrid Flow Solver AVBP," *AIAA Journal* 37 : 1378-1385 (1999).

23 - Nicoud, F. and Ducros, F., Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient," *Flow Turb. and Combustion* 62 : 183-200 (1999).

24 - Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Byrd, R. B., *Molecular theory of gases and liquids.* John Wiley & Sons, New York, 1969.

25 - Poinsot, T. and Lele, S., Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows," *J. Comput. Phys.* 101 : 104-129 (1992).

26 - Baum, M., Poinsot, T. J. and Thévenin, D., Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows," *J. Comput. Phys.* 116 : 247-261 (1994).

27 - Okong'o, N. and Bellan, J., Consistent boundary conditions for multicompoment real gas mixtures based on characteristic waves," *J. Comput. Phys.* 176 : 330-344 (2002).

28 - Kuo, K. K., *Principles of Combustion.* John Wiley, New York, 1986.

29 - Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lighfoot, E. N., *Transport phenomena.* John Wiley, New York, 1960.

30 - Giovangigli, V., *Multicomponent Flow Modeling.* Birkhäuser, Boston, 1999.

31 - Deardorff, J., A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers," *J. Fluid Mech.* 41 : 453-480 (1970).

32 - Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. and Cabot, W. H., A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model," *Phys. Fluids A* 3 : 1760 - 1765 (1991).

33 - Sagaut, P., *Introduction a la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible.* Mathématiques et Applications, Springer Verlag, 1998.

34 - Kim, J., Moin, P. and Moser, R., Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number," *J. Fluid Mech.* 177 : 133–166 (1987).

35 - Moin, P. and Kim, J., Numerical investigation of turbulent channel flow," *J. Fluid Mech.* 118 : 341-377 (1982).

36 - Hunt, J. C. R. and Graham, J. M. R., Free-stream turbulence near plane boundaries," *J. Fluid Mech.* 84 : 209-235 (1978).

37 - Colin, O., Ducros, F., Veynante, D. and Poinsot, T., A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion," *Phys. Fluids* 12 : 1843-1863 (2000).

38 - O'Rourke, P. J. and Bracco, F. V., Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames," *J. Computational Phys.* 33 : 185-203 (1979).

39 - Charlette, F., Veynante, D. and Meneveau, C., A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part II - dynamic formulation," *Combust. Flame* 131 : 181-197 (2002).

40 - Charlette, F., Veynante, D. and Meneveau, C., A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests," *Combust. Flame* 131 : 159-180. (2002).

41 - Vervisch, L. and Veynante, D., *28th Symp. (Int.) on Combustion,* p. in press, The Combustion Institute, Pittsburgh, (2000).

42 - Duchamp de Lageneste, L. and Pitsch, H., in *Annual research briefs* Center for Turbulence Research, Stanford Univ./NASA-Ames, 2001, p. 61-82.

43 - Colin, O. and Rudgyard, M., Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations," *J. Comput. Phys.* 162 : 338-371 (2000).

44 - Schönfeld, T. and Rudgyard, M., *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit,* p. AIAA, (1994).

45 - Rudgyard, M., Schönfeld, T., Struijs, R., Audemar, G. and Leyland, P., *ECCOMAS 2nd European Computational Fluid Dynamics Conference,* p. (1994).

46 - Roache, P. J., *Computational fluid dynamics.* Hermosa Publishers, Albuquerque, 1972.

47 - Thompson, K. W., Time dependent boudary conditions for hyperbolic systems," *J. Comput. Phys.* 68 : 1-24 (1987).

48 - Giles, M., Non-reflecting boundary conditions for Euler equation calculations," *AIAA Journal* 28 : 2050-2058 (1990).

49 - Strikwerda, J. C., Initial boundary value problem for incompletely parabolic systems," *Commun. Pure Appl. Math.* 30 : 797 (1977).

50 - Hirsch, C., *Numerical Computation of internal and external flows.* John Wiley, New York, 1988.

51 - Lucca-Negro, O. and O'Doherty, T., Vortex breakdown : a review," *Prog. Energy Comb. Sci.* 27 : 431-481 (2001).

52 - Chen, C., Riley, J. J. and McMurtry, P., *Combust. Flame* 87 : 257-277 (1991).

53 - Selle, L., Nicoud, F. and Poinsot, T., *in press AIAA Journal* : (2004).

Liste des articles publiés et soumis

- **"Large Eddy Simulations to understand combustion instabilities in gas turbines"**
  T. Poinsot, J. Schlüter, G. Lartigue, L. Selle, W. Krebs and S. Hoffman
  Proceedings of IUTAM Symposium on Turbulent Mixing and Combustion (2001) 405-413

- **"Large Eddy Simulation of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry"**
  L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, P. Kaufman, W. Krebs and D. Veynante
  Proceedings of CTR Summer Program (2002) 333-344

- **"Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes"**
  L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, P. Kaufman and D. Veynante
  Combustion and Flame 137 (2004) 489-505

- **"Recent methods for numerical simulation of turbulent combustion in gas turbines"**
  L. Selle, G. Lartigue, L. Benoit and T. Poinsot
  Von Karmann Institute Lecture Series 2004-03 (2004) 3-46

- **"Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids"**

V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin and T. Poinsot
Journal of Computational Physics Volume 202-2 (2004) 710-736

– **"Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and Large Eddy Simulations"**
S. Roux, G. Lartigue, T. Poinsot, U. Meier and C. Bérat
soumis à Combustion and Flame

Article 1

"Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes"

L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, P. Kaufman and D. Veynante

parut dans Combustion and Flame 137 (2004) 489-505

Available online at www.sciencedirect.com
SCIENCE DIRECT®
Combustion and Flame 137 (2004) 489–505
Combustion and Flame
www.elsevier.com/locate/jnlabr/cnf

Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes

L. Selle,[a,*] G. Lartigue,[a] T. Poinsot,[b] R. Koch,[c] K.-U. Schildmacher,[c] W. Krebs,[d] B. Prade,[d] P. Kaufmann,[d] and D. Veynante [e]

[a] *CERFACS, CFD team, 42 Av. G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France*
[b] *IMF Toulouse, UMR CNRS/INP-UPS 5502, Allée du Pr. C. Soula, 31400 Toulouse Cedex, France*
[c] *Institute of Thermal Turbomachinery, University of Karlsruhe, Kaiserstrasse 12, 76128 Karlsruhe, Germany*
[d] *Siemens PG, Muelheim, Germany*
[e] *Laboratoire EM2C, Ecole Centrale de Paris and CNRS, 92295 Châtenay Malabry Cedex, France*

Received 20 June 2003; received in revised form 5 March 2004; accepted 18 March 2004

Available online 13 April 2004

Abstract

Large-eddy simulations (LESs) of an industrial gas turbine burner are carried out for both nonreacting and reacting flow using a compressible unstructured solver. Results are compared with experimental data in terms of axial and azimuthal velocities (mean and RMS), averaged temperature, and existence of natural instabilities such as precessing vortex core (PVC). The LES is performed with a reduced two-step mechanism for methane–air combustion and a thickened flame model. The regime of combustion is partially premixed and the computation includes part of the swirler vanes. For this very complex geometry, results demonstrate the capacity of the LES to predict the mean flow, with and without combustion, as well as its main unstable modes: it is shown, for example, that the PVC mode is very strong for the cold flow but disappears with combustion.
© 2004 The Combustion Institute. Published by Elsevier Inc. All rights reserved.

Keywords: Large-eddy simulation; Combustion; Complex geometries

1. Introduction

Large-eddy simulation (LES) is becoming a standard tool to study the dynamics of turbulent flames [1,2]. Multiple recent papers have demonstrated the power of this method [3–9]. For example, LES appears as one of the key tools to predict and study combustion instabilities encountered in many modern combustion devices such as aero and industrial gas turbines, rocket engines, and industrial furnaces.

Up to now, most LES of reacting flows has been limited to fairly simple geometries for obvious reasons of cost and complexity reduction. In many cases, experiments have been designed using especially simple shapes (two-dimensional [3,7,10] or axisymmetrical [11,12] configurations) and simple regimes (low-speed flows, fully premixed or fully non-premixed flames) to allow research to focus on the physics of the LES (subgrid scale models, flame/turbulence interaction model) and, more generally, to demonstrate the validity of the LES concept in academic cases. Even though this approach is clearly adequate in terms of model development, it is important to recognize that it can also be misleading in various aspects when it comes to dealing with complex flames in complex geometries:

- Most LES of reacting flows have been performed in combustion chambers where structured meshes were sufficient to describe the geometry. In such solvers, using high-order spa-

* Corresponding author. Fax: 33-561-193-000.
E-mail address: selle@cerfacs.fr (L. Selle).

0010-2180/$ – see front matter © 2004 The Combustion Institute. Published by Elsevier Inc. All rights reserved.
doi:10.1016/j.combustflame.2004.03.008

tial schemes (typically fourth to sixth order in space) is relatively easy and provides precise numerical methods. As soon as real complex geometries are considered, these structured meshes must be replaced by unstructured grids on which constructing high-order schemes is a much more difficult task.

- Moving from structured to unstructured meshes also raises a variety of new problems in terms of subgrid scale filtering: defining filter sizes on a highly anisotropic irregular grid is another open research issue [13–16]. Many LES models, developed and tuned on regular hexahedral grids, perform much more poorly on the irregular unstructured grids required to mesh real combustion chambers. Very few studies have been published yet on LES of reacting flows on unstructured grids [4,5,17]. One objective of this article is to demonstrate the ability of a present LES tool to handle such meshes.
- Many laboratory flames used for LES validations are low-speed unconfined flames in which acoustics do not play a role and the Mach number remains small so that compressibility effects can be omitted from the equations (so-called "low-Mach-number approximation"). In most real flames (e.g., in gas turbines), however, compressibility cannot be neglected: (1) the Mach number can reach much higher values, and (2) acoustics are important so that taking into account compressibility effects becomes mandatory. This leads to a more complex formulation in which the boundary conditions must handle acoustic wave reflections [2]. Being able to preserve computational speed on a large number of processors then also becomes an issue simply to obtain a result in a finite time.
- In many combustion chambers, it is impossible to perform true LES everywhere in the flow. For example, the flow between vanes in swirled burners or inside the ducts feeding dilution jets would require too many grid points. Multiperforated plates, which can create thousands of small jets cooling the combustion chamber, are also obviously beyond the present capabilities of LES codes. As a consequence, compromises must be sought and the LES of today and probably tomorrow requires methods that offer (at least) robustness in places where the grid is not sufficient to resolve the unsteady flow. For such methods, having excellent LES efficiency on high-quality grids for academic problems is no longer the most important issue.

These few examples suggest that when it comes to computing flames in complex geometries for real combustors, work must concentrate on new issues: unstructured solvers, compressible flows, boundary conditions, robustness in poorly meshed zones, parallel efficiency. This also means that many modeling aspects that were critical in simple laboratory flames (subgrid scale LES models for momentum, kinetic energy conservation, accuracy of chemistry description, etc.) must now be combined with other (and sometimes more) critical problems: efficient unstructured solvers, subgrid scale LES models on distorted grids, boundary conditions adapted to acoustics, etc.

The choice of a chemistry description remains a significant difficulty. For most laboratory flames, describing chemistry with only one variable is sufficient for LES: the progress variable is enough to compute fully premixed flames and the mixture fraction is adequate for perfectly non-premixed piloted flames such as the Sandia flames [18]. In real gas turbines however, the combustion regime is much more complex and more "robust" models are required to handle flames that are typically partially premixed with a full range of local equivalence ratios and mixing levels.

This study presents a computation of a complex industrial burner, developed at Siemens Power Generation, using an unstructured LES compressible solver. The main objectives are to:

- extend an existing flame/interaction model (called the Thickened Flame Model) to a two-step chemical scheme,
- investigate the capabilities of LES in a realistic configuration, and
- compare the LES results with experimental data obtained at the University of Karlsruhe. This comparison is performed for one regime only for which detailed LES and experimental results are gathered. This regime corresponds to a partially premixed case at an equivalence ratio of $\phi = 0.5$ and an inlet temperature of 673 K. This regime does not exhibit large-scale combustion instabilities.

The LES solver used for the study is presented first. The Thickened Flame (TF) model is then discussed. A two-step chemical mechanism incorporating CO as the main intermediate species was tuned for the conditions of the Siemens burner and tested first for premixed laminar flames. The configuration used for the Siemens burner installed in the Karlsruhe combustion chamber is described before presenting cold flow results. Finally, reacting flow solutions are presented. For both reacting and nonreacting cases, the presentation includes a comparison of the averaged fields (mean and RMS velocities for all cases, temperature for the reacting case) and a study of the precessing vortex core.

2. The LES solver

The LES solver AVBP [19] solves the full compressible Navier–Stokes equations on hybrid (structured and unstructured) grids. Subgrid stresses are described by the WALE model [20]. The flame/turbulence interaction is modeled by the TF approach [3,5, 7,21,22]. The numerical scheme uses third-order spatial accuracy and third-order time accuracy [23]. Tests performed during this study have demonstrated that the third-order spatial accuracy of the solver is a key feature in obtaining precise LES results on unstructured meshes. The AVBP solver used here also handles variable heat capacities: species enthalpies are tabulated and the mean heat capacity is determined as a function of temperature and species mass fractions Y_k. Therefore, local quantities, such as the mean molar mass W and the ratio of heat capacities γ, are not constant. This introduces significant additional complexities into the numerical method, especially near boundaries where classic characteristic methods such as NSCBC [24] must be replaced by a more complex technique [25]. The walls of the combustion chamber are treated as adiabatic walls (the experiment uses ceramic walls). Both no-slip and law-of-the-wall formulations have been used on walls, with very limited differences in the results. Typical runs are performed on grids of 2.5 millions elements on 64 processors.

3. The thickened flame model

For the present study, premixed combustion is considered. Multiple studies have concentrated on LES of diffusion flames [8,26,27] while premixed cases have received less attention [9,28–30]. Indeed, infinitely fast chemistry assumptions constitute a useful path for LES of diffusion flames. Such assumptions cannot be used for premixed flames, however: modeling the interaction between flame and turbulence in premixed combustion systems requires tracking of the flame front position, leading to a problem that is more difficult to handle than most diffusion flames. The natural technique to track the flame would be to solve its inner structure, but this is impossible on typical LES meshes because premixed flame fronts are too thin. Two methods can then be used to propagate turbulent flame fronts on LES meshes:

- Bring the flame thickness to zero and propagate the flame front as a thin interface: this is the principle of the G-equation method [1,9].
- Thicken the flame so that it can be resolved on the LES mesh while still propagating at the same speed as the unthickened flame: this is the principle of the TF model [2,5].

In the present work, the standard TF model developed by Colin et al. [5] is used: in this model, pre-exponential constants and transport coefficients are both modified to offer thicker reaction zones that can be resolved on LES meshes. The fundamental property justifying this approach has been put forward by Butler and O'Rourke [31] by considering the balance equation for the k-species mass fraction Y_k in a one-dimensional flame of thermal thickness δ_{L}^0 and speed s_{L}^0:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x}\right) + \dot{\omega}_k(Y_j, T). \tag{1}$$

Modifying this equation to have

$$\frac{\partial \rho Y_k^{\mathrm{th}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y_k^{\mathrm{th}}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho F D_k \frac{\partial Y_k^{\mathrm{th}}}{\partial x}\right) + \frac{1}{F}\dot{\omega}_k\left(Y_j^{\mathrm{th}}, T^{\mathrm{th}}\right) \tag{2}$$

leads to a "thickened" flame equation where F is the thickening factor and superscript th stands for thickened quantities. Introducing the variable changes $X = x/F$ and $\Theta = t/F$ leads to:

$$\frac{\partial \rho Y_k^{\mathrm{th}}}{\partial \Theta} + \frac{\partial \rho u Y_k^{\mathrm{th}}}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial X}\left(\rho D_k \frac{\partial Y_k^{\mathrm{th}}}{\partial X}\right) + \dot{\omega}_k\left(Y_j^{\mathrm{th}}, T^{\mathrm{th}}\right), \tag{3}$$

which has the same solution as Eq. (1) and propagates the flame front at the same speed s_L^0. However, $Y_k^{\mathrm{th}}(x,t) = Y_k(x/F, t/F)$, showing that the flame is thickened by a factor F. The thickened flame thickness is $\delta_{\mathrm{L}}^1 = F\delta_{\mathrm{L}}^0$. Choosing sufficiently large values of F allows us to obtain a thickened flame that can be resolved on the LES mesh. Typically, if n is the number of mesh points within the flame front required by the solver and Δx the mesh size, the resolved flame thickness δ_{L}^1 is $n\Delta x$, so that F must be $F = n\Delta x/\delta_{\mathrm{L}}^0$. For the computation of most flames using the TF model, values of F ranging from 5 to 50 are sufficient to resolve the flame front on meshes corresponding to present computer capabilities. In the framework of LES, this approach has multiple advantages: when the flame is a laminar premixed front, the TF model propagates it at the laminar flame speed exactly as in a G equation approach [1]. However, this flame propagation is due to the combination of diffusive and reactive terms which can also act independently so that quenching (near walls for example) or ignition may be simulated. Fully compressible equations may also be used as required to study combustion instabilities.

Obviously, thickening the flame front also leads to a modified interaction between the turbulent flow and the flame: subgrid scale wrinkling must be reintroduced. This effect can be studied and parametrized using an efficiency function E derived from DNS results [5,21,32]. This efficiency function measures the subgrid scale wrinkling as a function of the local subgrid turbulent velocity u'_{Δ_e} and the filter width Δ_e. In practice, the diffusion coefficient D_k is replaced by EFD_k and the preexponential constant A by AE/F so that the conservation equation for species k is

$$\frac{\partial \rho Y_k^{\text{th}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y_k^{\text{th}}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho EFD_k \frac{\partial Y_k^{\text{th}}}{\partial x}\right) + \frac{E}{F}\dot{\omega}_k\left(Y_j^{\text{th}}, T^{\text{th}}\right). \quad (4)$$

This equation allows the turbulent flame to propagate at a turbulent speed $s_T = Es_L^0$ while keeping a thickness of the order of $\delta_L^1 = F\delta_L^0$. In laminar regions, E goes to unity and Eq. (4) simply propagates the front at the laminar flame speed s_L^0.

A central ingredient of the TF model is the subgrid scale wrinkling function E. For this work, the initial model of Colin et al. [5] was used to express E as a function of the local filter size Δ_e, the local subgrid scale turbulent velocity u'_{Δ_e}, the laminar flame speed s_L^0, and the laminar flame thicknesses δ_L^0 and δ_L^1,

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = \left(1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_L^0}\right)\frac{u'_{\Delta_e}}{s_L^0}\right) \times \left(1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_L^0}\right)\frac{u'_{\Delta_e}}{s_L^0}\right)^{-1}, \quad (5)$$

where the function Γ corresponds to the integration of the effective strain rate induced by all scales affected by the artificial thickening, i.e., between the Kolmogorov η_K and the filter Δ_e scales. α is a model parameter that scales as $\alpha \propto Re^{-1/2}$ [5]. Γ is written as:

$$\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_L^0}\right) = 0.75\exp\left[-\frac{1.2}{(u'_{\Delta_e}/s_L^0)^{0.3}}\right]\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}\right)^{2/3}. \quad (6)$$

The subgrid scale turbulent velocity is evaluated as $u'_{\Delta_e} = 2\Delta_x^3|\nabla^2(\nabla \times \bar{u})|$, where Δ_x is the grid size. This formulation provides an estimate of the subgrid scale velocity which is unaffected by dilatation [5]. Note that the filter size Δ_e may differ from Δ_x. Colin et al. [5] suggested choosing $\Delta_e = 10\Delta_x$.

The LES studies of Angelberger et al. [3] and Colin et al. [5] as well as various other tests have shown that Eq. (5) is adequate in predicting subgrid scale wrinkling. In this work, a thickening factor $F = 25$ was used. Eq. (5) was developed and tested with single-step chemical schemes. As the present study uses a two-step mechanism, additional DNS were performed to study the TF approach combined with a two-step chemical scheme [33] and to check whether the existing efficiency functions proposed in [5,21] or [32] could be used without modification. Results showed that the two chemical reaction rates follow exactly the same evolution during these flame vortex interactions. These DNS suggest that, for the investigated range of parameters, the premixed flame acts as a flamelet distorted by flow motions even for low values of the length scale ratio $r/(F\delta_L^0)$, where r is the length scale on the vortices interacting with the flame front. Moreover, the effective strain rates induced by the vortices on the flame front and extracted from these DNS are in close agreement with [5,21] findings. Accordingly, the efficiency functions derived in [5,21,32] were used without any modifications with the present two-step chemical scheme.

4. Two-step chemistry

The complexity of the chemical scheme used in a TF model must remain limited because all species are explicitly resolved. Up to now, only simple one-step chemical schemes have been used in TF models [3,5]. In the present study, a two-step scheme is introduced to capture CO and predict more adequate flame temperatures as an intermediate step toward more complex schemes (typically four-step schemes such as [34]).

The chemical scheme (called 2sCM2) takes into account six species (CH_4, O_2, CO_2, CO, H_2O, and N_2) and two reactions:

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O, \quad (7)$$

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO_2. \quad (8)$$

The first reaction (7) is irreversible, whereas the second one (8) is reversible and leads to an equilibrium between CO and CO_2 in the burnt gases. The rates of reaction (7) and (8) are respectively given by

$$q_1 = A_1\left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{W_{CH_4}}\right)^{n_1^{CH_4}}\left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_1^{O_2}} \times \exp\left(-\frac{E_{a_1}}{RT}\right), \quad (9)$$

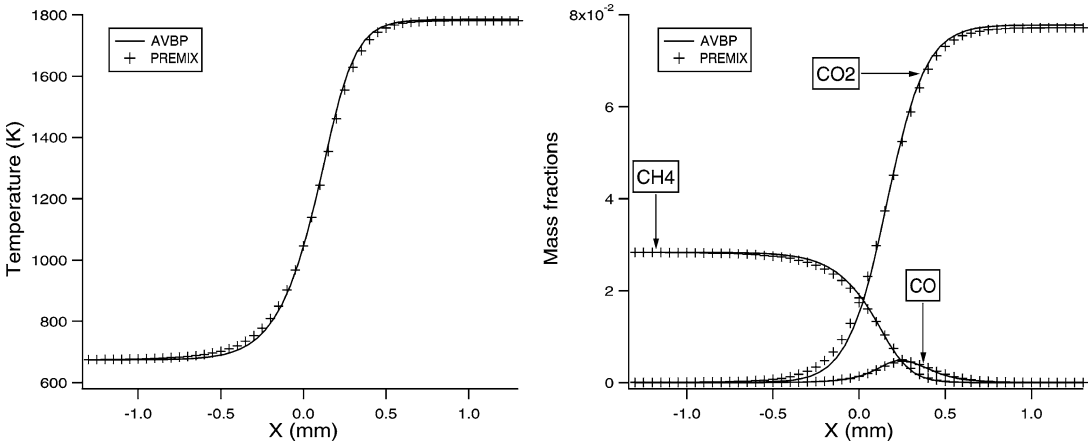


Fig. 1. Laminar one-dimensional flame at $\phi = 0.5$. Comparison of flame structures in AVBP and PREMIX with reduced scheme (called 2sCM2). (Left) Temperature profile (the fresh-gas temperature is 673 K), (right) mass fractions.

Table 1
Rate constants for the 2sCM2 scheme[a]

A_1	$n_1^{CH_4}$	$n_1^{O_2}$	E_{a_1}	A_2	n_2^{CO}	$n_2^{O_2}$	$n_2^{CO_2}$	E_{a_2}
$2E15$	0.9	1.1	34500	$2E9$	1	0.5	1	12000

[a] Activation energies are in cal/mol and the preexponential constants in cgs units.

Table 2
Schmidt numbers

CH_4	CO_2	CO	O_2	H_2O	N_2
0.68	0.98	0.76	0.76	0.6	0.75

$$q_2 = A_2\left[\left(\frac{\rho Y_{CO}}{W_{CO}}\right)^{n_2^{CO}}\left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_2^{O_2}} - \frac{1}{K_e}\left(\frac{\rho Y_{CO_2}}{W_{CO_2}}\right)^{n_2^{CO_2}}\right] \times \exp\left(-\frac{E_{a_2}}{RT}\right), \quad (10)$$

where K_e is the equilibrium constant for reaction (8), and the other parameters are provided in Table 1.

Transport by molecular diffusion also requires attention: laminar flame codes such as PREMIX use polynomial fits for diffusion coefficients D_k. This technique is precise but expensive and may be replaced by a simpler approximation based on the observation that the individual Schmidt numbers of species $S_c^k = \nu/D_k$ are almost constant in many air/hydrocarbon flames. Therefore, in AVBP, the diffusion coefficient D_k of species k is obtained as $D_k = \nu/S_c^k$, where ν is the viscosity and S_c^k the fixed Schmidt number of species k. The Schmidt number values used in the present simulations are given in Table 2. In most cases, these values correspond to the PREMIX values measured in the burnt gases. The Prandtl number is set to 0.68. With this parameter set, the agreement between flame profiles obtained using AVBP or PREMIX with the same chemical scheme is excellent (Fig. 1).

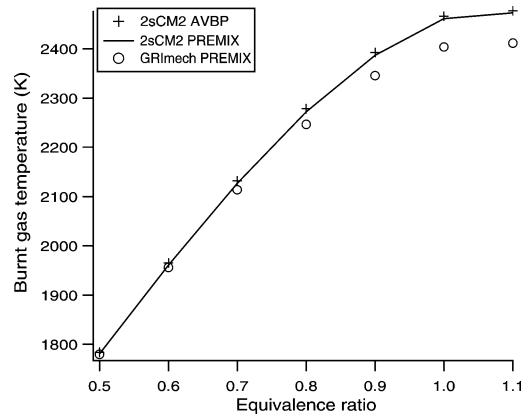


Fig. 2. Comparison of AVBP and PREMIX for burnt gas temperature (K). AVBP with reduced scheme (2sCM2) is compared with PREMIX results using both reduced and complex (GRI-Mech) schemes.

This scheme is directly implemented into the LES code. Its first advantage compared with a single-step scheme is to provide more accurate adiabatic flame temperatures. Fig. 2 compares the maximum flame temperatures obtained with AVBP and PREMIX using the full GRI mechanism. For the reduced scheme 2sCM2, AVBP and PREMIX predict the same maximum flame temperature, confirming that the thermodynamical data of AVBP are correct. The reduced scheme 2sCM2 overestimates the maximum flame temperatures compared with the GRI-mech scheme by 100 K for rich cases, but is very accurate for lean mixtures. The laminar flame speeds

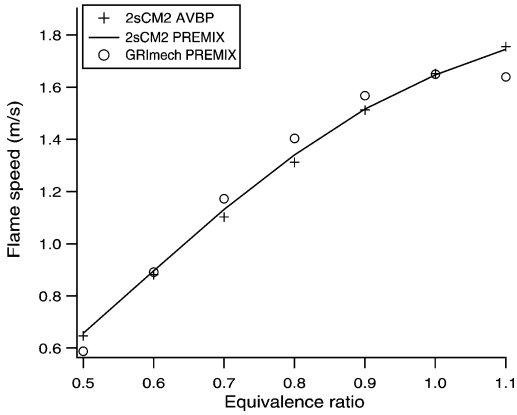


Fig. 3. Comparison of AVBP (reduced scheme 2sCM2) and PREMIX (reduced and complex schemes) for laminar flame speed s_L^0 (m/s).

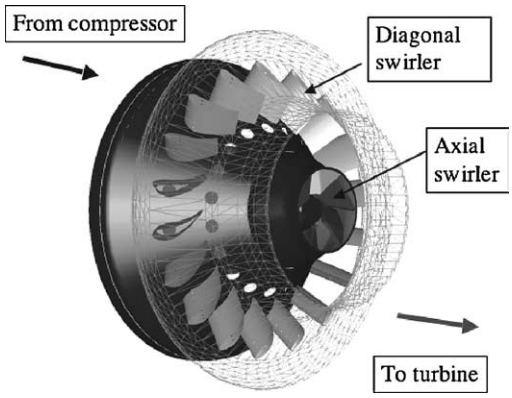


Fig. 4. View of the Siemens burner: the vanes of the diagonal swirler are not computed.

are also well predicted on the lean side (Fig. 3) but deviate from the exact results for rich cases. For the turbulent case presented below, the equivalence ratio varies between 0 and 0.5 so that the 2sCM2 predictions are precise.

5. Configuration

An important objective of this study is to investigate the limits of present computer capabilities to perform LES of combustion in realistic geometries. An industrial gas turbine burner is considered here. The CAD data were provided by Siemens PG. The grid contains 2,381,238 cells. Fig. 4 shows the main features of the burner. A central axial swirler (colored in dark) is used to inject and swirl air. This swirler is entirely computed in the LES. In addition, six small tubes (not visible on this figure) can be used to generate pilot flames in the axial swirler but they were not fed during the present computation. The main part of the combustion air is injected by the diagonal swirler. The fuel is injected in the diagonal swirler through holes located on both sides of the swirling vanes. The diagonal swirler vanes can be seen in Fig. 4. In this study, the flow produced by the diagonal swirler is assumed to be perfectly premixed and the computational domain starts at the trailing edge of the vanes.

6. Experimental techniques

A single Siemens burner (scale 1 : 1) is mounted on an atmospheric test rig (Fig. 5). The combustion

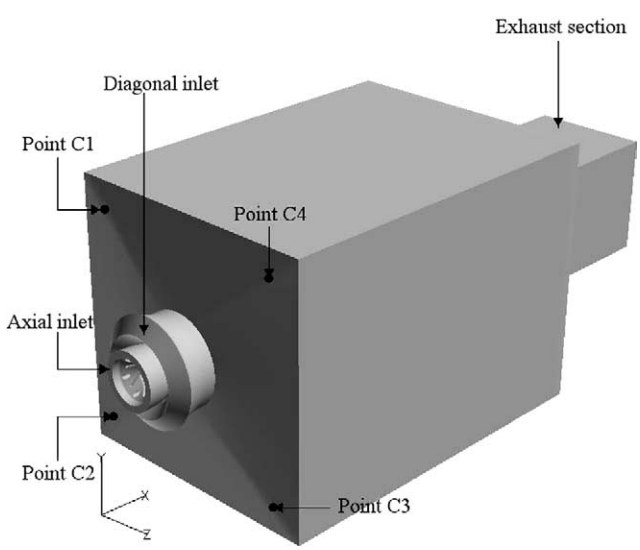


Fig. 5. Burner mounted on ITS combustion chamber.

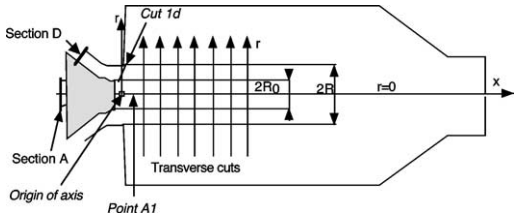


Fig. 6. Longitudinal cut of the combustion chamber: location of LDV measurements.

chamber has a square cross section with a truncated pyramid shape at the exit. Both the casing and the chamber walls allow optical access for velocity measurements by LDA. The burner is fired with natural gas (assumed to be mostly methane), and the air is preheated to 673 K. The thermal power varies between 420 kW (at $\Phi = 0.5$) and 810 kW (at $\Phi = 0.83$).

Measurements were performed at ITS Karlsruhe to characterize:

- the cold flow velocity field in terms of mean and RMS velocities using LDA techniques,
- the hot flow velocity field in terms of mean and RMS components as well as the mean temperature field using thermocouple data. The time response of the thermocouple was not sufficient to provide RMS temperature data.

Measurements are performed in transverse cuts and at the outlet of the diagonal swirler as represented in Fig. 6. For the cold flow, data are gathered over 15 cuts ranging from $x/R = 0.37$ to $x/R = 4.17$, where R is the radius of the burner outlet. For the case with combustion, there are six cuts ranging from $x/R = 0.7$ to $x/R = 4.32$.

7. Inlet conditions

A major issue in LES calculations is to specify boundary conditions. Since the axial swirler is fully computed, the flow is introduced before the vanes in section A (Fig. 6) without swirl and the computation should produce the right flow field at the burner mouth. The main problem is then to specify inlet conditions for the diagonal swirler (section D in Fig. 6). Section D is located at the trailing edge of the vanes of the diagonal swirler and velocities could not be measured at this location. The LES, however, starts in section D, and the inlet velocity profiles in this section are adjusted to match the first measurement section (cut 1d in Fig. 6) in the burner under nonreacting cases.

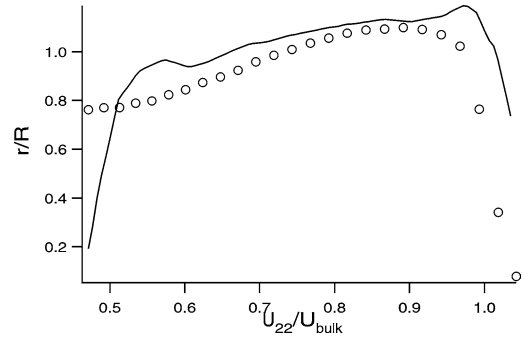


Fig. 7. Normalized velocity U_{22}/U_{bulk} at the exit of the diagonal swirler (cut 1d in Fig. 6).

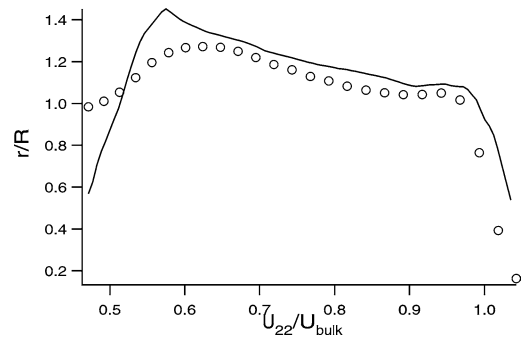


Fig. 8. Normalized swirl velocity W/U_{bulk} at the exit of the diagonal swirler (cut 1d in Fig. 6).

Velocity measurements have been performed in various sections displayed in Fig. 6. The swirling velocity W and the velocity U_{22} normal to a plane parallel to the diagonal swirler exit plane (at an angle of 22° compared with the vertical axis) are measured in the test section located close to the burner nozzle (cut 1d). Distances and velocities are respectively scaled by the burner radius R, and the bulk velocity U_{bulk} is defined by $U_{\text{bulk}} = \dot{V}/\pi R^2$, where $\dot{V}$ is the total volume flow rate through the burner.

Average profiles of axial and tangential velocities at the exit of the diagonal burner are displayed in Figs. 7 and 8 (cut 1d in Fig. 6). In figures, symbols denote experimental data while LES results are plotted with solid lines. No fluctuating velocity components are added to the inlet conditions: this incoming turbulence can be neglected compared with the turbulent activity in the chamber, which is due to the very high velocity gradients created by the swirling motion in the dump plane of the chamber. This is confirmed in the next section by the comparison of experimental and computational fluctuating velocity components in the chamber.

8. Nonreacting flow results

8.1. Averaged fields

Once the inlet conditions have been set, LDV measurements (○) are compared with averaged LES results (—) at different downstream locations x in the combustor (Fig. 9–12). In Fig. 9 (axial velocity profiles) and Fig. 10 (swirling velocities), LES data are averaged over 36 ms, corresponding to two flow times through the entire combustion chamber at the bulk velocity. Only 6 downstream locations are displayed for clarity, but 15 were investigated.

The agreement between LES and experimental data is excellent. The size, shape, and intensity of the recirculation zone are well predicted, as is the overall spreading of the turbulent swirling jet. All results are displayed for the whole size of the combustion chamber and not only for one half chamber to evidence symmetry defaults. As the chamber is square and the injection device axisymmetric, average velocities are expected to be symmetrical versus the x axis. However, both experimental data and LES results are not perfectly symmetrical, especially downstream. This finding (which is quite usual in these flows) may indicate a lack of sampling of LES data, but may also be due to an intrinsic difficulty in such flows to follow the symmetry of the geometry.

Concerning the RMS profiles (Figs. 11 and 12), only the resolved part of the fluctuations is taken into account here. This demonstrates that for this flow, most of the unsteady motion lies in large structures which are very well predicted by LES methods. Cut $x/R = 0.37$ in Fig. 12 shows that the largest fluctuations of the swirling component are located on the axis, and reach up to 60% of the bulk velocity. This is explained in the following subsection by the presence of a coherent structure.

An additional quantity that can be extracted directly from this compressible LES is the RMS pressure P', both in the chamber and on its walls. Fig. 13 shows that the largest pressure oscillations are found in front of the axial swirler outlet. Fairly high pressure levels (2500 Pa) are observed inside the combustor at the swirler outlet but they do not propagate to the walls. Most of these pressure oscillations are due to the precessing vortex described in the next subsection.

8.2. Unsteady flow analysis

Swirling flows can exhibit a very large range of topologies, depending mainly on the swirl number (see the review on vortex breakdown in [35]). For high values of the swirl number, the central recirculation zone may oscillate at a given frequency. This phenomenon is often referred to as precessing vortex core (PVC): the vortex aligned with the axis of

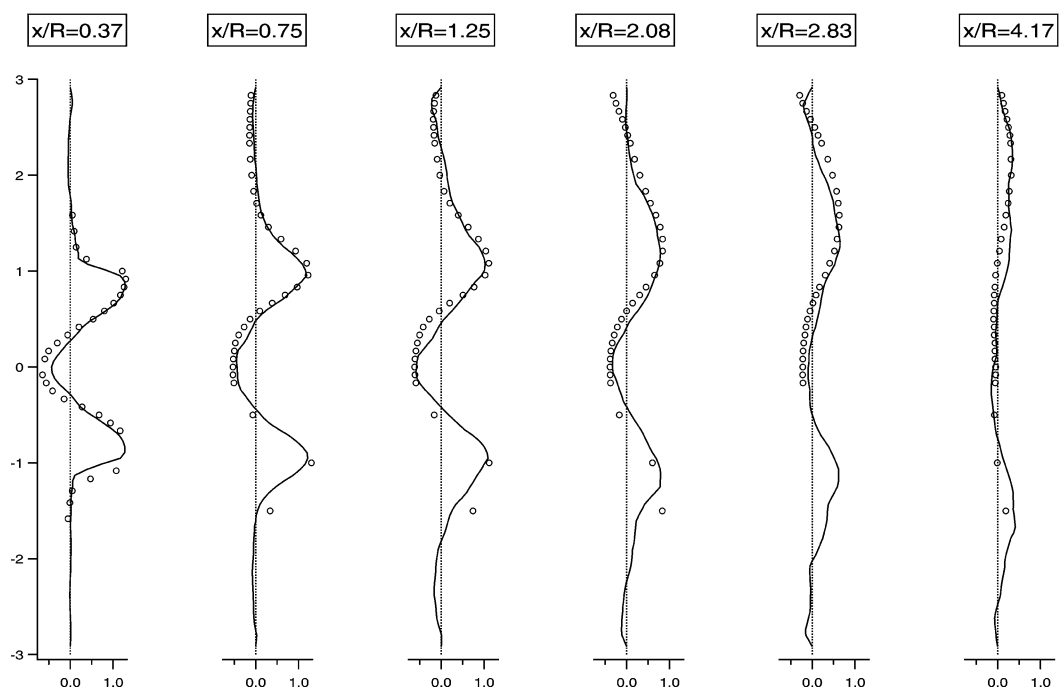


Fig. 9. Cold flow validation: mean axial velocity U/U_{bulk}.

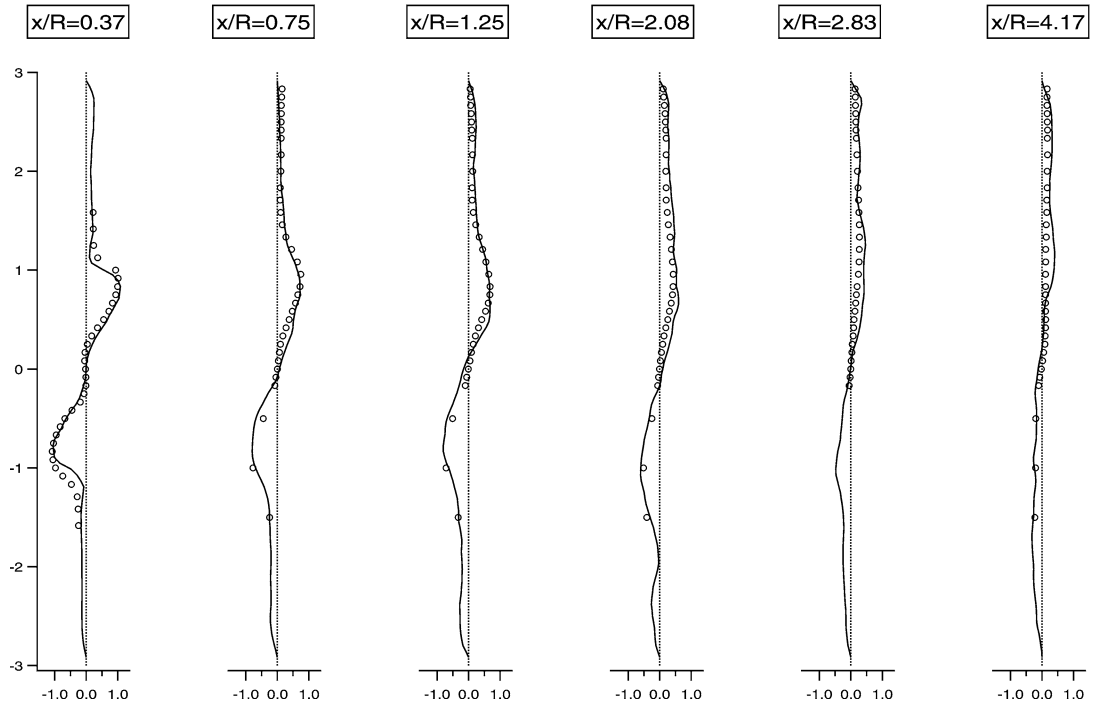


Fig. 10. Cold flow validation: mean swirling velocity W/U_{bulk}.

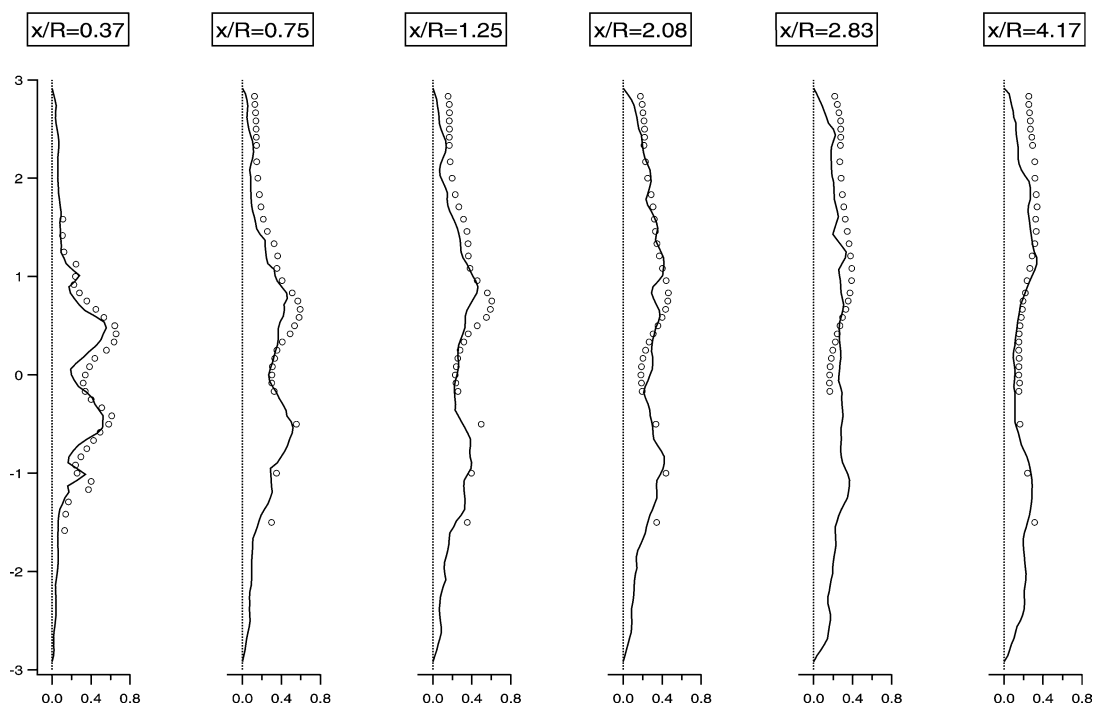


Fig. 11. Cold flow validation: axial velocity fluctuations U'/U_{bulk}.

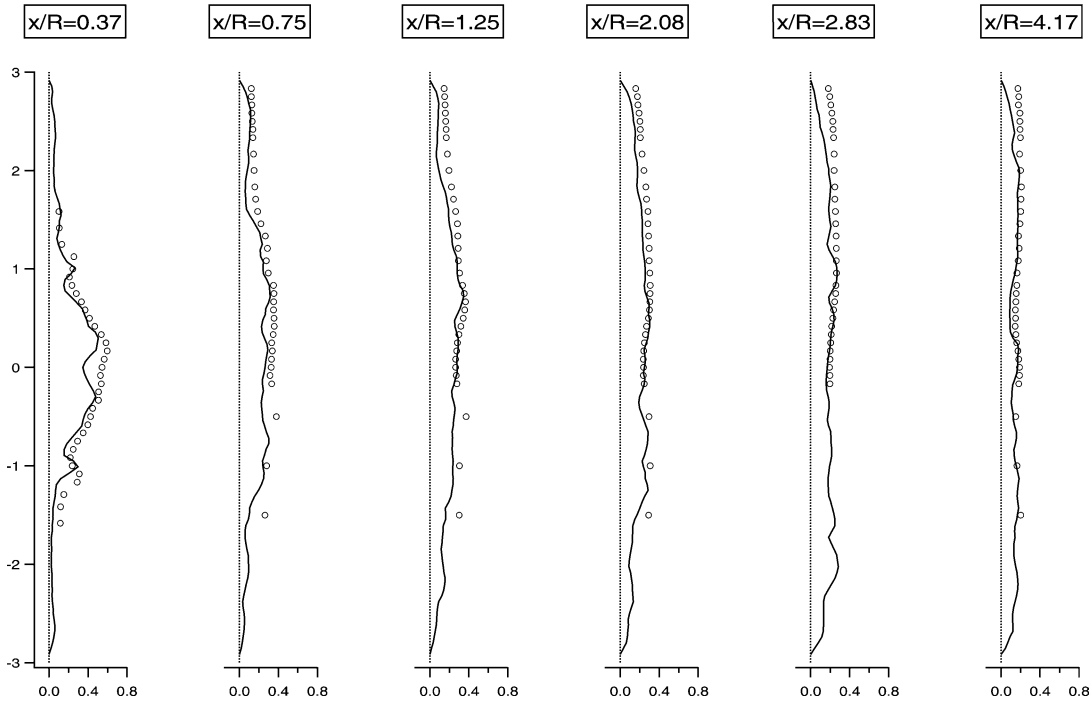


Fig. 12. Cold flow validation: swirling velocity fluctuations W'/U_{bulk}.

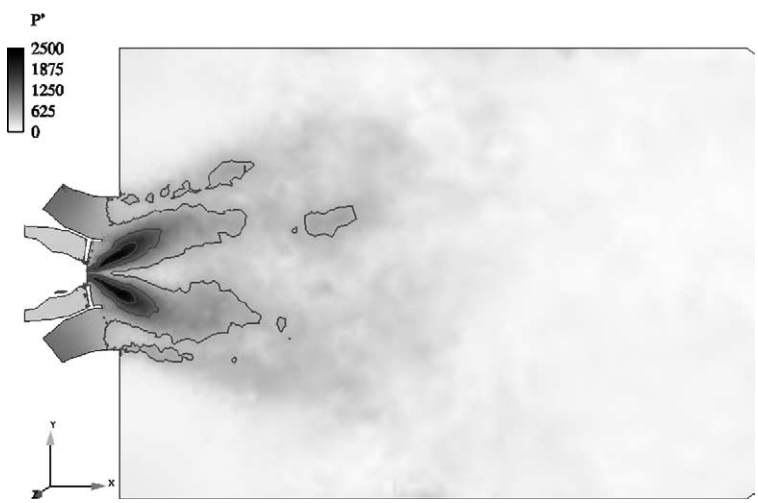


Fig. 13. RMS pressure fluctuations P' in a longitudinal cut for the cold flow (Pa).

the chamber (due to the swirl) breaks down in a spiral form. In the present regime, the flow inside the spiral is recirculated. The entire structure rotates around the axis of the chamber, causing large perturbations. The present LES captures this phenomenon: on the burner axis, at point A1 (Fig. 6), the velocity component W oscillates with time (Fig. 14) at a frequency $f_{\text{LES}} = 275$ Hz (Fig. 15). Indeed, if the flow were axisymmetric, W would be zero on the axis of the burner. The computed Strouhal number $St = (2Rf_{\text{LES}})/U_{\text{bulk}} = 0.63$ is typical of swirling flows [36]. The value of f_{LES} is also very close to that obtained experimentally at ITS: $f_{\text{exp}} = 255$ Hz.

Note that the LES gives additional information on the temporal evolution of the PVC: the sense of rotation of the whole spiral, as a structure, is that of the surrounding swirling flow, but the sense of winding of this spiral is opposite to that of the swirl. Fig. 16 is an instantaneous visualization of the PVC in the cold flow.

9. Reacting flow results

Reacting cases are computed starting from a cold flow solution. Fresh premixed gases (equivalence ratio $\phi = 0.5$) are injected through the diagonal swirler. The axial and diagonal flows, coming from the compressor in the actual gas turbine, enter the combustion chamber of the ITS burner after being preheated electrically to a temperature $T = 673$ K. As the actual ignition process is not described here, the chemical reaction is numerically started by filling the combustion chamber with hot fully burned gases. Note, however, that the pressure increases by 25% and the Mach number goes up to 0.4 in the outlet contraction during the transient ignition phase [33].

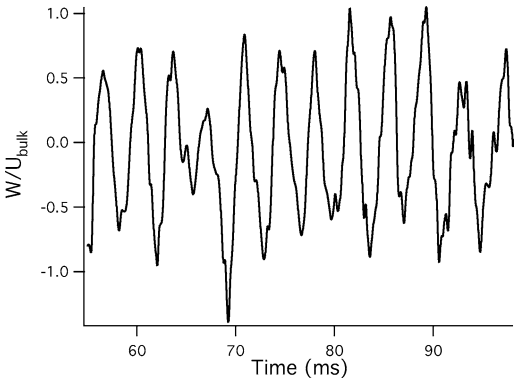


Fig. 14. Cold flow: W velocity at point A1 (see Fig. 6).

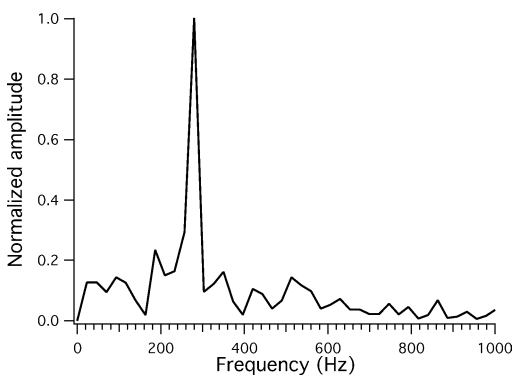


Fig. 15. Cold flow: Fourier transform of W velocity signal at point A1 (Fig. 6).

9.1. Unsteady flow analysis

A three-dimensional visualization of the reacting flow field is displayed in Fig. 17: the temperature iso-surface at $T = 1000$ K shows the geometry of the flame surface and illustrates the turbulent nature of the flame/flow interaction. Pockets of fresh gases are periodically shed from the main flame zone and burn downstream. A central core of hot gases is stabilized along the burner axis by the recirculation zone induced by swirl: this core is attached to the face of the axial swirler (Fig. 18). The field of axial velocity, normalized by U_{bulk}, is displayed in Fig. 19 with isocontours of heat release.

A specific feature of the reacting case is that the PVC structure evidenced in the cold flow cases disappears when combustion is turned on. Fig. 20 is a record of the velocity in the horizontal central plane (W) at point A1 (Fig. 6) after ignition. The velocity signal oscillates around zero as the core of the recirculation zone moves around the axis of the combustion chamber. After a few periods, the PVC motion vanishes. This observation obtained from LES data is confirmed by experimental results.

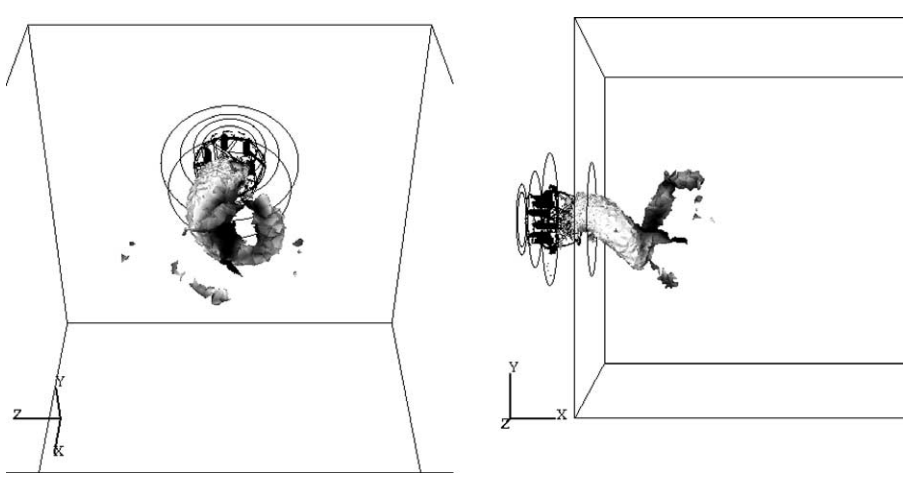


Fig. 16. Visualization of the PVC structure in the LES by a pressure iso-surface.

9.2. Averaged fields

In this section, the mean results of the LES (—) are compared with experimental data (○). Figs. 21–25 show the measurements conducted only in one-half of the combustion chamber.

Mean temperature profiles obtained from LES are compared with experimental data in Fig. 21. The agreement between LES and experimental data is good, and quantities that are important for the turbine design are well reproduced:

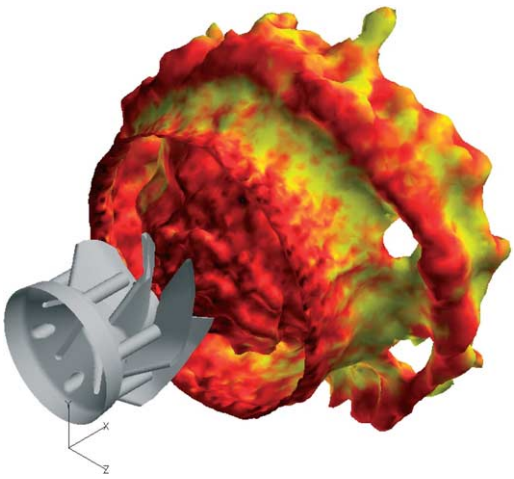


Fig. 17. Axial swirler vanes and temperature iso-surface ($T = 1000$ K) colored by velocity modulus.

- The angle, thickness, and length of the turbulent flame brush are very well predicted.
- The burnt gas temperature is very slightly overpredicted by the LES, mainly due to the nonadiabaticity of the experiment, while the LES assumes adiabatic walls.

Mean axial and tangential velocity profiles are respectively given in Figs. 22 and 23. The agreement is good: the size and intensity of the recirculation zone are very well predicted. The LES accurately captures the drastic increase in the angle of the jet compared with the cold flow (Fig. 9). RMS profiles of both axial and tangential velocities are plotted in Figs. 24 and 25. The level of the fluctuations is well predicted. Though the shape and level of axial velocity RMS fluctuations have not changed significantly between cold and hot flow (Figs. 11 and 24), swirling velocity RMS fluctuations are very different on the first profiles (Figs. 12 and 25). At $x/R = 0.37$, for example, the RMS swirling speed is $W'/U_{\text{bulk}} \simeq 0.7$ on the burner axis ($y = 0$) in Fig. 12 for the cold flow, and it decreases to $W'/U_{\text{bulk}} \simeq 0.1$ in Fig. 25 with combustion. This confirms that the fluctuations of azimuthal component are strongly reduced with combustion due to the suppression of the PVC structure, and the LES captures this effect with accuracy.

Analysis of the pressure fluctuations P' in a longitudinal cut reveals another important difference between cold and reacting flows: the pressure fluctuations observed in the cold flow (see Fig. 13) in front of

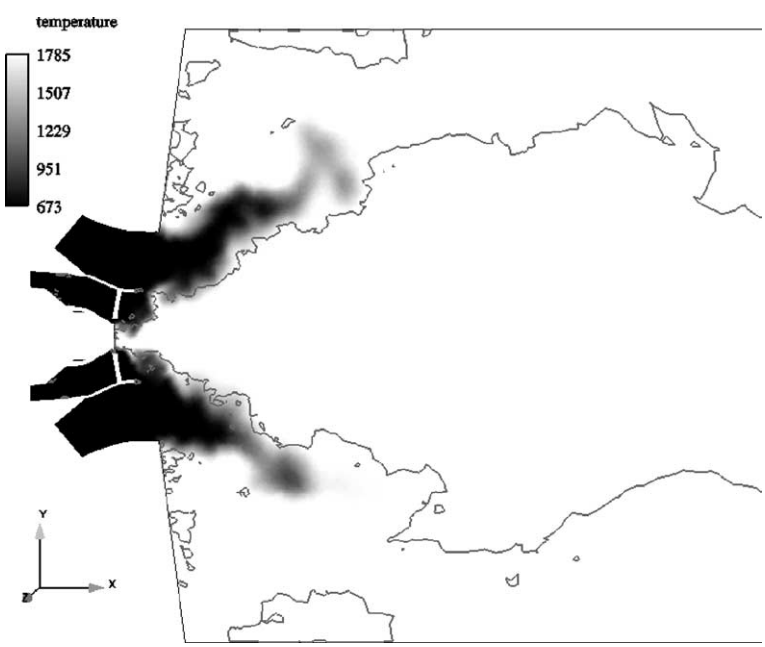


Fig. 18. Instantaneous temperature field and contour of zero axial velocity in a longitudinal cut of the burner.

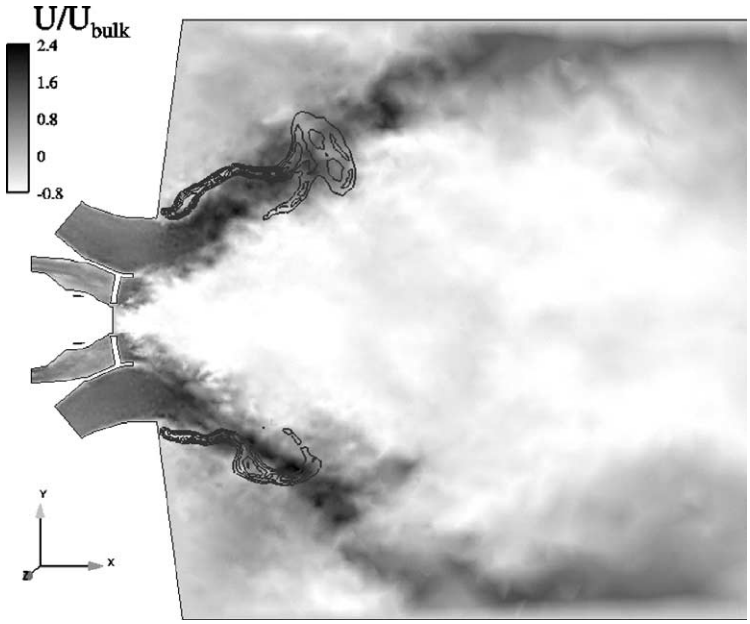


Fig. 19. Instantaneous axial velocity field and contours of reaction rate in a longitudinal cut of the burner.

the axial swirler disappear when combustion is turned on (Fig. 26). This is consistent with the suppression of the PVC when combustion is started: the cold flow unsteady pressure field is dominated by the presence of the PVC, while the reacting flow inhibits the PVC. The pressure field structure with combustion (Fig. 26) corresponds to an acoustic mode of the chamber [37] which is not analyzed in this paper.

10. Conclusions

A computation of a full burner of a premixed gas turbine installed in a laboratory rig was performed using LES for both nonreacting and reacting cases. The flame is described using a two-step chemical scheme for methane/air combustion combined with the Thickened Flame model. LES results are validated from velocity and temperature measurements performed at the University of Karlsruhe. The overall agreement with experiment is very good both for cold flow and for reacting conditions. A strong precessing vortex core is observed for the nonreacting flow. This vortex disappears when combustion is activated in both the experiment and the LES. Unsteady pressure fields are also very different for cold and reacting flow: maximum pressure oscillations are observed in the PVC zone for the cold flow; with combustion, the pressure oscillation maxima are located at the chamber walls and have an acoustic structure corresponding to a transverse-longitudinal mode, which is not studied in this paper. More generally, this study demonstrated that LES for reacting flows in complex geometries has now reached sufficient maturity to bring original information on such complex combustion devices.

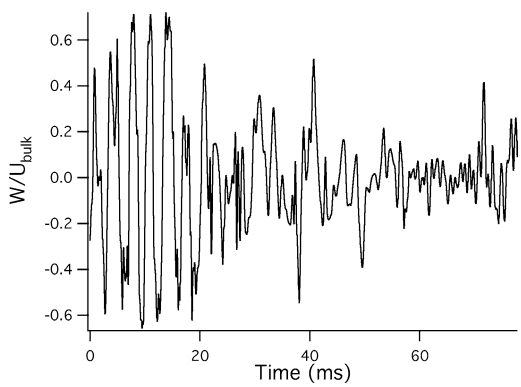


Fig. 20. Reacting flow: W velocity signal at point A1 (see Fig. 6). The PVC evidenced in the cold flow vanishes after ignition.

Acknowledgments

Certain numerical simulations have been conducted on the computers of CINES and IDRIS French national computing centers. Part of this work was carried out during the 2002 Center for Turbulence Research Summer Program at Stanford.

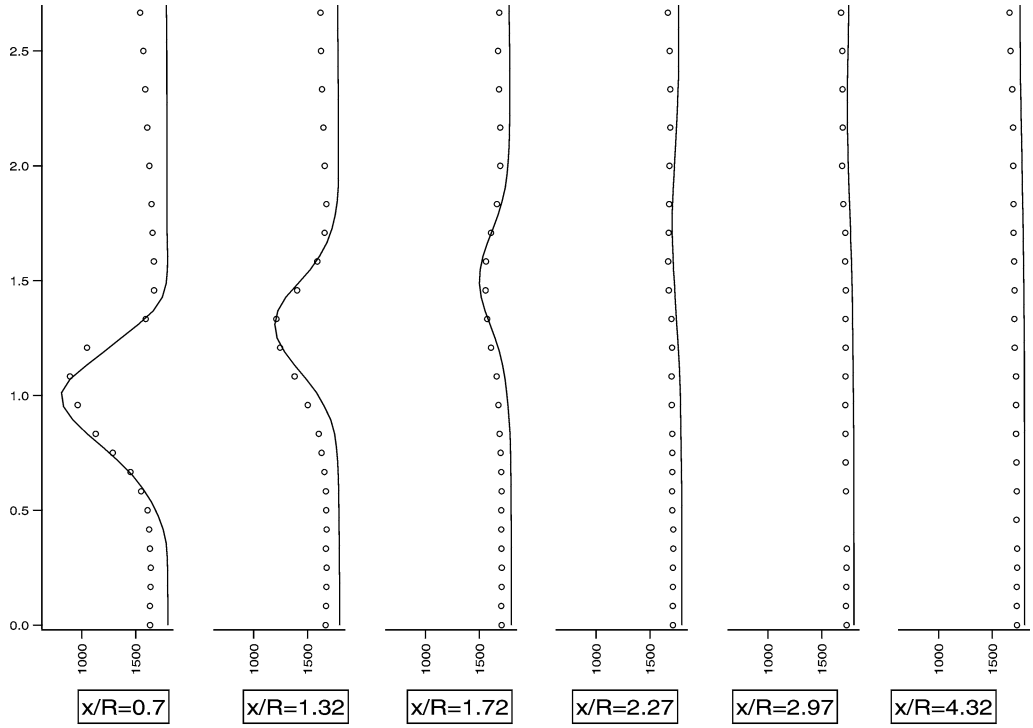


Fig. 21. Reacting flow validation: mean temperature (K).

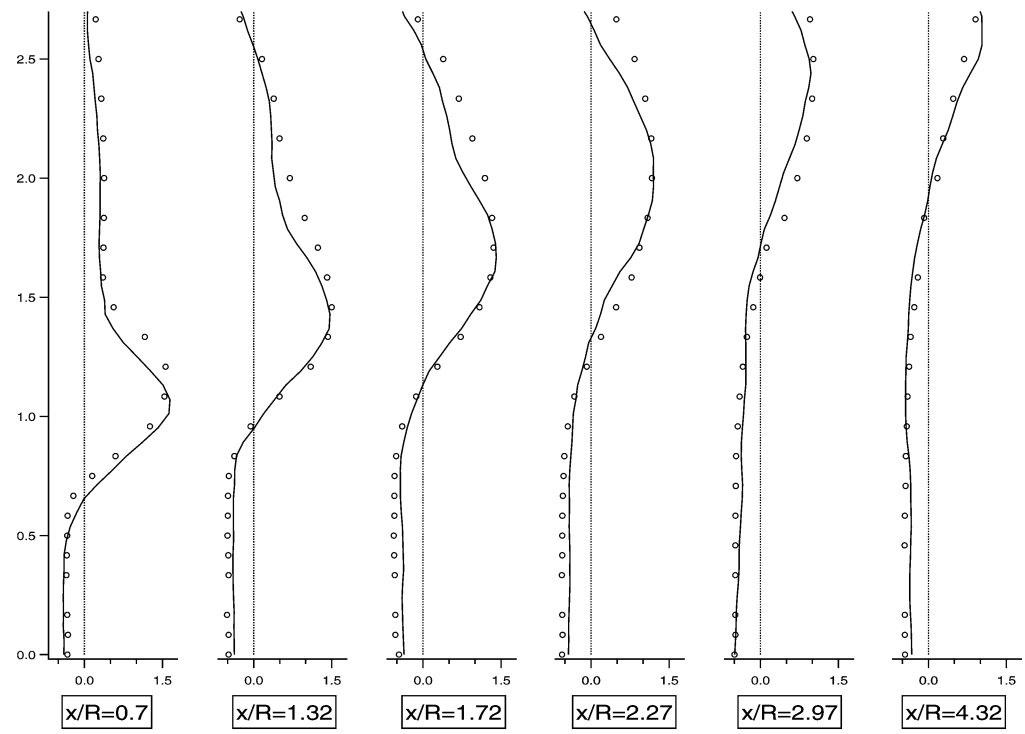


Fig. 22. Reacting flow validation: mean axial velocity U/U_{bulk}.

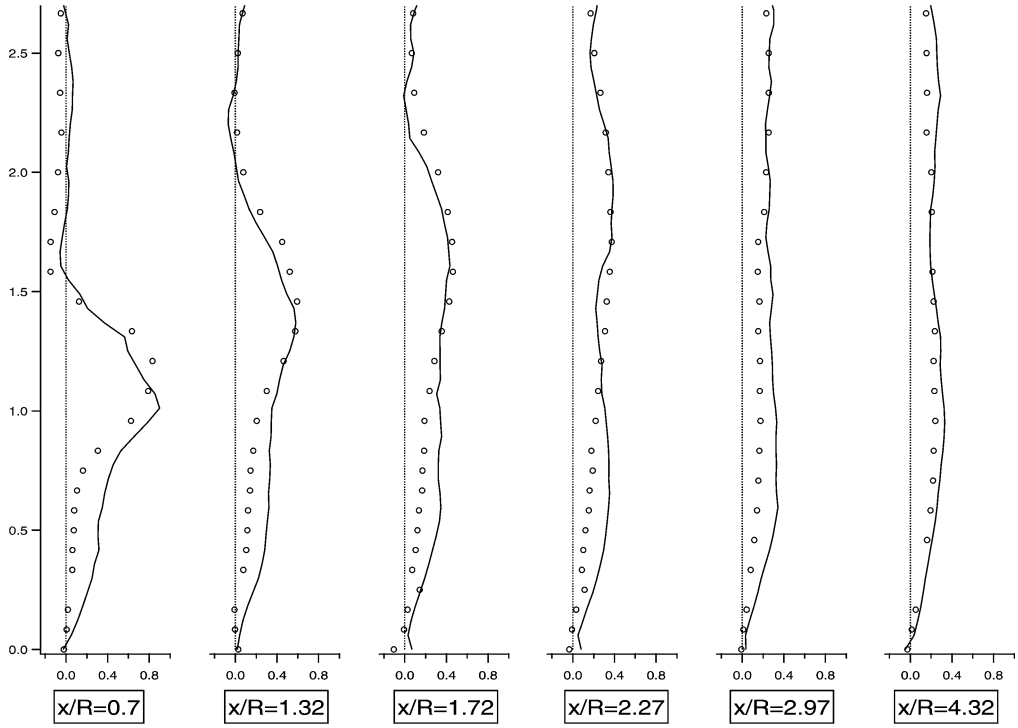


Fig. 23. Reacting flow validation: mean swirling velocity W/U_{bulk}.

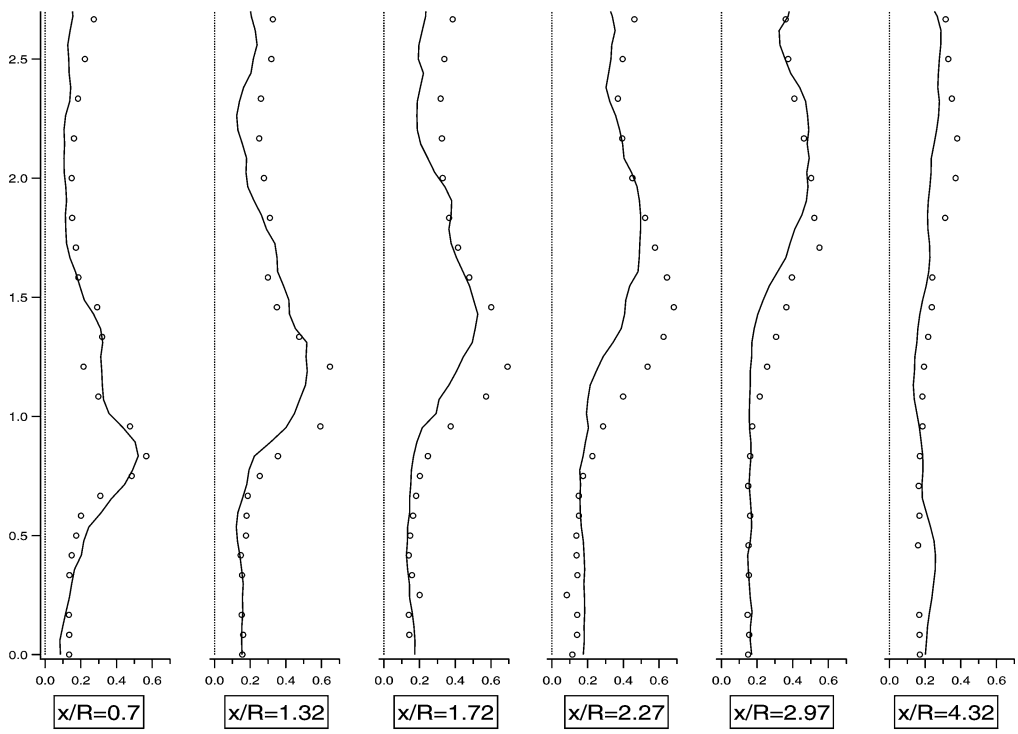


Fig. 24. Reacting flow validation: axial velocity fluctuations U'/U_{bulk}.

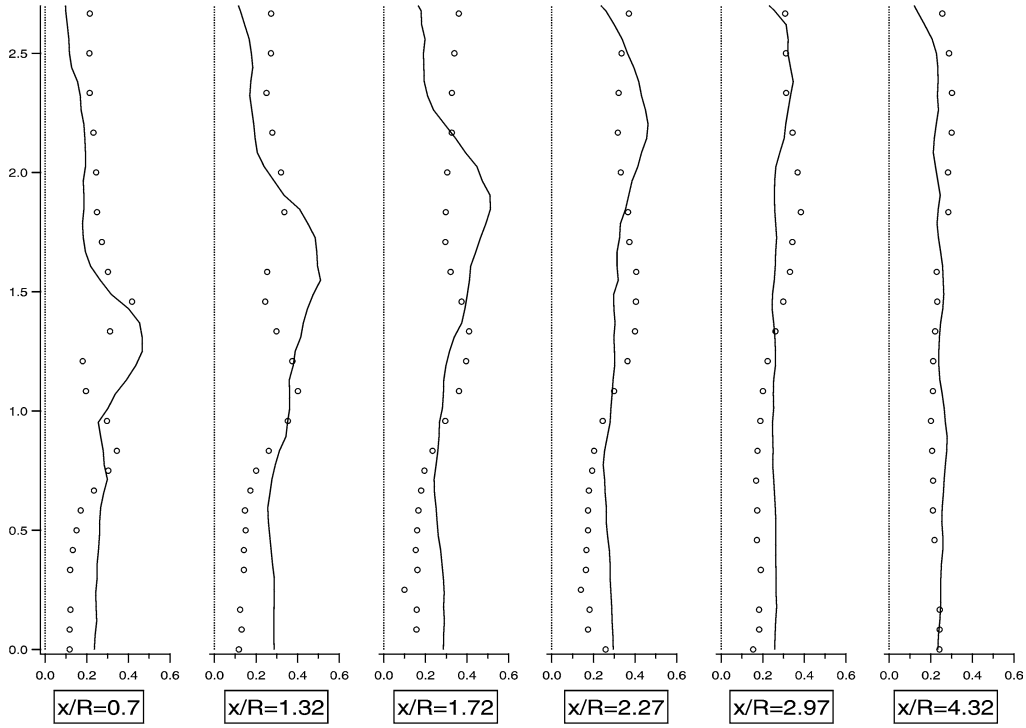


Fig. 25. Reacting flow validation: swirling velocity fluctuations W'/U_{bulk}.

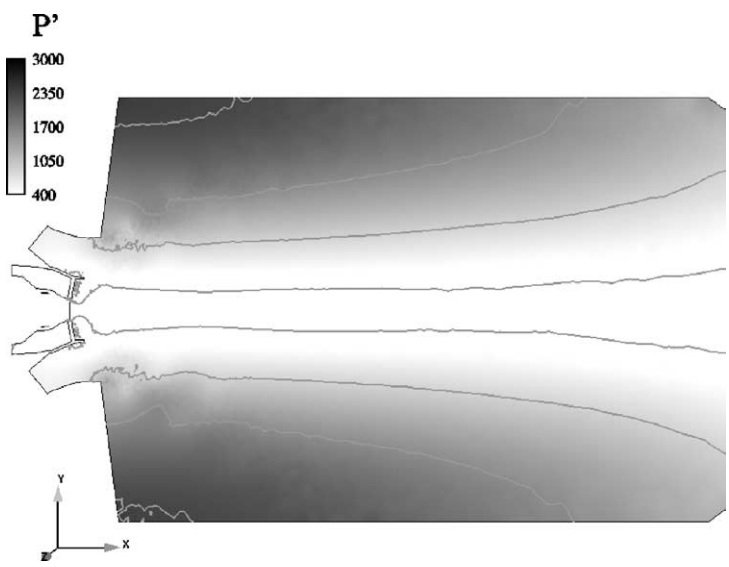


Fig. 26. RMS pressure fluctuations P' in a longitudinal cut for the hot flow (Pa).

References

[1] N. Peters, Turbulent Combustion, Cambridge Univ. Press, London/New York, 2000.
[2] T. Poinsot, D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, R.T. Edwards, Flourtown, PA, 2001.
[3] C. Angelberger, F. Egolfopoulos, D. Veynante, Flow Turb. Combust. 65 (2000) 205–222.
[4] D. Caraeni, C. Bergström, L. Fuchs, Flow Turb. Combust. 65 (2000) 223–244.
[5] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, T. Poinsot, Phys. Fluids 12 (2000) 1843–1863.

[6] P.E. Desjardins, S.H. Frankel, Combust. Flame 119 (1999) 121–133.
[7] J.-P. Légier, T. Poinsot, D. Veynante, in: Proceedings, Summer Program, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., Stanford, CA, 2000, pp. 157–168.
[8] C.D. Pierce, P. Moin, in: 29th Fluid Dynamics Conference, Albuquerque, NM, 1998.
[9] H. Pitsch, L. Duchamp de la Geneste, Proc. Combust. Inst. (2002) 2001–2008.
[10] L. Duchamp de Lageneste, H. Pitsch, CTR Annual Research Briefs (2001) 61–82.
[11] A. Kempf, H. Forkel, J.-Y. Chen, A. Sadiki, J. Janicka, Proc. Combust. Inst. (2000) 35–40.
[12] H. Pitsch, H. Steiner, Proc. Combust. Inst. (2000) 41–49.
[13] P. Sagaut, Large Eddy Simulation for Incompressible Flows, Springer-Verlag, Berlin/New York, 2000.
[14] A. Scotti, C. Meneveau, D.K. Lilly, Phys. Fluids 5 (1993) 2306–2308.
[15] A. Scotti, C. Meneveau, M. Fatica, Phys. Fluids 9 (1997) 1856–1858.
[16] O.V. Vasilyev, T.S. Lund, P. Moin, J. Comput. Phys. 146 (1998) 82–104.
[17] K. Mahesh, G. Constantinescu, S. Apte, G. Iaccarino, F. Ham, P. Moin, in: Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002, pp. 115–142.
[18] Combustion Research Facility Division at Sandia http://www.ca.sandia.gov/crf/index.html.
[19] CFD team at CERFACS http://www.cerfacs.fr/cfd/CFDWeb.html.
[20] F. Nicoud, F. Ducros, Flow Turb. Combust. 62 (1999) 183–200.
[21] D. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, T. Poinsot, in: Proceedings, Summer Program, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998, pp. 61–82.
[22] J.-P. Légier, Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques, PhD thesis, INP Toulouse, 2001.
[23] O. Colin, M. Rudgyard, J. Comput. Phys. 162 (2000) 338–371.
[24] T. Poinsot, S. Lele, J. Comput. Phys. 101 (1992) 104–129.
[25] M. Baum, T.J. Poinsot, D. Thévenin, J. Comput. Phys. 116 (1994) 247–261.
[26] H. Forkel, J. Janicka, Flow Turb. Combust. 65 (2000) 163–175.
[27] H. Pitsch, H. Steiner, Phys. Fluids 12 (2000) 2541–2554.
[28] V.K. Chakravarthy, S. Menon, Flow Turb. Combust. 65 (2000) 133–161.
[29] C. Fureby, S.I. Möller, AIAA J. 33 (1995) 2339.
[30] H.G. Weller, G. Tabor, A.D. Gosman, C. Fureby, Proc. Combust. Inst. 27 (1998) 899–907.
[31] T.D. Butler, P.J. O'Rourke, Proc. Combust. Inst. 16 (1977) 1503–1515.
[32] F. Charlette, D. Veynante, C. Meneveau, Combust. Flame 131 (2002) 159–180.
[33] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, P. Kaufman, W. Krebs, D. Veynante, in: Proceedings, Summer Program, Center for Turbulence Research, Stanford Univ./NASA–Ames, 2002, pp. 333–344.
[34] W.P. Jones, R.P. Lindstedt, Combust. Flame 73 (1988) 222–233.
[35] O. Lucca-Negro, T. O'Doherty, Prog. Energy Combust. Sci. 27 (2001) 431–481.
[36] A.K. Gupta, D.G. Lilley, N. Syred, Swirl Flows, Abacus Press, 1984.
[37] L. Selle, Simulation aux grandes échelles des interactions flamme/acoustique dans un écoulement vrillé, PhD thesis, INP, 2004.

Article 2

"Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids"

V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin and T. Poinsot

parut dans Journal of Computational Physics Volume 202-2 (2004) 710-736

Numerical methods for unsteady compressible multi–component reacting flows on fixed and moving grids

Moureau V. [a,*], Lartigue G. [b], Sommerer Y. [b], Angelberger C. [a], Colin O. [a] and Poinsot T. [c]

[a] *IFP, 1 Avenue du Bois Préau, 92500 Rueil–Malmaison, France*

[b] *CERFACS, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse CEDEX, France*

[c] *IMFT, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France*

Abstract

Deriving high precision schemes to compute turbulent flows on fixed or moving complex grids is becoming a central issue in the DNS (Direct Numerical Simulation) and LES (Large Eddy Simulation) community. The step between classical DNS/LES codes on fixed structured grids and future methods on moving unstructured grids is a significant evolution in terms of numerical methods. For reacting flows, this evolution must also include more precise descriptions of multispecies flows and boundary conditions. This paper describes the development of a LES/DNS method for multispecies reacting flows on moving grids. The theoretical basis for the numerical method, the boundary conditions and the moving grid extension are first discussed. Various tests of the method are then provided on fixed and moving grids for simple reacting and non reacting flows to demonstrate the precision and power of the method in simple reference laminar cases.

Key words: LES, DNS, ALE, realistic thermochemistry, high–order methods, boundary conditions

1 Introduction

The fast development of Large Eddy Simulation (LES) techniques for reacting flows [1,2] is also driving research efforts for specific numerical techniques: this is especially true for gas turbines [3–6] or piston engines for which LES require non dissipative schemes able to handle compressible multi-species flows on fixed or moving grids. These schemes must also provide high-order accuracy even though ensuring such a property on arbitrary grids is more difficult than it is on Cartesian grids classically used for DNS for example. Such schemes can not be straightforward extensions of usual Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) solvers in which the levels of numerical viscosity are too high. Maintaining low numerical dissipation in LES computations requires specific efforts in terms of algorithm [7] but also of boundary conditions formulations [1]:

- There is still some controversy about the type of scheme which can be accepted for LES: while upwind schemes [8–11] are sometimes used, most groups try to use spatially-centered schemes [12–14] because these schemes are not dissipative. This property is usually considered as necessary to avoid damping small turbulent scales (which are essential in reacting flows) even if these schemes are also more sensitive to oscillations. For 'academic' LES in simple geometries, structured meshes can be used and high-order schemes are easily designed. For complex geometries, however, unstructured methods are mandatory and on such grids, constructing high-order schemes becomes much more difficult. Existing LES solvers for unstructured meshes are limited to second-order [7] or third-order [15] methods. The situation is more complex when such solvers must be used on moving meshes: simple

* Corresponding author.
Email address: vincent.moureau@centraliens.net (Moureau V.).

extensions of existing solvers for moving meshes may lead to a loss of the convergence order and an increase of numerical dissipation.

- For compressible reacting flows, specifying boundary conditions becomes critical for LES. The low dissipation of the algorithm required for precision introduces new difficulties: first, errors introduced by approximate boundaries are not damped any more by the scheme (as they were in RANS) so that boundary conditions must generate as few numerical perturbations as possible; second, acoustic waves created by the flow also propagate through the computational domain without damping and must be evacuated through non-reflecting boundaries. Moreover, LES also require to inject turbulence (and sometimes controlled acoustic waves [16]) through inlet boundaries. Methods to reach all these objectives are mostly based on characteristic techniques developed for aerodynamics [1,17–19]. These techniques work for pure gases with constant molecular weights, heat capacities and sound speed. When the gas is a mixture of species, they must be extended to account for variable molecular weights and heat capacities as proposed by Baum et al. [20] for perfect gases or O'Kongo and Bellan [21] for real gases.
- Finally, even the choice of the equations required to describe reacting flows is open to discussion. For a long time, DNS or LES have been restricted to zero heat release flames [22–25] in which fresh and burnt gases had the same temperature: even though this assumption is clearly not satisfied in real flames, such simulations have brought new qualitative information on the physics of turbulent flames. Over the years, multiple other simplifications have appeared in the DNS / LES community: two-dimensional flow [26,27], infinitely fast chemistry, one-step chemistry [27–32], reduced chemistry [33]. Despite the efforts of the DNS/LES community, the precision of the submodels used for DNS or LES is not yet up to what can be done for laminar flames for which precise diffusion models (including the inversion of the diffusion

matrix) and complex chemistry can be taken into account: in most existing DNS or LES, the heat capacity C_p of all species is equal and constant while diffusion is usually modeled with Fick's law. These assumptions lead to erroneous flame temperatures (due to the constant C_p approximation) and flame speeds (due to simplification of transport models) which have no real importance in academic problems for turbulent combustion. However, in the last years, the quest for DNS/LES tools has changed: quantitative computations are now required and this leads to difficult choices because it is not possible yet to incorporate all the necessary physics into existing codes. Certain DNS codes now incorporate full chemistry for simple fuels [34–36]: most LES, however, are limited to simpler descriptions. The present study describes a compromise in terms of complexity, precision and cost which has been validated in multiple cases and compared to other codes: the multispecies characteristics of the flow (variable molecular weights and heat capacities) are fully accounted for, gases are supposed to be perfect, molecular diffusion terms are computed using simplified forms, reduced chemistry schemes can be easily incorporated while preserving the computational parallel efficiency which must remain one of the key features of such codes.

The objectives of this paper are to present the development of a compressible high-order solver for LES of reacting flows on fixed and moving grids. Though the main objective is LES, Direct Numerical Simulations (DNS) of reacting flows can also be achieved with the same tool. The main features of this solver are summarized below:

- Multi-component compressible reacting gas
- Unstructured hybrid meshes
- Explicit time integration
- Second and third-order spatial accuracy for convective terms on fixed and

moving grids

- Characteristic boundary conditions

Section 2 first presents the thermochemistry model and the transport equations. The treatment of the boundary conditions in a multi-species gas is presented in Section 3: using different primitive variables leads to a major simplification of the initial formulation of [20]. The integration of the conservation equations on fixed and moving grids is presented in Section 4 for both finite volume and finite element formulations. From this integration, a second-order Lax-Wendroff like scheme is derived in Section 5 and a third-order Taylor-Galerkin scheme is developed in Section 6. Test cases are then described in Section 8: one-dimensional laminar premixed flame on a fixed grid (Section 8.2), uniform flow on a moving grid (Section 8.3), uniformly accelerated piston (Section 8.4) and measurements of convergence order for scalar and vorticity convection (Section 8.5). Finally, conclusions and perspectives of applications are given in Section 9.

2 Thermochemistry model and transport equations

The variables required for the description of a compressible reacting flow are:

$$U = (m_x, m_y, m_z, \mathcal{E}, \rho_k)^t \tag{1}$$

where $\vec{m} = (m_x, m_y, m_z)^t$ is the momentum vector, $\mathcal{E}$ is the total non-chemical energy density and ρ_k (for $k = 1$ to N) are the partial densities of the N species present in the mixture. The density ρ is not transported by the solver since it is the sum of the partial densities. The total non-chemical energy is the sum

of kinetic energy e_c and thermal energy e_s:

$$\mathcal{E} = \rho\,[e_c + e_s] = \rho\left[\tfrac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) \;+\; \sum_{k=1}^{N} Y_k e_{sk}\right] \tag{2}$$

where Y_k is the mass fraction of species k. The thermal energy e_{sk} of species k is defined by:

$$e_{sk}(T) = \int_0^T C_{vk}(\Theta)\; d\Theta \tag{3}$$

To simplify the computation of the energy from temperature (an operation which must be performed at each time step and for each mesh point), the internal energy of each species is tabulated from data bases [37] every 100K, in a range going from 0K to 5000K. On each 100K range, the heat capacity of any species is constant. The energy at a given temperature is then obtained by linear interpolation. This interpolation also provides a fast method to recover temperature from energy data.

The equation of state relating temperature T, pressure P and density ρ is:

$$P = \rho r T \tag{4}$$

The gas constant of the mixture r is defined from each species gas constant r_k by:

$$r = \sum_{k=1}^{N} Y_k r_k = \sum_{k=1}^{N} Y_k \frac{\mathcal{R}}{W_k} = \frac{\mathcal{R}}{W} \qquad \text{with} \qquad \frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k} \tag{5}$$

where $\mathcal{R} = 8.3143$ J/K/mol is the universal gas constant, W_k is the molar mass of species k and W is the molar mass of the mixture.

The quantities C_p, C_v, r and γ change locally but the usual relations between them still hold:

$$C_p - C_v = r \qquad \frac{r}{C_v} = \gamma - 1 = \beta \tag{6}$$

where $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ is the isentropic coefficient of the mixture.

The equations to solve are the compressible and reacting Navier–Stokes equations, written here in flux-divergence form:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla.\mathcal{F} = \dot{W} \tag{7}$$

where $\nabla.\mathcal{F}$ is the divergence of the fluxes and $\dot{W}$ is the source terms vector. Each component of the fluxes can be decomposed into three terms: inviscid, viscous and LES contributions.

$$\mathcal{F}_{x,y,z} = \mathcal{F}^I_{x,y,z} + \mathcal{F}^V_{x,y,z} + \mathcal{F}^{LES}_{x,y,z} \tag{8}$$

The system of conservative equations (7) can handle both DNS and LES. In the second case the vector U is the vector of *filtered* variables. For simplicity, only DNS cases will be discussed here ($\mathcal{F}^{LES}_{x,y,z} = 0$), as LES introduces no particular difficulty from the point of view of numerical methods compared to DNS.

The inviscid flux $\mathcal{F}^I$ is defined by:

$$\mathcal{F}^I_x = \begin{pmatrix} \rho u u + P \\ \rho u v \\ \rho u w \\ \rho u E + P u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \mathcal{F}^I_y = \begin{pmatrix} \rho v u \\ \rho v v + P \\ \rho v w \\ \rho v E + P v \\ \rho_k v \end{pmatrix} \text{ and } \mathcal{F}^I_z = \begin{pmatrix} \rho w u \\ \rho w v \\ \rho w w + P \\ \rho w E + P w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \tag{9}$$

The viscous fluxes are modeled by:

$$\mathcal{F}_i^V = \begin{pmatrix} -\tau_{ix} \\ -\tau_{iy} \\ -\tau_{iz} \\ -(u\tau_{ix} + v\tau_{iy} + w\tau_{iz}) + q_i \\ \mathcal{J}_{k,i} \end{pmatrix} \tag{10}$$

for $i = x$, y or z. Here, q is the heat flux and $\mathcal{J}_k$ the diffusive flux of the species k. The stress tensor τ is defined by:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{11}$$

where the molecular viscosity μ is a function of the temperature (through a Sutherland or a power law). This coefficient is defined for the mixture only: there is no influence of the composition on the viscosity.

The diffusive flux of species k is defined by:

$$\mathcal{J}_{k,i} = \rho Y_k V_{k,i} \tag{12}$$

where $V_{k,i}$ is the ith component of the diffusion velocity of the species k. To ensure mass conservation each component of the flux must verify:

$$\sum_{k=1}^{N} Y_k V_{k,i} = 0 \tag{13}$$

The diffusion velocity $V_{k,i}$ is modeled by the Hirschfelder and Curtis approximation [38]:

$$X_k V_{k,i} = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \tag{14}$$

where X_k and D_k are respectively the molar fraction and the diffusion coefficient of the species k. This coefficient is computed from the viscosity μ

as:

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \tag{15}$$

The Schmidt number Sc_k is a constant depending on the species. A major issue [1] is that this formulation does not satisfy (13), i.e. the global mass conservation, if the Schmidt numbers Sc_k are not equal for all species. In this case, a correction velocity V_i^C must be added to the diffusion velocity $V_{k,i}$ in (12) to satisfy the continuity equation:

$$\mathcal{J}_{k,i} = \rho Y_k \left(V_{k,i} + V_i^C \right) \tag{16}$$

This correction velocity is defined by:

$$V_i^C = \sum_{j=1}^{N} D_j \frac{W_j}{W} \frac{\partial X_j}{\partial x_i} \tag{17}$$

The effects of the simplification of the diffusion matrix using the Hirschfelder model and a correction velocity are discussed in [39] or [40]. These effects are very small in most flames using air as oxidizer. The final expression for the species diffusive flux is thus:

$$\mathcal{J}_{k,i} = -\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \rho Y_k \left(\sum_{j=1}^{N} D_j \frac{W_j}{W} \frac{\partial X_j}{\partial x_i} \right) \tag{18}$$

which is compatible with total mass conservation.

Finally the heat flux q is defined by:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N} \mathcal{J}_{k,i} h_{sk} \tag{19}$$

The first term is the heat flux due to the classical heat conduction process (Fourier law) while the second term is the heat flux due to the diffusion of

species having different enthalpies. The heat conduction coefficient λ is computed from the viscosity μ as:

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \tag{20}$$

where the Prandtl number Pr is assumed to be constant: this property is very well satisfied in most air flames.

The source terms vector $\dot{W}$ is defined by:

$$\dot{W} = (0, 0, 0, \dot{\omega}_T, \dot{\omega}_k)^t \tag{21}$$

where $\dot{\omega}_k$ is the net mass production of the species k due to combustion and $\dot{\omega}_T$ is the associated heat release given by:

$$\dot{\omega}_T = \sum_{k=1}^{N} \Delta h^0_{f,k} \dot{\omega}_k \tag{22}$$

The standard formation enthalpy $\Delta h^0_{f,k}$ of the species k is also obtained from data bases [37].

The modeling of chemistry is done using classical Arrhenius laws [1,41].

3 Characteristic Boundary Conditions for multi–component mixtures

Specifying boundary conditions is a critical part in compressible DNS and LES codes [17,19,42]. Characteristic methods are commonly used for compressible aerodynamics codes but require extensions for reacting flows where the gas is a mixture of species for which quantities such as C_p, C_v or r change locally. The method described here is a new formulation of the NSCBC procedure

proposed by Poinsot and Lele [43] for mono–component gas and extended by Baum et al. [20] to multi–component mixtures, i.e. a mixture of perfect gases. If the state equation of each gas can not be approximated by a perfect gas law, this formulation can be modified as done for real gases in [21] but the present study does not extend to this case. Note also that, even though the present solver can handle moving grids, the present boundary condition treatment is valid only for fixed boundaries. Imposing boundary conditions on a moving boundary is not necessary in most practical applications (except for the walls of piston engines which can be handled in a simpler way and do not require characteristic treatments).

More generally, the method described here is sufficient for engine computations but would have to be complemented by the use of 'sponge' domains and higher-order wave expansions on the boundaries to handle for example aeroacoustic problems [44–46] which require a higher accuracy on boundaries.

3.1 Extension of the NSCBC method

The NSCBC method proposed in [20] can be ill–posed: there are $5+N$ variables but one more equation (the relation $\sum Y_k = 1$ or equivalently $\rho = \sum \rho_k$). To avoid this problem, the solution is then either to keep the conservation equation for ρ and to suppress one species equation or to keep all species equations but to suppress the equation for ρ. Here, the choice has been made to keep all species and to leave ρ. The system of equations that is obtained is now perfectly "symmetric" as far as species are concerned.
The second major difference compared to [20] is the choice of primitive variables. The primitive variable associated to energy is not temperature but pressure. For the species, the partial densities ρ_k are taken as primitive variables

instead of mass fractions Y_k. This simplifies drastically the formulation.

3.2 Recasting equations from conservative to primitive variables

The Navier–Stokes equations (7) have previously been written in terms of flux of conservative variables. This form is very well suited for the discretisation in the finite volume context. However, for deriving boundary conditions, it is easier to rewrite the equations in the quasi–linear primitive form. Moreover, the velocity components are written in a generic direct orthonormal basis $(\vec{n}, \vec{t}_1, \vec{t}_2)$, in which $\vec{u} = (u_n, u_{t1}, u_{t2})^t$. The $\vec{n}$ direction corresponds to the outgoing normal vector on boundaries. Characteristic analysis [17,18] leads to a new form of the conservation equations:

$$\frac{\partial V}{\partial t} + d = T \tag{23}$$

where $V = (u_n, u_{t1}, u_{t2}, P, \rho_1, \ldots, \rho_N)^t$ is the primitive variable vector. The d term (also called normal term) represents the contributions of the derivatives along $\vec{n}$:

$$\begin{pmatrix} d_{u_n} \\ d_{u_{t1}} \\ d_{u_{t2}} \\ d_P \\ d_{\rho_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n \frac{\partial u_n}{\partial \vec{n}} & + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \vec{n}} \\ u_n \frac{\partial u_{t1}}{\partial \vec{n}} & \\ u_n \frac{\partial u_{t2}}{\partial \vec{n}} & \\ u_n \frac{\partial P}{\partial \vec{n}} & + \rho c^2 \frac{\partial u_n}{\partial \vec{n}} \\ u_n \frac{\partial \rho_k}{\partial \vec{n}} & + \rho_k \frac{\partial u_n}{\partial \vec{n}} \end{pmatrix} \tag{24}$$

where $\frac{\partial \alpha}{\partial \vec{n}} = \frac{\partial \alpha}{\partial x} n_x + \frac{\partial \alpha}{\partial y} n_y + \frac{\partial \alpha}{\partial z} n_z$.
This can be written in matrix notation:

$$d = E_{\vec{n}} . \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} \tag{25}$$

where $E_{\vec{n}}$ is the Jacobian matrix of the system:

$$E_{\vec{n}} = \begin{pmatrix} u_n & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & u_n & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & u_n & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \rho c^2 & 0 & 0 & u_n & 0 & \dots & 0 \\ \rho_1 & 0 & 0 & 0 & u_n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_N & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & u_n \end{pmatrix} \tag{26}$$

The T term represents all the other contributions (tangential, diffusion, reaction).

3.3 The characteristic variables

The matrix $E_{\vec{n}}$ can be diagonalised and this decomposition allows to write convection equations for the waves amplitudes:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \lambda \frac{\partial A}{\partial \vec{n}} = T_A \tag{27}$$

where A is the wave amplitude, λ is the wave convection velocity and T_A is the sum of all non-hyperbolic terms associated to the wave.
The amplitudes of the $4 + N$ waves can be written as:

$$\begin{pmatrix} \partial A_+ \\ \partial A_- \\ \partial A_{t1} \\ \partial A_{t2} \\ \partial A_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial u_n + \frac{1}{\rho c} \partial P \\ \partial u_n - \frac{1}{\rho c} \partial P \\ \partial u_{t1} \\ \partial u_{t2} \\ -\frac{Y_k}{c^2} \partial P + \partial \rho_k \end{pmatrix} \tag{28}$$

and the associated convection velocities are:

$$\begin{pmatrix} \lambda_+ \\ \lambda_- \\ \lambda_{t1} \\ \lambda_{t2} \\ \lambda_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n + c \\ u_n - c \\ u_n \\ u_n \\ u_n \end{pmatrix} \tag{29}$$

Keeping the notation $\mathcal{L} = \lambda \frac{\partial A}{\partial \vec{n}}$ of [43] for the waves amplitude variations, the normal term d of (24) is:

$$\begin{pmatrix} d_{u_n} \\ d_{u_{t1}} \\ d_{u_{t2}} \\ d_P \\ d_{\rho_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) \\ \mathcal{L}_{t1} \\ \mathcal{L}_{t2} \\ \frac{\rho c}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) \\ \frac{\rho_k}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_k \end{pmatrix} \tag{30}$$

The acoustic waves $\mathcal{L}_+$ and $\mathcal{L}_-$ are convected respectively at the velocity $u_n + c$ and $u_n - c$. All other waves are convected with the flow at the velocity u_n. The waves $\mathcal{L}_{t1}$ and $\mathcal{L}_{t2}$ are known as shear waves. The remaining waves $\mathcal{L}_k$ (for $k = 1$ to N) are species waves. No wave can easily be identified with the classical entropy wave because density is not directly solved for. However, all species waves $\mathcal{L}_k$ have the same convection velocity u_n and any linear combination of these waves is still a wave convected at the velocity u_n. For example

$$\mathcal{L}_S = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{L}_k = u_n \left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial P}{\partial \vec{n}} + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{n}} \right) \tag{31}$$

is proportional to the entropy wave given by Poinsot and Lele in [43].

3.4 The LODI relations

The central idea of characteristic methods for boundary conditions is to identify the outgoing and incoming waves crossing a boundary. The outgoing waves carry information from the interior of the domain and must be kept as computed by the numerical scheme. However, the incoming waves carry information coming from the outside (i.e. controlled by the boundary condition). They can not be computed from interior points data. The principle of the present method is to infer the amplitude of the incoming waves from the amplitude of the outgoing waves and from some appropriate LODI (Local One Dimensional Inviscid) relations [43]. These LODI relations are obtained by writing (23) near the boundary as if the flow was locally inviscid and one-dimensional. Of course, at this point, the physical behaviour of the boundary must be taken into account to choose which LODI relation should be used. Some examples of LODI relations are given below:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\rho c}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) = 0 \tag{32}$$

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} + \tfrac{1}{2}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) = 0 \tag{33}$$

$$\frac{\partial u_{t1}}{\partial t} + \mathcal{L}_{t1} = 0 \tag{34}$$

$$\frac{\partial u_{t2}}{\partial t} + \mathcal{L}_{t2} = 0 \tag{35}$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\rho_k}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_k = 0 \tag{36}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_S = 0 \tag{37}$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{1}{\rho}(\mathcal{L}_k - Y_k \mathcal{L}_S) = 0 \tag{38}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{1}{\rho}(r\mathcal{L}_S + \sum r_k \mathcal{L}_k) = 0 \tag{39}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\beta T}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) - \frac{T}{\rho r}\sum r_k \mathcal{L}_k = 0 \tag{40}$$

Additional LODI equations can be written for enthalpy, entropy, momentum or for normal gradients.

3.5 Example of practical implementation

From the LODI relations, it is straightforward to write various characteristic boundary conditions using the technique described in [43]. Only a single example is given here: a subsonic inlet with time–varying velocity, temperature and composition. For a subsonic inlet, only the backward travelling acoustic wave $\mathcal{L}_-$ is leaving the computational domain while the $3+N$ other waves are entering it. Since $\mathcal{L}_-$ leaves the domain it can be evaluated using (28) and one-sided derivatives. To determine the $3+N$ incoming waves $\mathcal{L}_+$, $\mathcal{L}_{t1}$ and $\mathcal{L}_{t2}$, the nature of the boundary suggests to use the LODI relations (33), (34) and (35).

$$\mathcal{L}_+ = \mathcal{L}_- - 2\frac{\partial u_n^t}{\partial t} \tag{41}$$

$$\mathcal{L}_{t1} = -\frac{\partial u_{t1}^t}{\partial t} \tag{42}$$

$$\mathcal{L}_{t2} = -\frac{\partial u_{t2}^t}{\partial t} \tag{43}$$

The t superscript is here to remind that the values in the temporal derivatives are the "target" values to impose on the boundary (for example, a turbulent or an acoustic signal). To find the N remaining $\mathcal{L}_k$ waves, (40) is used to have:

$$\sum_{k=1}^{N} r_k \mathcal{L}_k = \frac{\rho r}{T}\left(\frac{\partial T^t}{\partial t} + \frac{\beta T}{c}(\mathcal{L}_- - \frac{\partial u_n^t}{\partial t})\right) \tag{44}$$

Introducing this value in (39) gives for the entropy wave:

$$\mathcal{L}_S = -\frac{\rho}{T}\frac{\partial T^t}{\partial t} - \rho\sum_{k=1}^{N}\frac{r_k}{r}\frac{\partial Y_k^t}{\partial t} + \frac{\rho\beta}{c}\left(\frac{\partial u_n^t}{\partial t} - \mathcal{L}_-\right) \tag{45}$$

and finally, using (38), the species waves are:

$$\mathcal{L}_k = Y_k \mathcal{L}_S - \rho \frac{\partial Y_k^t}{\partial t} \tag{46}$$

The $3 + N$ waves $\mathcal{L}_+$, $\mathcal{L}_{t1}$, $\mathcal{L}_{t2}$ and $\mathcal{L}_k$ are now specified. These values and the scheme-computed value of $\mathcal{L}_-$ can then be put back in the normal terms vector d and the variables on the boundary can be updated for the next time-step using (23). An additional difficulty associated to the use of characteristic boundary conditions is the possible drift of mean values. This drift can be controlled in the present approach by adding corrective terms in (41) to (43) and (46). This corrective treatment follows the methods proposed in [1,42,43].

4 Integration of the conservation equations on dynamic meshes

Solving the Navier–Stokes equations on a deforming domain $\Omega(t)$ is usually achieved using a body-force method [47] or an Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method [48]. The body-force method consists of imposing a given speed on an arbitrary surface which does not necessarily coincide with the mesh. Complex deforming geometries can be simulated on fixed Cartesian grids with this method but an important drawback is that imposing characteristic boundary conditions as described in the previous section is very difficult. An appealing alternative is the ALE method in which each mesh node i has a given displacement speed $\dot{X}_i(t)$ and the boundaries of the computational domain $\partial\Omega(t)$ coincide with mesh vertices. In conjunction with the ALE approach, the characteristic method developed in Section 3 can be used for inlets and outlets, which are fixed in most simulations of real applications (gas turbines, piston engines). The moving parts (blades, pistons) are generally rigid walls and can therefore be considered as being perfectly reflective. This kind

of acoustic boundary condition can be easily achieved by imposing directly the velocity. For this reason, no specific acoustic boundary condition for moving walls was developed.

This section presents the formalism used to integrate the Navier-Stokes equations on moving grids for finite-volume (FV) and finite-element (FE) methods. The originality of the following approach is the generalization of existing fixed-grid schemes to moving grids. In the case of fluid-structure interactions or free-surface flows, the grid velocities and the mesh deformations may reach high values and specific numerical schemes must be designed. For example, Masud et al. [49] and Tezduyar et al. [50] have described finite-element schemes adapted for such flows. Concerning gas turbines and piston engines, the position and the velocity of the boundaries are always known and the grid velocities and the mesh deformations are much lower. In this case, fixed-grid numerical schemes are useable provided that they have been modified to handle moving meshes. This can be done by introducing a time dependency of the volumes and of the test functions. If this generalization is rigorously done, the resulting schemes should have the same numerical properties than their fixed-grid equivalents.

Considering the Navier-Stokes equations written in the partial derivative form:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla.(\mathcal{F}^I + \mathcal{F}^V) = \dot{W} \tag{47}$$

the source terms $\dot{W}$ do not involve spatial gradients and their implementation in an explicit code is straightforward. These terms are therefore left out of the remainder of the derivation. Due to the different nature of the inviscid fluxes $\mathcal{F}^I$ and viscous fluxes $\mathcal{F}^V$, two different types of numerical schemes must be applied on each. The diffusion fluxes $\mathcal{F}^V$ do not raise specific difficulties and

are treated here with a standard second–order centered scheme. The critical term for LES and DNS is the inviscid flux $\mathcal{F}^I$ and the numerical schemes presented here only apply to this inviscid part. From now on, the inviscid fluxes $\mathcal{F}^I$ are simply written $\mathcal{F}$. The conservative variables U and the fluxes $\mathcal{F}$ are considered to be functions of the grid position and time: $U(X,t)$ and $\mathcal{F}(X,t)$. To simplify the derivation of the schemes, the grid velocity $\dot{X}_i(t)$ is supposed constant during a computational time step Δt. Since the time steps are small compared to the simulation time, it does not limit the generality of the method.

4.1 Finite Volume (FV) schemes

The spatial integration for FV schemes is developed for arbitrarily node-centered control volumes V_i. The integration of (47) with Leibniz transport theorem gives:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} U dV dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_i(t)} \nabla.(\mathcal{F} - \dot{X}U) dV dt = 0 \tag{48}$$

Referring to the second term of the left hand-side of (48) as $\Delta t V_i^{n+\frac{1}{2}} R_i$ and using the FV approximation for the first term, gives:

$$V_i^{n+1} U_i^{n+1} - V_i^n U_i^n = -\Delta t V_i^{n+\frac{1}{2}} R_i \tag{49}$$

Eq. (49) is a generic form for ALE one-step FV schemes where the expression of the residual R_i determines the scheme type. The use of the volume $V_i^{n+\frac{1}{2}}$ is justified in Section 5.

4.2 Finite Element (FE) schemes

After choosing suitable scalar test functions ϕ_i for $1 \leq i \leq N_p$, where N_p is the number of mesh points, and applying the Galerkin method, (47) becomes:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega(t)} \phi_i \frac{\partial U}{\partial t} dV dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega(t)} \phi_i \nabla . \mathcal{F} dV dt = 0 \tag{50}$$

The scalar test functions depend only on the node position. Thus they satisfy a conservation relation:

$$\frac{D\phi_i}{Dt} = 0 \qquad \text{where} \qquad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \dot{X}.\nabla \tag{51}$$

Eq. (51) and Leibniz transport theorem leads to:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \phi_i U dV dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega(t)} \phi_i \nabla . (\mathcal{F} - \dot{X} U) dV dt = 0 \tag{52}$$

Then U is decomposed on the scalar test functions base as follows:

$$U(X) = \sum_{k=1}^{N_p} \phi_k(X) U_k \tag{53}$$

Defining the mass matrix:

$$M_{ik} = \int_{\Omega} \phi_i \phi_k dV \tag{54}$$

and the FE residual S:

$$\Delta t S = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega(t)} \phi_i \nabla . (\mathcal{F} - \dot{X} U) dV dt \tag{55}$$

the generic form for ALE one-step FE schemes is:

$$\sum_{k=1}^{N_p} M_{ik}^{n+1} U_k^{n+1} - \sum_{k=1}^{N_p} M_{ik}^{n} U_k^{n} = -\Delta t S \tag{56}$$

The exact formulation of S determines the scheme type.

5 Formulation of the FV Lax–Wendroff scheme on dynamic meshes

The Lax–Wendroff scheme is the simplest second-order centered finite-volume scheme. On fixed grids, it is obtained by performing a time centered second-order Taylor development of U and replacing the temporal derivatives with spatial derivatives. For dynamic meshes, the Taylor developments must be done after the spatial integration in order to take into account the mesh movement.

5.1 Derivation

The residual R_i of (49) is written:

$$\Delta t V_i^{n+\frac{1}{2}} R_i = \int_{t^n}^{t^{n+1}} Q_i(t) dt \tag{57}$$

where

$$Q_i(t) = \int_{V_i(t)} \nabla.(\mathcal{F} - \dot{X} U) dV \tag{58}$$

As the scheme is centered, $Q_i(t)$ is developed at the second order in time around $t^{n+\frac{1}{2}}$:

$$Q_i(t) = Q_i^{n+\frac{1}{2}} + (t - t^{n+\frac{1}{2}}) \frac{dQ_i}{dt} + O[(t - t^{n+\frac{1}{2}})^2] \tag{59}$$

Consequently the residual is expressed as follows:

$$\Delta t V_i^{n+\frac{1}{2}} R_i = \Delta t Q_i(t^{n+\frac{1}{2}}) + O[\Delta t^3] \approx \Delta t \int\limits_{V_i^{n+\frac{1}{2}}} \nabla.(\mathcal{F}^{n+\frac{1}{2}} - \dot{X} U^{n+\frac{1}{2}}) dV \quad (60)$$

For the scheme to remain explicit, fluxes and conservative variables of Eq. (60) must be expanded in time as:

$$U^{n+\frac{1}{2}} = U^n + \frac{\Delta t}{2} \left.\frac{\partial U}{\partial t}\right|_{t^n} + \frac{\Delta t}{2}(\dot{X} \cdot \vec{\nabla}) U^n \quad (61)$$

$$\mathcal{F}^{n+\frac{1}{2}} = \mathcal{F}^n + \frac{\Delta t}{2} \left.\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t}\right|_{t^n} + \frac{\Delta t}{2}(\dot{X} \cdot \vec{\nabla}) \mathcal{F}^n \quad (62)$$

Introducing the flux Jacobian A and using (47), the final formulation of the residual is obtained:

$$\begin{aligned} R_i = & \frac{1}{V_i^{n+\frac{1}{2}}} \int\limits_{V_i^{n+\frac{1}{2}}} \nabla.(\mathcal{F}^n - \dot{X} U^n) dV \\ & - \frac{\Delta t}{2 V_i^{n+\frac{1}{2}}} \int\limits_{V_i^{n+\frac{1}{2}}} \nabla.[A^n - I\dot{X}] \left(\nabla.(\mathcal{F}^n - \dot{X} U^n) + U^n (\nabla.\dot{X}) \right) dV \end{aligned} \quad (63)$$

Eq. (63) corresponds to the time integrated formulation of the FV Lax–Wendroff schemes. To obtain the discrete formulation, the spatial integrations have to be replaced by suitable FV approximations.

5.2 Interpretation

The ALE formulation of the Lax–Wendroff scheme (63) differs from the classical scheme on two main points. The first concerns the integration volumes which are taken at the middle of the time step. Recalling that Lax–Wendroff is a centered scheme justifies the use of these volumes. The second point is the

emergence of correcting terms of two types:

- $-\dot{X}U^n$ for the fluxes and $-I\dot{X}$ for the Jacobian,
- volumes in $V_i^{n+1}U_i^{n+1} - V_i^nU_i^n$ in (49) and $U^n(\nabla.\dot{X})$ in the second order operator of (63).

The first terms take into account the movement of the nodes. The second terms come from the mesh dilatation. The term $\nabla.\dot{X}$ appears indeed in the geometrical relation:

$$V_i^{n+1} - V_i^n = \Delta t \int_{V_i^{n+\frac{1}{2}}} (\nabla.\dot{X})dV \tag{64}$$

The correcting terms ($-I\dot{X}$ and $U^n(\nabla.\dot{X})$) in the second-order operator of (63) are non-intuitive terms required to maintain the accuracy of the method.

6 Formulation of the TTGC scheme on dynamic meshes

TTGC is a two-step Taylor-Galerkin FE scheme developed by Colin et al. [15] that provides a third-order spatial and temporal accuracy. It has been specifically written for LES applications by minimizing the numerical dissipation of the small scales. On fixed grids this scheme is written under partial derivative form:

$$\tilde{U}^n = U^n + \alpha\Delta t\frac{\partial U}{\partial t} + \beta\Delta t^2\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \tag{65}$$

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t\frac{\partial \tilde{U}}{\partial t} + \gamma\Delta t^2\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \tag{66}$$

On fixed grids, the Galerkin method is applied to these equations and suitable approximations are made to obtain the discrete spatial operators. However,

for dynamic meshes the Galerkin method cannot be directly applied to (65) and (66). Consequently the derivation starts from (49) where the Galerkin method has already been applied and the mesh movement has been taken into account. The discretisation is done as if the two steps were two time steps of duration $\alpha\Delta t$ $(0 < \alpha < 0.5)$ and Δt respectively. Then the same methodology as the Lax–Wendroff scheme is used. The Taylor developments are done in the time integral introducing the Jacobian and paying attention to the development coefficients. Finally the scheme takes the time integrated form:

$$\tilde{M}^{n+\alpha}\tilde{U} - M^n U^n = -\Delta t \left[\alpha L^{n+\frac{\alpha}{2}}(U^n) + \Delta t \beta L L^{n+\frac{\alpha}{2}}(U^n)\right] \tag{67}$$

$$M^{n+1}U^{n+1} - M^n U^n = -\Delta t \left[L^{n+\frac{1}{2}}(\tilde{U}^n) + \Delta t \gamma L L^{n+\frac{1}{2}}(U^n)\right] \tag{68}$$

where

$$L^{n+\frac{\alpha}{2}}(U^n) = \int\limits_{\Omega^{n+\frac{\alpha}{2}}} \phi_i \nabla.(\mathcal{F}^n - \dot{X}U^n) dV \tag{69}$$

$$LL^{n+\frac{\alpha}{2}}(U^n) = \int\limits_{\Omega^{n+\frac{\alpha}{2}}} \phi_i \nabla.[A^n - I\dot{X}] \left(\nabla.(\mathcal{F}^n - \dot{X}U^n) + U^n(\nabla.\dot{X})\right) dV \tag{70}$$

When writing $\dot{X} = 0$ in (69) and (70), the fixed grid method is recovered. Compared to the Lax–Wendroff scheme on moving grids the same correcting terms appear except $V_i^{n+1}U_i^{n+1} - V_i^n U_i^n$ which becomes $M^{n+1}U^{n+1} - M^n U^n$.

7 Geometric conservation properties of the schemes

The integration of the Navier–Stokes equations on fixed meshes requires special care to ensure the exact conservation of quantities as mass or momentum.

On dynamic grids, extra geometric properties must also be satisfied to conserve the surfaces and the volumes during the computation. Farhat [51] has shown that satisfying this set of properties called the Geometric Conservation Law (GCL) is a necessary condition for first-order time accuracy. Schemes which do not verify this law, generate non-physical perturbations.

As the numerical scheme, the GCL can be written under many forms : partial derivative form (or continuous), time integrated form, time and space integrated form (or discrete form). Each form of the GCL (CGCL, TIGCL and DGCL) is associated to a different level of discretisation. The most important form is the discrete one (DGCL) which is involved in the numerical solver. Moreover these forms are different depending on the formalism (FV or FE).

This section demonstrates that the numerical schemes developed on dynamic meshes in the previous sections satisfy the different forms of the GCL.

7.1 FV forms of the GCL

For every mobile volume in the computational domain the FV continuous GCL (CGCL) is written:

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{V(t)} dV = \int\limits_{\partial V(t)} \dot{X}.d\vec{S} = \int\limits_{V(t)} \nabla.\dot{X}dV \tag{71}$$

After time-integration, (71) becomes:

$$V^{n+1} - V^n = \int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} \int\limits_{\partial V(t)} \dot{X}.d\vec{S}dt \tag{72}$$

Following the main hypothesis that $\dot{X}$ is constant during a time step, the surface vectors $d\vec{S}$ vary linearly in time. Consequently, (72) is equivalent to

the time integrated GCL (TIGCL) :

$$V^{n+1} - V^n = \Delta t \int\limits_{\partial V^{n+\frac{1}{2}}} \dot{X}.d\vec{S} = \Delta t \int\limits_{V^{n+\frac{1}{2}}} \nabla.\dot{X} dV \tag{73}$$

Replacing the spatial integrals of (73) by exact discrete summations leads to the discrete form of the GCL (DGCL).

Showing that the Lax–Wendroff scheme developed in Section 5 satisfies the GCL is done by considering a uniform flow $U(X,t) = U_0$. In this case (48) leads directly to the CGCL and (49) and (63) lead to the TIGCL. The verification of the DGCL is subordinated to the discretisation of the spatial operators of the scheme.

7.2 FE forms of the GCL

For FE schemes the CGCL takes the form :

$$\frac{d}{dt} \int\limits_{\Omega(t)} \phi_i dV = \int\limits_{\Omega(t)} \phi_i \nabla.\dot{X} dV \tag{74}$$

During a time step the test functions and the grid velocity only depend on the mesh position implying:

$$\frac{D}{Dt}\left(\phi_i \nabla.\dot{X}\right) = 0 \tag{75}$$

This relation is used to replace the right-hand term of (74) and obtain the FE TIGCL:

$$\int\limits_{\Omega^{n+1}} \phi_i dV - \int\limits_{\Omega^n} \phi_i dV = \Delta t \int\limits_{\Omega^{n+\frac{1}{2}}} \phi_i \nabla.\dot{X} dV \tag{76}$$

The same methodology as for the Lax–Wendroff scheme is used. When the flow is uniform :

$$U_i = \omega_0 = ((\rho u)_0, (\rho v)_0, (\rho w)_0, (\rho E)_0, (\rho Y_k)_0)^t \quad \text{for each node } i \tag{77}$$

Eq. (50) leads to the FE form of the CGCL. For the TIGCL, the mass matrix multiplied by U gives:

$$(MU)_k = \left(\omega_0 \sum_{i=1}^{N_p} \int_\Omega \phi_i \phi_k d\Omega \right)_k = \left(\omega_0 \int_\Omega \phi_k d\Omega \right)_k \tag{78}$$

Therefore Eq. (78) and (67) to (70) lead to (76). It means that the TTGC scheme on dynamic meshes satisfies the TIGCL. The verification of the DGCL depends on the discretisation of the spatial operators in Eq. (69) and (70).

8 Validation test cases

8.1 Note on the solver used for the validation test cases

All the previous developments have been implemented in an existing solver: the AVBP code (jointly developed by IFP and CERFACS). Results presented below have all been obtained with this solver.

8.2 One dimensional flame

The aim of this test is to check the accuracy of both the thermochemistry model and the boundary conditions on a fixed grid. A one-dimensional methane / air flame with 6 species and 2 reactions is simulated (see [52] for more details

about this scheme):

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O \tag{79}$$

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons CO_2 \tag{80}$$

The inlet and the outlet are non-reflecting. The main parameters of this computation are given in Table 1. After a transient time following the initialization where acoustic waves are evacuated by the boundary conditions, the computation converges and the steady solution is plotted in Fig. 1 and Fig. 2. A solution obtained with the PREMIX tool from the CHEMKIN package is also given as a reference. The PREMIX solver is the reference code for the simulation of one dimensional laminar flames with complex transport and chemistry. Figures 1 and 2 show that the temperature and species mass fractions profiles predicted by AVBP and PREMIX are very close. The maximum flame temperatures are nearly the same for AVBP (2260 K) and PREMIX (2252 K). The flame speeds predicted by AVBP (38.06 cm/s) and PREMIX (36.66 cm/s) also match very well, confirming that the level of precision used for thermodynamic and chemical data is sufficient. The small differences between the two codes may be explained by the numerical method, the thermodynamic databases and the computation of the diffusion coefficients that are treated differently in the two codes. Finally, the time evolutions of inlet and outlet pressure are presented in Fig. 3 to show the non-reflecting character of the boundary conditions: a first wave due to the initialization reaches both outlet and inlet at $t = 2$ ms, it leaves the domain through the boundaries and no reflection takes place. After 5 ms, the acoustic activity at both ends of the domain is zero and both pressures are constant.

8.3 Uniform flow

Simulating this case allows to check if a numerical scheme really satisfies the discrete form of the GCL. It consists of a closed box with a uniform mixture initially at rest. The boundaries of the box are fixed but the mesh points are moving. The initial meshes used in this case are an unstructured triangular grid (TRI) and a regular quadrangular grid (QUAD). The deformation law of the mesh is a periodic radial contraction-expansion distortion illustrated in Fig. 4. The simulation time corresponds to hundred periods τ_D of the deformation law. For schemes that satisfy the discrete GCL the flow should remain uniformly at rest. An estimation of the numerical error is thus defined by:

$$\text{error} = \frac{K}{\frac{1}{\tau_D}\int_{\tau_D} < \frac{1}{2}|\dot{X}|^2 > dt} \tag{81}$$

which is the ratio of the mean kinetic energy K of the flow and a mean grid kinetic energy averaged in time. Figure 5 shows this error for different schemes and meshes: if it remains equal to zero the DGCL criterion is satisfied. The tests performed confirm the theoretical analysis from the previous section: the DGCL is satisfied for all combinations, except for TTGC on irregular bilinear elements. However even in this case, the error is small, leading only to negligible perturbations.

8.4 Uniformly Accelerated Piston

A uniformly accelerated piston (UAP) induces an acoustic wave (see Fig. 6) for which analytical solutions have been given by Landau and Lifchitz [53]. The simulation time is limited by the reflection of the wave on the opposite wall to the piston and by the piston speed which must remain small compared to

the speed of sound in order to avoid creating a shock. The Lax–Wendroff and TTGC schemes are tested on two meshes composed of regular triangles (TRI) or regular quadrangles (QUAD) respectively. The elements remain regular with time as the meshes are uniformly distorted. For each scheme, five velocity profiles at different times are compared to the analytical solution. Results are presented in Fig. 7. A close-up on the last profiles is presented in Fig. 8. Note that the piston is initially located at $x = 1$m and is moving towards $x = 0$m. As expected the schemes give results very close to the analytical solutions, thus validating the ALE formulations. Figure 8 shows that the Lax–Wendroff scheme behaves more like a low-pass filter than TTGC, underlining the higher precision of the latter.

8.5 Convergence order measurements

8.5.1 Error analysis for the Lax-Wendroff scheme

The Navier-Stokes equations can not be solved directly and must be discretised in space and time to find approximated solutions. Errors introduced by this discretisation can be analysed and measured to estimate the quality of numerical schemes. Concerning the convective schemes, this kind of error analysis is usually done for the 1D advection equation for simplicity reasons:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{82}$$

where a is a constant.

For the Lax-Wendroff scheme, the time discretisation is obtained by a second-order Taylor development in time:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O[\Delta t^3] \tag{83}$$

Then temporal derivatives of Eq. (83) are replaced by spatial derivatives using Eq. (82):

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t \; a\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2} a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O[\Delta t^3] \tag{84}$$

To remove the spatial derivatives of Eq. (84) two symmetric Taylor developments in space are needed:

$$u_{i+1}^n = u_i^n + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O[\Delta x^3] \tag{85}$$

$$u_{i-1}^n = u_i^n - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O[\Delta x^3] \tag{86}$$

Finally the CFL number defined as $CFL = a\Delta t/\Delta x$ is introduced to obtain the discrete Lax-Wendroff scheme:

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = & u_i^n - \Delta t \; a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\Delta t^2}{2} a^2 \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \\ & + O[(\Delta t)^3] + O[CFL\Delta x^3 + CFL^2 \Delta x^3] \end{aligned} \tag{87}$$

A temporal and a spatial errors appear in Eq. (87). Since the Lax-Wendroff scheme is stable for CFL numbers less than one, it implies that the leading term of the spatial error is $O[CFL\Delta x^3]$.

It is interesting to note that for a given simulation time, the spatial error is not influenced by the CFL value. This is not the case for the temporal error. If for a fixed CFL number, the simulation requires n time steps, the total spatial error is : $O[n \; CFL\Delta x^3]$. Dividing the CFL by the ratio r, the mean time step is also divided by r and the number of iterations is multiplied by r. Finally, the total spatial error remains the same. This result is a property of centered schemes and can also been demonstrated for TTGC.

8.5.2 Spatial convergence order measurements

In compressible codes, both flow vortices and acoustic waves are convected. For each type of structure, a CFL can be defined:

$$CFL_{\text{conv}} = \frac{\Delta t \; u_{\text{max}}}{\Delta x} \quad \text{and} \quad CFL_{\text{acou}} = \frac{\Delta t \; |u_{\text{max}} + c|}{\Delta x} \tag{88}$$

and

$$CFL_{\text{conv}} = \frac{M}{1+M} CFL_{\text{acou}} \tag{89}$$

where M is the Mach number. The stability condition of the numerical scheme is of the form:

$$max(CFL_{\text{acou}}, CFL_{\text{conv}}) < CFL_{\text{max}} \tag{90}$$

For subsonic flows ($M < 0.3$), $M/(1+M)$ is small and CFL_{conv} is far smaller than CFL_{acou}. The non-acoustic structures of the flow are thus well time-resolved and the numerical errors are mainly caused by the spatial resolution.

The purpose of the following test cases is to characterize the convective properties of the ALE schemes for the non-acoustic structures. CFL_{acou} is fixed at 0.7 and the influence of the spatial resolution on the convergence order is studied. Some additional tests about the influence of the CFL number are also presented to underline the fact that spatial errors prevail on temporal errors. The spatial error measurements are performed for two analytical solutions of the Euler equations. The first case is linear and consists in the convection of a Gaussian profile of a species k on periodic meshes. The flow velocity is uniform in order to obtain the same profile as the initial one after a convective time τ_{conv}. The principle of this linear case is illustrated in Fig. 9. The second test case is non-linear. It consists of a vortex convected by a uniform flow on

a periodic mesh. After a convective time τ_{conv}, supposing that there are no interactions between the various vortices on the infinite domain, the vortex profile should be the same as the initial one. This test is illustrated in Fig. 10. For these two cases the numerical error introduced by the schemes is estimated by the L2 norm of the difference between the initial profile and the profile at $t = \tau_{conv}$. The meshes are initially composed of regular quadrangles for which different resolutions are considered. The size of the different meshes are 21×41, 41×81 and 81×161 which correspond respectively to 13, 25 and 49 nodes in the Gaussian profile or in the vortex. To evaluate the influence of the ALE schemes on the convergence order the meshes undergo different deformation laws. The first law (see Fig. 11) consists of a sinusoidal 1D compression (1DC) which is orthogonal to the convective direction. The period of the deformation is denoted τ_u. The second law (see Fig. 12) is a sinusoidal radial contraction (RC) of period τ_c. The combination of these two laws provides four cases that are defined and described in Table 2. For cases A and B the elements remain regular during the simulation, while they do not for cases C and D. Figure 13 and Fig. 14 show the numerical error as a function of the initial element size for the linear and the non-linear cases. For the FV Lax-Wendroff scheme, the precision is independent of the mesh movement with a convergence order close to the theoretical value of 2. For TTGC, the results depend on the regularity of the mesh. The numerical errors for cases A and B are nearly identical and the convergence order is close to the order measured by Colin [15] on regular bilinear elements, i.e. between 3 and 4. For cases C and D the order corresponds to the order measured by Colin [15] on perturbed bilinear meshes, i.e. between 2 and 3. It should be underlined that even on perturbed meshes, the accuracy of TTGC is far better than the Lax–Wendroff scheme.

To verify that spatial errors prevail on temporal errors for similar cases and particularly turbulent cases, the previous tests have been rerun with different CFL numbers. Table 3 gives an example of results for the 21×41 Gaussian convection case on fixed grid. For very different CFL numbers, the measured error remains equal to its reference value. It implies that the measured error is mainly due to spatial discretisation errors as demonstrated in Section 8.5.1 for subsonic compressible flows.

9 Conclusions

A DNS/LES methodology for multispecies reacting flows on fixed and moving grids has been presented and tested in simple laminar flows (applications to full turbulent reacting cases may be found in Selle et al. [52] or Prière et al. [54]). The importance of boundary conditions was stressed and a new simple formulation to implement characteristic boundary conditions in compressible DNS/LES codes was described. This formulation has been tested and results for laminar flames are presented. It was also shown that high-order (2nd and 3rd order) schemes can be constructed on hybrid moving grids but that their derivation required some care to preserve accuracy. These schemes have been tested on various cases such as uniform flow on moving grids, uniformly accelerated pistons, scalar convection and vortex propagation on deforming grids, to confirm the validity of the various methods and measure the exact order or precision of these techniques. The mesh deformations used in these cases are representative of the distortions that can be found in many practical configurations such as piston engines. But when the grid becomes too distorted during a simulation, the ALE method can be used in conjunction with interpolation techniques to change mesh and keep numerical dissipation

low.

References

[1] T. Poinsot, D. Veynante, Theoretical and numerical combustion, R.T. Edwards Ed. , 2001.

[2] N. Peters, Turbulent combustion, Cambridge University Press , 2000.

[3] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, Large Eddy Simulations of chemical and acoustic forcing of a premixed dump combustor, Flow Turb. and Combustion 65 (2) (2000) 205–222.

[4] H. Pitsch, H. Steiner, Large Eddy Simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D), Phys. Fluids 12 (2000) 2541–2554.

[5] H. Pitsch, L. D. de la Geneste, Large Eddy Simulation of premixed turbulent combustion using a level-set approach, in: Proc. of the Comb. Institute, Vol. 29, 2002, pp. 2001–2008.

[6] D. Caraeni, C. Bergström, L. Fuchs, Modeling of liquid fuel injection, evaporation and mixing in a gas turbine burner using Large Eddy Simulations, Flow Turb. and Combustion 65 (2000) 223–244.

[7] K. Mahesh, G. Constantinescu, P. Moin, A numerical method for Large-Eddy Simulation in complex geometries, J. Comput. Phys. 197 (2004) 215–240.

[8] M. M. Rai, P. Moin, Direct simulations of turbulent flow using finite-difference schemes, J. Comput. Phys. 96 (1991) 15–53.

[9] S. I. Möller, E. Lundgren, C. Fureby, Large Eddy Simulations of unsteady combustion, in: 26th Symp. (Int.) on Comb., The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, pp. 241–248.

[10] W. W. Kim, S. Menon, An unsteady incompressible navier stokes solver for LES of turbulent flows, Int. J. Num. Meth. Fluids 31 (1999) 983–1017.

[11] N. Branley, W. P. Jones, Large Eddy Simulation of a turbulent non-premixed flame, Combust. Flame 127 (2001) 1914–1934.

[12] C. D. Pierce, P. Moin, Progress-variable approach for Large Eddy Simulation of non-premixed turbulent combustion, J. Fluid Mech. 504 (2004) 73–97.

[13] P. E. DesJardin, S. H. Frankel, Large Eddy Simulation of a nonpremixed reacting jet: application and assessment of subgrid-scale combustion models, Phys. Fluids 10 (1998) 2298–2314.

[14] J. Schlüter, T. Schönfeld, LES of jets in cross flow and its application to gas turbine burners, Flow Turb. and Combustion 65 (2000) 177–203.

[15] O. Colin, M. Rudgyard, Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations, J. Comput. Phys. 162 (2) (2000) 338–371.

[16] A. Kaufmann, F. Nicoud, T. Poinsot, Flow forcing techniques for numerical simulation of combustion instabilities, Combust. Flame 131 (4) (2002) 371–385.

[17] K. W. Thompson, Time dependent boudary conditions for hyperbolic systems, J. Comput. Phys. 68 (1987) 1–24.

[18] C. Hirsch, Numerical computation of internal and external flows, John Wiley, New York, 1988.

[19] M. Giles, Non-reflecting boundary conditions for Euler equation calculations, AIAA Journal 28 (1990) 2050–2058.

[20] M. Baum, T. Poinsot, D. Thévenin, Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows, J. Comput. Phys. 116 (1994) 247–261.

[21] N. Okong'o, J. Bellan, Consistent boundary conditions for multicompoment real gas mixtures based on characteristic waves, J. Comput. Phys. 176 (2002) 330–344.

[22] W. T. Ashurst, N. Peters, M. D. Smooke, Numerical simulation of turbulent flame structure with non-unity Lewis number, Combust. Sci. and Tech. 53 (1987) 339–375.

[23] R. J. Cattolica, P. K. Barr, N. N. Mansour, Propagation of a premixed flame in a divided-chamber combustor, Combust. Flame 77 (1989) 101–121.

[24] P. K. Yeung, S. S. Girimaji, S. B. Pope, Straining and scalar dissipation on material surfaces in turbulence: implications for flamelets, Combust. Flame 79 (1990) 340–365.

[25] C. J. Rutland, A. Trouvé, Direct simulations of premixed turbulent flames with nonunity Lewis number, Combust. Flame 94 (1993) 41–57.

[26] D. Haworth, T. Poinsot, Numerical simulations of Lewis number effects in turbulent premixed flames, J. Fluid Mech. vol.244 (1992) 405–436.

[27] C. J. Rutland, J. Ferziger, Simulation of flame-vortex interactions, Combust. Flame 84 (1991) 343–360.

[28] C. Westbrook, F. Dryer, Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, Combust. Sci. Tech. 27 (1981) 31–43.

[29] W. P. Jones, R. P. Lindstedt, Global reaction schemes for hydrocarbon combustion, Combust. Flame 73 (1988) 222–233.

[30] S. Zhang, C. Rutland, Premixed flame effects on turbulence and pressure related terms, Combust. Flame 102 (1995) 447–461.

[31] D. Veynante, T. Poinsot, Effects of pressure gradients on turbulent premixed flames, J. Fluid Mech. 353 (1997) 83–114.

[32] D. Veynante, A. Trouvé, K. N. C. Bray, T. Mantel, Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames, J. Fluid Mech. 332 (1997) 263–293.

[33] B. Bédat, F. Egolfopoulos, T. Poinsot, Direct Numerical Simulation of heat release and nox formation in turbulent non premixed flames, Combust. Flame 119 (1) (1999) 69–83.

[34] M. Baum, D. Haworth, T. Poinsot, N. Darabiha, Direct Numerical Simulation H2/O2/N2 flames with complex chemistry in two-dimensional turbulent flows, J. Fluid Mech. 281 (1994) 1–32.

[35] G. Patnaik, K. Kailasanath, A computational study of local quenching in flame vortex interactions with radiative losses, in: 27th Symp. (Int.) on Comb., The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998, pp. 711–717.

[36] M. Y. N. Tanahashi, M. T. M. Fujimura, Fine scale structure of H2-air turbulent premixed flames, in: 1st Int. Symp. on Turb. and Shear Flow, S. Banerjee and J.Eaton Eds, 1999, pp. 59–64.

[37] D. R. Stull, H. Prophet, JANAF thermochemical tables, 2nd Edition, Report No. NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.

[38] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Byrd, Molecular theory of gases and liquids, John Wiley & Sons, New York, 1969.

[39] A. Ern, V. Giovangigli, Multicomponent transport algorithms, Springer Verlag, Heidelberg, 1994.

[40] V. Giovangigli, Multicomponent flow modeling, Birkhäuser, Boston, 1999.

[41] F. A. Williams, Combustion theory, Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

[42] J. C. Strikwerda, Initial boundary value problem for incompletely parabolic systems, Commun. Pure Appl. Math. 30 (1977) 797.

[43] T. Poinsot, S. Lele, Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows, J. Comput. Phys. 101 (1) (1992) 104–129.

[44] T. Colonius, S. Lele, P. Moin, Boundary conditions for direct computation of aerodynamic sound generation, AIAA J. 31 (9) (1993) 1574–1582.

[45] T. Colonius, Numerically nonreflecting boundary and interface conditions for compressible flow and aeroacoustic computations, AIAA J. 35 (7) (1997) 1126–1133.

[46] K. Rowley, T. Colonius, Discretely nonreflecting boundary conditions for linear hyperbolic systems, J. Comput. Phys. 157 (2) (2000) 500–538.

[47] R. Verzicco, J. Mohd-Yusof, P. Orlandi, D. Haworth, Large-Eddy Simulation in complex geometric configurations using boundary body forces, AIAA J. 38 (2000) 427–433.

[48] C. Hirt, A. Amsden, J. Cook, An Arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds, J. Comput. Phys. 14 (1974) 227–253.

[49] A. Masud, T. Hughes, A space-time Galerkin/least-squares finite element formulation of the Navier-Stokes equations for moving domain problems, Comp. Meth. in Applied Mech. and Eng. 146 (1997) 91–126.

[50] T. Tezduyar, M. Behr, J. Liou, A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces - the deforming-spatial-domain/space-time procedure: I. the concept and the preliminary tests, Comp. Meth. in Applied Mech. and Eng. 94 (1992) 339–351.

[51] C. Farhat, P. Geuzaine, C. Grandmont, The discrete geometric conservation law and the nonlinear stability of the ale schemes for the solution of flow problems on moving grids, J. Comput. Phys. 174 (2) (2001) 669–694.

[52] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, D. Veynante, Compressible Large-Eddy Simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes, Combust. Flame 137 (4) (2004) 489–505.

[53] L. Landau, E. Lifchitz, Physique Theorique - Tome 6 : Mecanique des Fluides, Librairie du Globe, Editions MIR, 1984.

[54] C. Prière, L. Gicquel, A. Kaufmann, W. Krebs, T. Poinsot, LES of mixing enhancement : LES predictions of mixing enhancement for jets in cross-flows, Journal of Turbulence 5 (1) (2004) 005.

Equivalence Ratio	Fresh Gases Temperature	Pressure	Mesh size
1.00	300 K	101300 Pa	$\Delta x = 50\mu m$

Table 1

Computation parameters

case	Type	Parameters	$\dot{X}_{max}$
A	Fixed		
B	1DC	$\frac{\tau_u}{\tau_{conv}} = 0.2$	26.2m/s
C	1DC + RC	$\frac{\tau_u}{\tau_{conv}} = \frac{\tau_c}{\tau_{conv}} = 0.2$	26.2m/s
C	1DC + RC	$\frac{\tau_u}{\tau_{conv}} = 0.2 \quad \frac{\tau_c}{\tau_{conv}} = 0.125$	27.8m/s

Table 2

Mesh movement cases. 1DC: mono-dimensional compression, RC: radial compression.

CFL	L2 error
0.7	0.1535
0.1	0.1541
0.01	0.1543

Table 3

Error for the 21×41 gaussian convection case versus CFL value

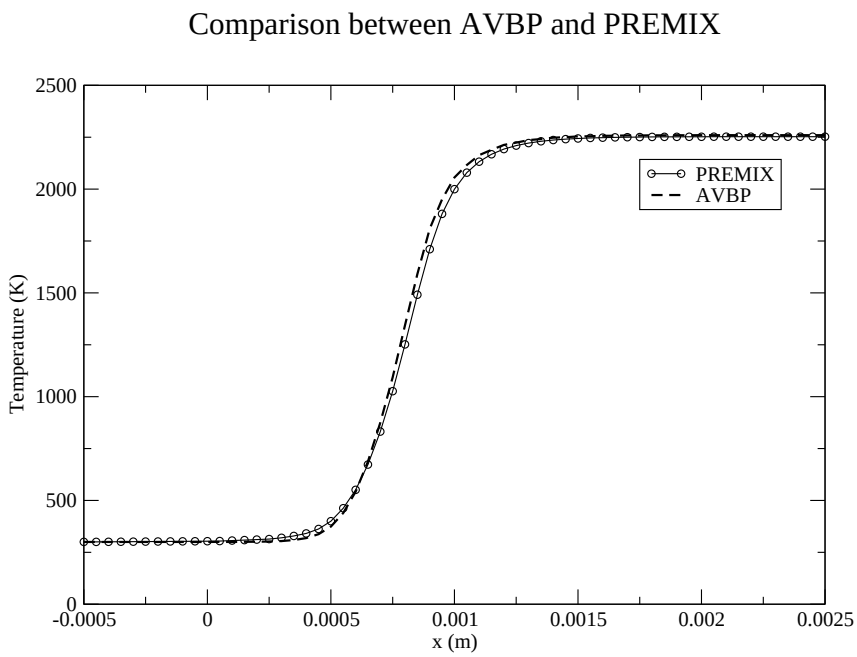


Fig. 1. Flame temperature profile

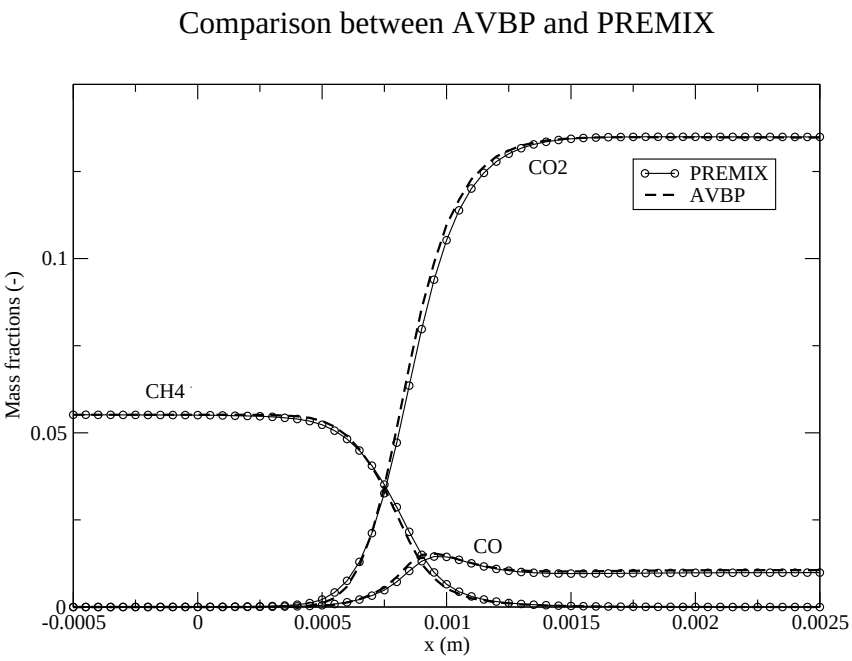


Fig. 2. Flame mass fractions profile

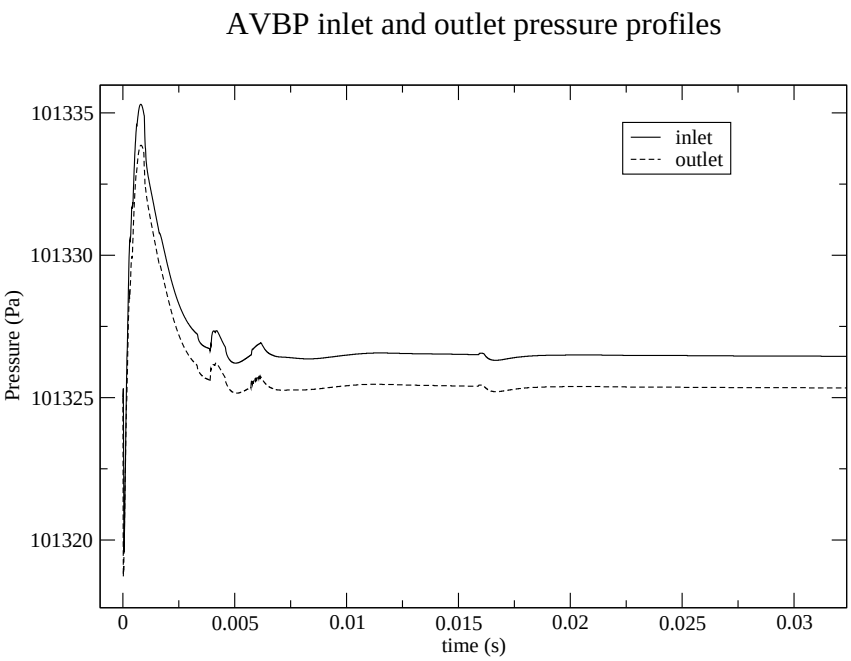


Fig. 3. Time evolution of inlet and outlet pressure for flame computation

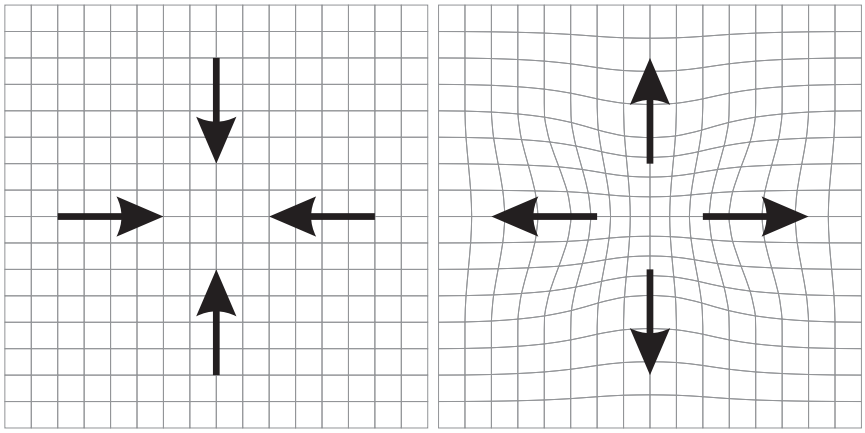


Fig. 4. Mesh deformations

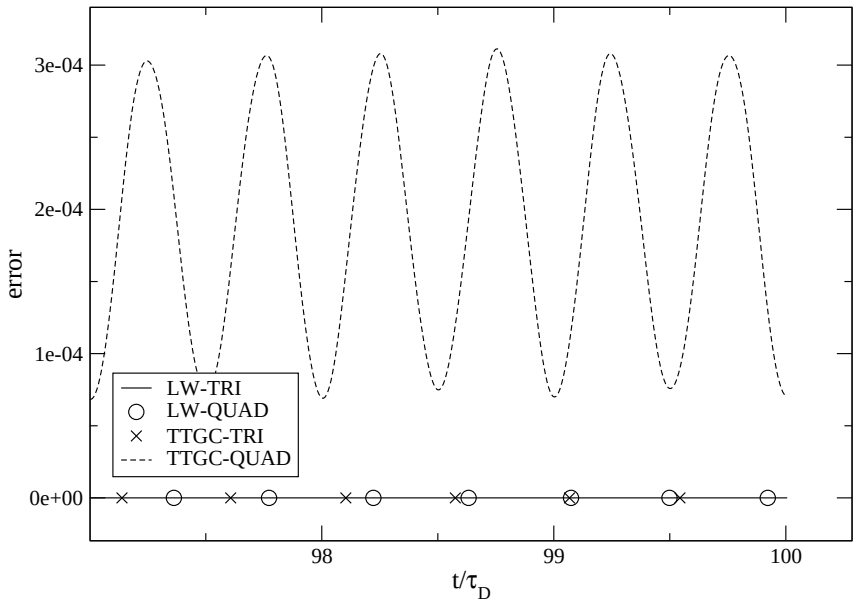


Fig. 5. Kinetic energy error

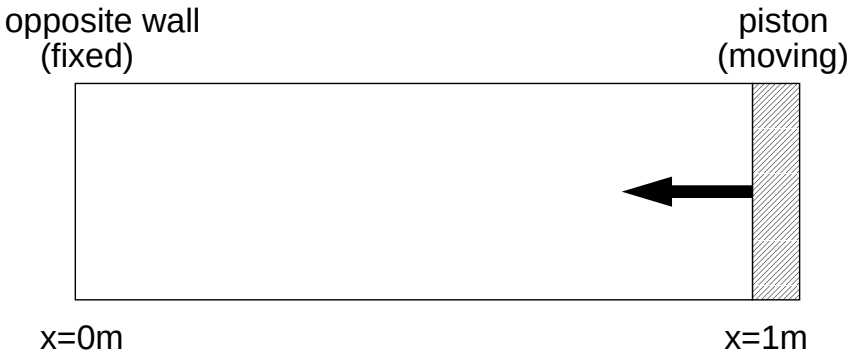


Fig. 6. Principle of the UAP test case

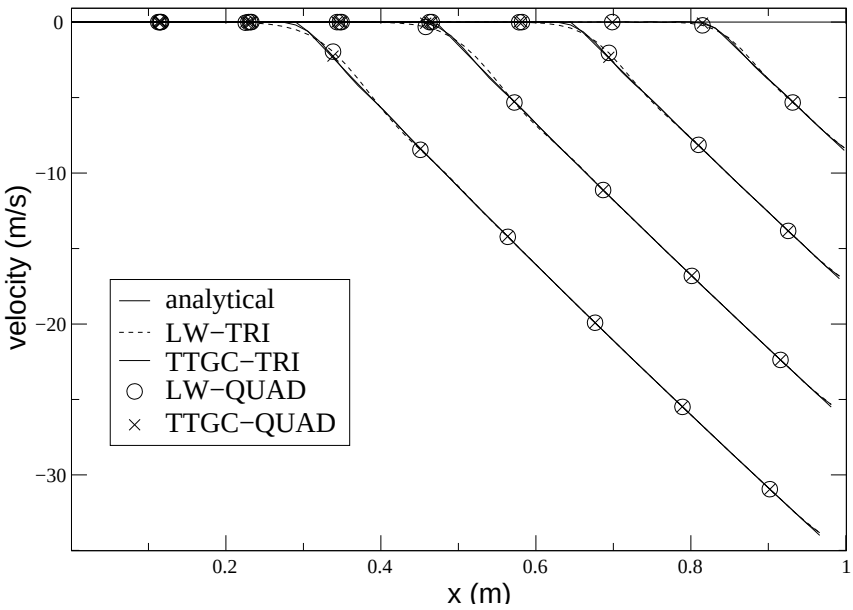


Fig. 7. Velocity profiles for the UAP test case at five successive instants

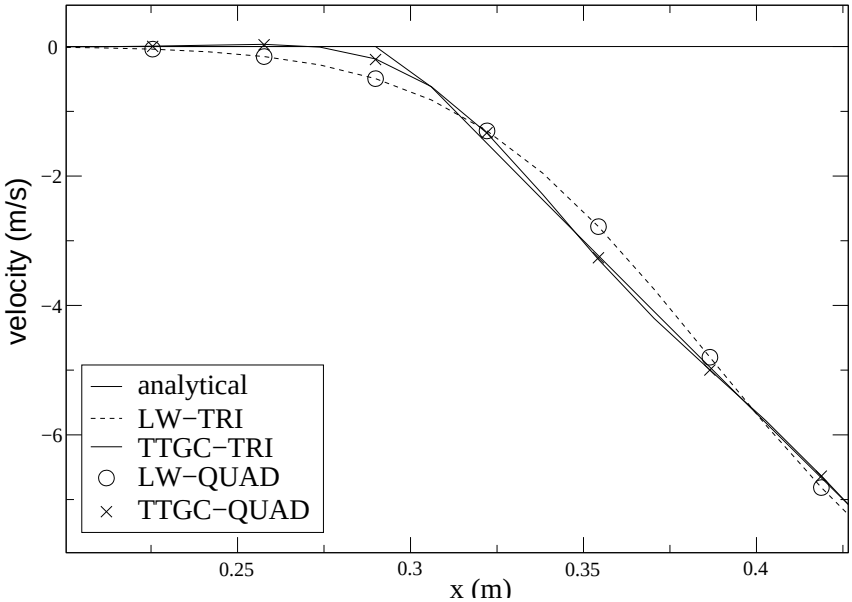


Fig. 8. Close-up on the last velocity profiles for the UAP test case

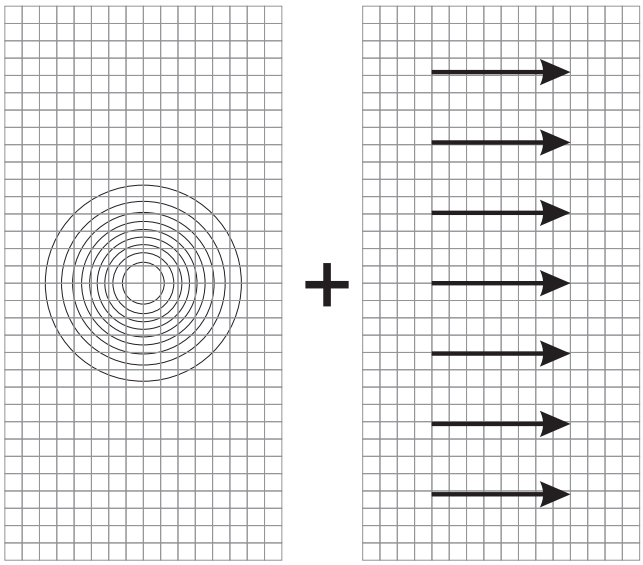


Fig. 9. Principle of the scalar convection case

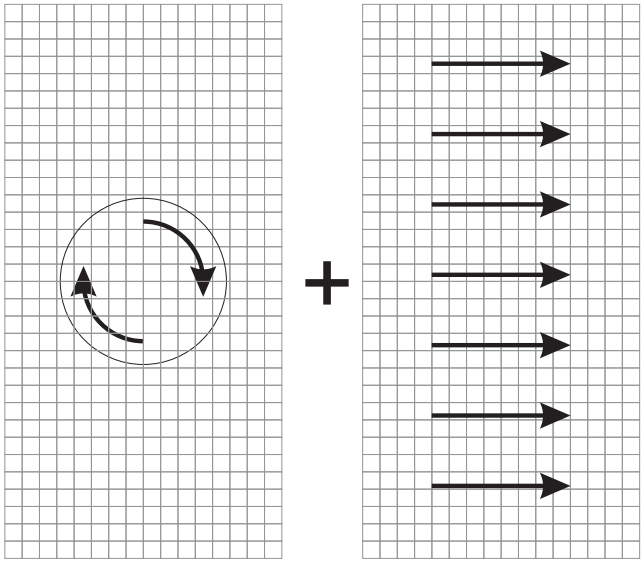


Fig. 10. Principle of the vortex convection case

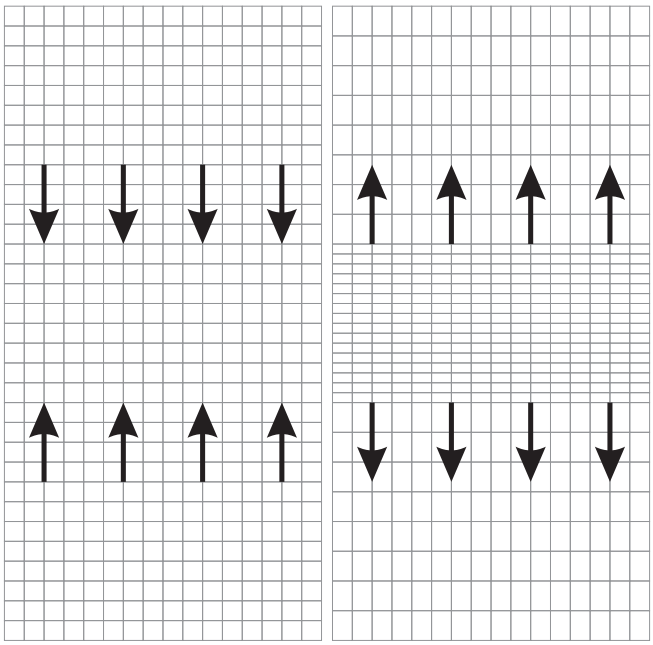


Fig. 11. 1D compression-expansion mesh deformation

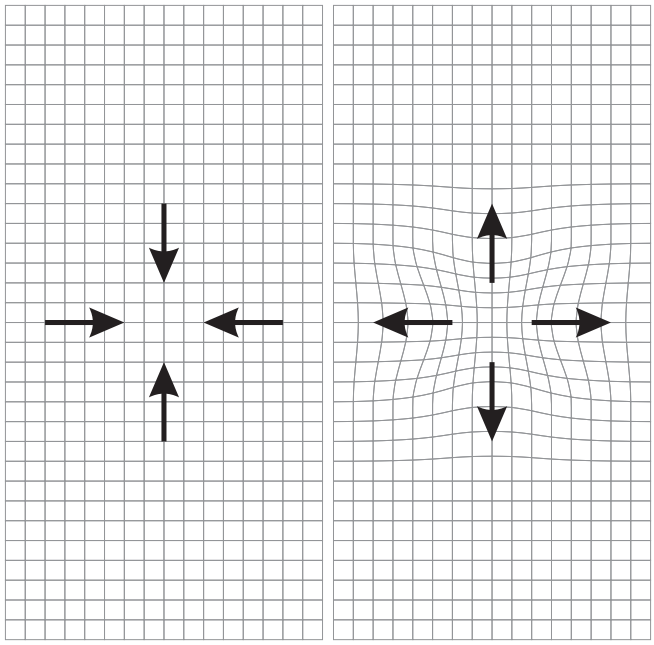


Fig. 12. Radial contraction-expansion mesh deformation

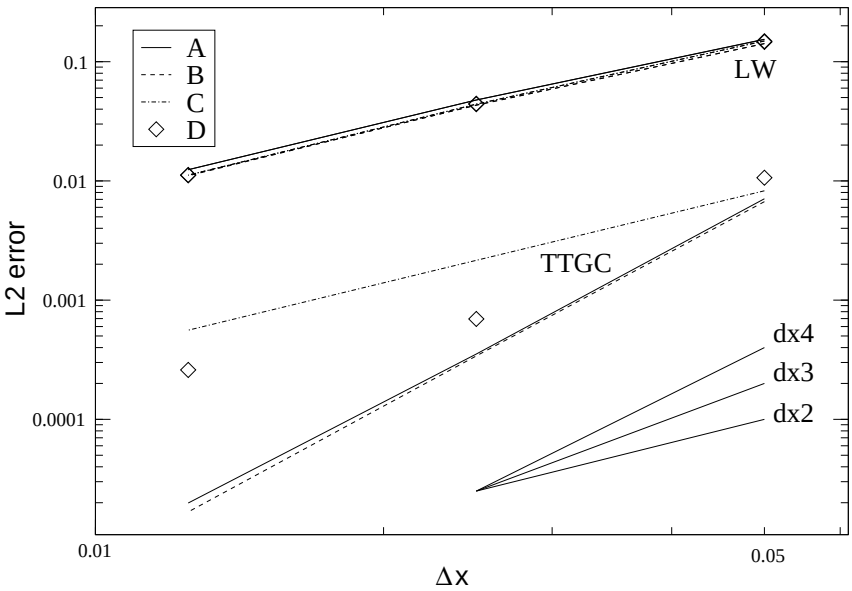


Fig. 13. Error for the scalar convection case versus mesh size

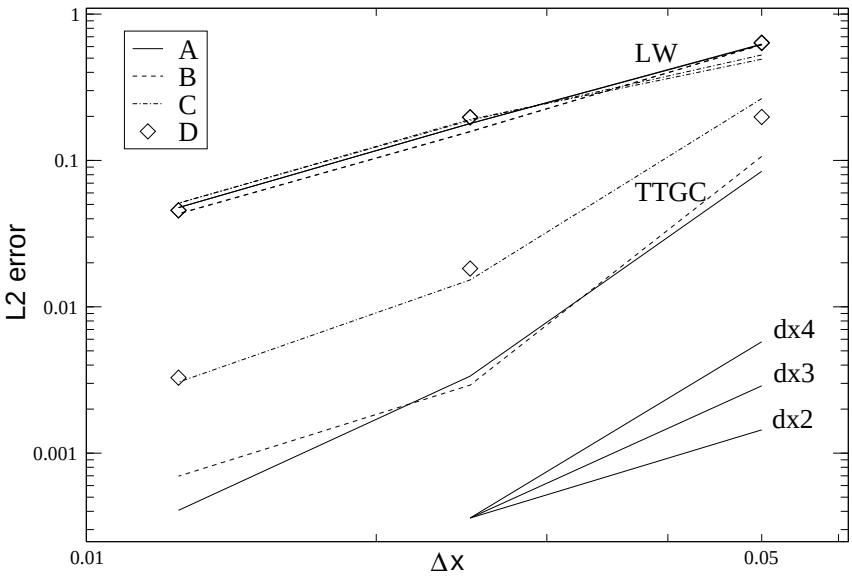


Fig. 14. Error for the vortex convection case versus mesh size

Article 3

"Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and Large Eddy Simulations"

S. Roux, G. Lartigue, T. Poinsot, U. Meier and C. Bérat

soumis à Combustion and Flame

Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and Large Eddy Simulations

S. Roux [a,*], G. Lartigue [a], T. Poinsot [a,b], U. Meier [c] and C. Bérat [d]

[a] *CERFACS, 31057 Toulouse, France*

[b] *IMFT, 31400 Toulouse, France*

[c] *DLR, D-70569 Stuttgart, Germany*

[d] *Turbomeca, 64511 Bordes, France*

Short title : **LES, experimental and acoustic analysis of a swirled premixed combustor.**

Abstract

The turbulent flow within a complex swirled combustor is studied with compressible LES (Large Eddy Simulation), acoustic analysis and experiments for both cold and reacting flows. Detailed fields of axial, tangential and radial velocities (average and RMS) given by LES are compared to experimental values measured by LDV. The unsteady activity is identified using LES and acoustic tools for the whole geometry from inlet (far upstream of the swirlers) to the atmosphere (far downstream of the chamber exhaust). During comparisons between experiments and LES this nose-to-tail procedure removes all ambiguities related to the effects of boundary conditions. Results show that both acoustic and hydrodynamic modes exist simultaneously for the cold flow : the second acoustic mode at 360 Hz dominates in the plenum while a mode at 540 Hz due to a Precessing Vortex Core (PVC) is found in the combustion chamber. With combustion, the main mode frequency is 500 Hz and appears both in LES and in the experimental data. The acoustic analysis shows that this mode is still the second mode of the combustor which frequency has shifted from 360 to 500 Hz. However, while the acoustic and hydrodynamic modes were both present for the cold flow, LES shows that, with combustion, the PVC mode is damped and that all unsteady activity is dominated by the second acoustic mode. More generally, these results illustrate the power of combined numerical tools (LES and acoustic analysis) to predict mean flow as well as instabilities in combustors.

Key words: GAS TURBINES, ACOUSTICS, LARGE EDDY SIMULATION

1 Introduction

The design of modern combustion chambers for gas turbines relies heavily on RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) which predicts the mean values of all parameters in the chamber (velocity, temperature, density, species mass fractions and turbulent quantities). Even though these mean fields are essential ingredients of a successful design, recent research has shown that they had to be complemented by other tools. In the continuous development of gas turbines burners and chambers unexpected problems such as flashback, quenching or combustion oscillations appear in many cases. Combustion instabilities are one of the most dangerous phenomena: these oscillations are caused by combustion / acoustics coupling and can lead to the complete destruction of the combustor $[1-6]$. They are difficult to predict at the design level using RANS methods. To understand and predict combustion instabilities, other numerical methods are needed $[7, 8]$:

- Acoustic analysis: using drastic assumptions on the flow and on combustion, the stability of a combustor can be studied using purely acoustic tools which predict the frequency and the growth rates of all modes. Such tools have been available in research centers but also in industry for a long time with various levels of sophistication: longitudinal low-frequency modes $[4, 9, 10]$, longitudinal/azimuthal modes $[11, 12]$ fully three-dimensional acoustic modes $[13, 11]$, linear or non-linear methods$[14-16]$, analytical or numerical techniques. The weakest part of these models is the description of the flame response to acoustic perturbations.
- LES (Large Eddy Simulations): more recently, the development of LES has allowed detailed studies of turbulent combustion. Even though the cost of such LES remains very high, the predictive capacities of these tools for turbulent combustion have been clearly demonstrated $[17-20]$. Extending LES to study flame / acoustics coupling is therefore an obvious research path $[21, 8]$.

Even though they can address the same issue (flame / acoustics coupling), acoustic tools and LES follow different routes: while LES provides a detailed analysis of one reacting case, acoustic tools can be used to explore a wide range of parameters and geometries. Combining these solvers is likely to offer the best solution to understand and control combustion oscillations but very few studies have tried to use both approaches together. The objective of this paper is to explore this path by using simultaneously Large Eddy Simulation and acoustic analysis for a swirled premixed gaseous combustor. These two approaches are compared to detailed measurements performed at DLR Berlin

* Corresponding author. Address: CERFACS, 42, Avenue Coriolis, 31057 Toulouse, France. Tel: +33 (0)5 61 19 30 13. Email: roux@cerfacs.fr

and Stuttgart. First, mean LES profiles are compared for all velocity components (mean and RMS) for cold and reacting flows: this set of data constitutes a very extensive validation data base for LES results since it incorporates profiles of mean and RMS velocitiy components in the axial, tangential and radial directions. Then the unsteady activity in the combustor is characterized using LES, acoustic analysis and experimental results: the natural hydrodynamic instabilities of the swirled flow (especially the Precessing Vortex Core [22]) are identified and their importance in flow / acoustics coupling is studied for cold and reacting cases. Oscillation frequencies revealed by LES and acoustic analysis are compared to experimental measurements using microphones and hot-wire measurements.

An important aspect of the study is the design of a combustor and the use of numerical tools allowing a 'stand-alone' computation. LES and acoustic analysis are run in a nose-to-tail mode in which boundary conditions are extremely simple: the mass flow rate is imposed at the inlet of the whole device while the pressure at infinity is specifed far away from the exhaust for the outlet. No boundary condition (like velocity, species or swirl profiles at the inlet) can be tuned to match results: this allows a more precise evaluation of the two methods capacities and limits.

The experimental configuration is described in Section 2. Section 3 and 4 provide short descriptions of the LES and acoustic tools. Section 5 presents results for the non-reacting flow while Section 6 describes results for the reacting case at equivalence ratio 0.75.

2 Configuration: swirled premixed burner

The burner is a swirled injector (Fig. 1): swirl is produced by tangential injection downstream of a plenum. The chamber has a square cross section (86 mm $\times$ 86 mm) to allow optical diagnostics. The chamber length is 110 mm and ends into an exhaust duct with a 6:1 contraction. The burner operates at atmospheric pressure and the inlet air temperature is 300 K.

In addition to swirl, a central hub is used to stabilize the flame and control its position. In the experiment, methane is injected through holes located in the swirler but mixing is fast so that for the present computations, perfect premixing can be assumed. Experiments include LDV velocity measurements as well as a study of combustion regimes. Velocity profiles are measured for the axial, tangential and radial components at various sections of the combustor for both cold and reacting flows. Microphones are used to charaterize the unsteady activity in the plenum and in the chamber.

To provide a non ambiguous comparison between LES and experiments, it is important to consider a stand-alone configuration, i.e. a situation where the influence of boundary conditions is as small as possible: for example, the possibility of tuning the LES inlet or outlet conditions to match the experimental results (a procedure which is often employed but rarely mentioned for obvious reasons) must be suppressed. For the present study, boundary conditions were pushed as far away as possible from the chamber by extending the computational domain upstream and downstream of the combustion zone (Fig. 2): the swirlers and the plenum are fully meshed and computed and even a part of the outside atmosphere is meshed to avoid having to specify a boundary condition at the chamber exhaust (Section 3 in Fig. 2). At the inlet of the plenum (Section 1), a flat velocity profile is imposed and it was checked that this profile had no influence on results as long as the mean mass flow rate was conserved. At the outlet of the combustion chamber (Section 2), a part of the exhaust atmosphere is added to the computation. This is an expensive but necessary step: acoustic waves reaching the chamber exhaust (Section 3) are properly transmitted or reflected without having to specify an acoustic impedance for this section since it is not a boundary condition but a part of the computational domain.

3 Large Eddy Simulations for gas turbines

Large Eddy Simulations (LES) are powerful tools to study the dynamics of turbulent flames [23 − 26, 8, 19, 20]. In this study a parallel LES solver called AVBP (see www.cerfacs.fr/cfd/) is used to solve the full compressible Navier Stokes equations on hybrid (structured and unstructured) grids with third-order spatial and temporal accuracy [27, 28].

No-slip adiabatic conditions are imposed at all walls of the chamber. Subgrid stresses are described by the WALE model [29]. Even though this model can predict wall turbulence as shown in [29], the mesh size near walls is not sufficient to correctly resolve turbulent boundary layers for all walls of the combustors. This obvious limitation is well known of most LES in combustion chambers but, interestingly, it has limited effects on the results. The comparisons of LES and LDV data (Sections 5 and 6) show that only a limited zone near the walls is affected by the lack of resolution in these regions: most of the turbulent activity is generated by the velocity gradients inside the chamber which are well resolved on the grid so that this approximation is acceptable. Other simulations performed with law-of-the-walls for LES do not exhibit significant differences with the present no-slip condition (not shown in this paper).

The flame / turbulence interaction is modeled by the Thickened Flame /

Efficiency Function model [21, 30]. The chemical scheme for methane / air combustion takes into account six species (CH_4, O_2, CO_2, CO, H_2O and N_2) and two reactions [20].

$$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \longrightarrow CO + 2H_2O \tag{1}$$

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

The first reaction (1) is irreversible whereas the second one (2) is reversible and leads to an equilibrium between CO and CO_2 in the burnt gases and a correct prediction of product temperatures. The rates of reaction (1) and (2) are respectively given by:

$$q_1 = A_1 \left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{W_{CH_4}}\right)^{n_{1F}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{1O}} \exp\left(-\frac{E_{a1}}{RT}\right) \tag{3}$$

$$q_2 = A_2 \left[\left(\frac{\rho Y_{CO}}{W_{CO}}\right)^{n_{2CO}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{n_{2O}} - \left(\frac{\rho Y_{CO_2}}{W_{CO_2}}\right)^{n_{2CO_2}}\right] \exp\left(-\frac{E_{a2}}{RT}\right) \tag{4}$$

where the parameters are provided in Table 1.

The unstructured mesh used for this study contains 3 millions elements. A specific feature of AVBP is the possibility of using hybrid meshes on massively parallel computers : the combustion chamber, the injection and the exhaust can be computed simultaneously. Since the solver is fully compressible, acoustic waves are also explicitely captured and characteristic methods are used to specify boundary conditions while controlling acoustic waves reflection [31, 28]. For the burner of Fig. 1, the inlet (Section 1 in Fig. 2) is a fixed velocity section while the outlet of the atmosphere part (Section 2) corresponds to a constant pressure surface [8].

4 Three-dimensional acoustic solver

The problem of the coupling between flames and acoustics is old and still unsolved except in certain simple cases. The famous example of the singing flame of Lord Rayleigh [32] demonstrated that this coupling can be very strong: it is sufficient to place a flame in a duct to observe (for certain conditions) that the acoustic modes of the duct can be excited at very high levels. Being able to predict the acoustic eigenmodes of the combustor is therefore a necessary step to understand and avoid combustion instabilities. In the present work, a code called AVSP is used to solve the Helmholtz equation in a non-isothermal

flow [7, 8]:

$$\nabla \cdot \left(c^2 \nabla p'\right) - \frac{\partial^2}{\partial t^2} p' = 0 \tag{5}$$

where p' is the pressure perturbation and c is the local sound speed. The sound speed c is obtained by averaging LES results. Eq. (5) integrates the influence of combustion on the local sound speed but not its effect as an active acoustic generator [8]. This is sufficient to identify modes but not to predict whether they will actually be amplified or damped by the combustor. The pressure fluctuations equation (5) is solved in the frequency domain by assuming harmonic pressure variations at frequency $f = \omega/(2\pi)$: $p' = P'(x, y, z) \exp(-i\omega t)$ with $i^2 = -1$.
Eq. (5) then becomes the Helmholtz equation where the unknown quantity is the pressure oscillation amplitude P' at frequency f:

$$\nabla \cdot \left(c^2 \nabla P'\right) + \omega^2 P' = 0 \tag{6}$$

Solving Eq. (6) with proper boundary conditions on walls, inlets and outlets provides the frequencies of the eigenmodes (the real part of ω), their growth rate (the imaginary part of ω) and the mode structure (the distribution of P'). Like the LES solver, the Helmholtz solver uses hybrid meshes and can be applied to the full geometry of the burner. For the burner of the present study (Fig. 1), the acoustic boundary conditions match those used for the LES solver (Section 3): the inlet (Section 1 in Fig. 2) is treated as a velocity node and the boundaries of the atmosphere part meshed for the exhaust (Section 2 in Fig. 2) as pressure nodes.

5 Non reacting flow

The cold flow was characterized for a mass flow rate of 12 g/s. An example of instantaneous axial velocity field is presented in Fig. 4. As expected from the large swirling motion induced by the vanes, a large recirculation zone is found in the chamber. Outside Section 3 (Fig. 2), the large atmosphere zone which is meshed damps perturbations.

5.1 Average profiles

LES and experimental average velocity profiles have been compared at various sections of the combustion chamber (Fig. 3). The averaging time for LES is

100 ms corresponding to 15 flow-through times in the chamber at the bulk velocity. Data compared for LES and experiments are :

- average axial (Fig. 5), azimuthal (Fig. 7) and radial (Fig. 9) velocities,
- RMS axial (Fig. 6), azimuthal (Fig. 8) and radial (Fig. 10) velocities in the same sections

The comparison of all profiles shows an excellent agreement for all velocity components: the mean velocity is correctly predicted as well as the length of the central recirculation zone (Fig. 5). The swirl levels observed in the tangential velocity profiles are also very good (Fig. 7). Considering that this computation has absolutely no inlet boundary condition which can be tuned to fit the velocity profiles, this confirms the capacity of LES in such flows. The RMS profiles obtained experimentally by LDV and numerically by LES, both for axial (Fig. 6) and azimuthal (Fig. 8) velocities are also very close. The small discrepancies observed close to the chamber axis are due to the experimental difficulty of producing a perfectly symmetric flow: at $x = 5$ mm for example, the experimental mean profile of tangential velocity (circles in Fig. 7) is not symmetrical and slightly deviates from the LES profiles. Near walls (for $y = -43$ or $+43$ mm in Fig. 5 to 10), even though the mesh is not sufficient to resolve turbulent near-wall structures, the agreement for all profiles is perfect for all available LDV measurements. As mentioned in Section 3, near-wall turbulence effects have a limited effect on the mean and RMS flow field in the chamber.

5.2 Unsteady and acoustic analysis

The RMS fluctuation levels in both LES and experiments (Fig. 6 and 8) are very intense around the axis, close to the mouth of the burner (of the order of 20 m/s at $x = 1.5$ mm). Even though this activity appears as 'turbulence', it is actually due to a large scale hydrodynamic structure, called Precessing Vortex Core (PVC) which is well known in swirling flows [33, 34, 22] and is visualized in Fig. 11 from LES data. The spiral structure of Fig. 11 rotates around the burner axis at a frequency of 540 Hz in the LES. Measurements performed inside the chamber reveal a dominant frequency around 510 Hz.

The Helmholtz solver confirms the hydrodynamic nature of the 540 Hz frequency by demonstrating that it is not an acoustic mode: the acoustic eigenmodes of the combustor obtained with AVSP are listed in Table 2 and none of them matches the 540 Hz frequency. The first acoustic mode of Table 2 (172 Hz) is observed neither in LES nor in experiments: this mode is stable. However, the second mode (363 Hz) is indeed identified in experiments (around 340 Hz) and in LES (around 360 Hz) but only in the plenum and in

the exhaust pipe. This mode is actually present everywhere in the device but it is dominated by the PVC signal inside the first part of the chamber. Fig. 12 shows experimental and numerical pressure spectra measured in the plenum and in the chamber and confirms that these two modes exist simultaneously but not in the same places.

To extend the analysis of these modes and especially to look at their spatial structure, measurements are difficult since they would require multiple simultaneous pressure probes. It is more convenient to use now LES and acoustic solver results: the pressure fluctuations amplitude (measured by $\overline{p'^2}^{1/2}$) computed both with LES and the acoustic solver are presented in Fig. 13. Since the 3/4 wave mode has a long wavelength compared to the chamber, this plot is obtained in the LES and in the Helmholtz solver by displaying local RMS pressure versus x coordinate. The two codes give very similar pressure amplitudes in the plenum ($x < -0.05$ m) and in the exhaust ($x > 0.05$ m), indicating the acoustic nature of the pressure fluctuations in these regions. However, in the swirler and in the first half of the chamber (-0.05 m $< x <$ 0.05 m), the pressure fluctuations given by LES are larger than the acoustic predictions of the Helmholtz solver: these fluctuations are due to the PVC at 540 Hz. The PVC acts acoustically like a rotating solid placed in the flow: this dipole radiates weakly outside of the chamber. This explains why the acoustic mode at 360 Hz is visible and unaffected in the plenum and in the exhaust.

High levels of RMS velocity are found also in the swirler (not shown here) confirming the requirement for a nose-to-tail computation: there is no section in the swirler or in the chamber inlet which could possibly be used to specify inlet boundary conditions and reduce the size of the computational domain.

In summary, for cold flow, two modes coexist: a low-amplitude acoustic (3/4 wave) mode at 360 Hz everywhere in the device and a strong hydrodynamic mode at 540 Hz due to the PVC, localised near the burner mouth ($0 < x <$ 5 cm).

6 Reacting flow

The reacting case corresponds to an equivalence ratio of 0.75, an air flow rate of 12 g/s and a thermal power of 27 kW. A snapshot of an instantaneous temperature isosurface (Fig. 14) reveals a very compact flame located close to the burner mouth.

6.1 Average profiles

Mean and RMS temperature profiles are displayed in Fig. 15. As expected from the snapshot of Fig. 14, combustion is nearly finished at $x = 35$ mm and no fresh gases are found (in the mean) beyond this section. RMS temperature levels are quite high close to the burner mouth (300 K) indicating a strong intermittency and flame flapping in this zone. No comparison is possible with experiments here because temperatures have not been measured yet.

The velocity fields, however, have been measured and are presented in Fig. 16 (mean axial), 17 (RMS axial), 18 (mean tangential), 19 (RMS tangential), 20 (mean radial), 21 (RMS radial). The overall agreement between mean LES results and experimental data is very good. The LES captures both the mean values and the fluctuations precisely, except in a zone close to the burner mouth. This lack of precision could be due to an insufficient mesh resolution in this region but a more fundamental issue linked to averaging techniques in non-constant density flows is probably responsible for the discrepancy observed in these zones: LES averages are obtained using Favre averaging while experimental results come from LDV measurements in which determining whether the averaging process leads to Favre or Reynolds quantities is a difficult question [35, 8]. Most zones where experiments and LES do not match in Fig. 17 or 19 are regions where the RMS temperature (Fig. 15) is large, i.e. zones with strong intermittency. In these zones, Reynolds and Favre averages can be very different [8] and this could be the source of the present errors. In regions with limited RMS temperatures (for example at $x = 35$ mm), the experimental and LES data match very well confirming the possible explanation. Obviously, these results suggest that more studies are required to clarify this issue and this was left for further work.

6.2 Unsteady and acoustic analysis

The first major consequence of combustion is to damp the PVC observed in the cold flow (Section 5.2). Even though this mechanism cannot be expected to exist in all swirled combustors, it has already been observed in other cases [20]. With combustion, dilatation and increased viscosity in the burnt gases seem to damp the PVC: its signature on the unsteady pressure field disappears and is replaced by the acoustic mode traces.

For this reacting flow, two self-excited acoustic modes appear experimentally around 300 Hz and 570 Hz. To identify the nature of these modes, the Helmholtz solver was run using the average temperature field given by LES to obtain the list of acoustic eigenmodes with combustion. Table 2 confirms

that the two frequencies observed in experiments are the first two modes (1/4 wave and 3/4 wave) of the combustor. The agreement between measurements and the Helmholtz solver is very good: around 10% for the 1/4 wave and less than 2% for the 3/4 wave mode. The most 'active' mode is still the 3/4 wave mode observed for the cold flow (Section 5.2): its frequency shifted from 360 Hz (cold flow) to 570 Hz (reacting flow). In LES, for the present regime, a single frequency is observed at 500 Hz, which is identified as the 3/4 wave mode of the device. The difference between the measured LES frequency (500 Hz) and the experimental (570 Hz) or Helmholtz solver (588 Hz) values for this mode is probably due to changes in acoustic boundary conditions but there is little doubt that LES, experiments and Helmholtz solver are pointing at the same mode: this can be checked by displaying the field of RMS pressure measured in the LES along the chamber axis together with the modal structure predicted by the Helmholtz solver for the 3/4 wave mode (Fig. 22). Even though the LES signal contains the signature of all modes (and not only of the 3/4 wave mode), its shape neatly matches the structure of the 3/4 wave mode predicted by the Helmholtz solver. Unlike the RMS pressure profile for the cold flow (Fig. 13), the match between the LES and the Helmholtz solver is good everywhere, even in the combustion chamber, indicating that the whole flow is locked on the 3/4 wave mode.

In summary, with combustion (for this regime at an equivalence ratio of 0.75), the hydrodynamic mode (PVC) is damped and the acoustic activity is increased. The most amplified mode is the 3/4 wave mode for the whole device (Fig. 22). The mode structure measured in the LES matches the structure predicted by the Helmholtz code.

7 Conclusions

LES and acoustic analysis were used jointly to analyse a swirled premixed combustor and results were compared to experimental data. Both the mean flow and the unsteady activity were studied for cold and reacting regimes. The full geometry was computed from plenum inlet to atmosphere to avoid any possible bias effect or tuning exercices of boundary conditions during LES / experiments comparison.

The mean values of velocity measured in five sections in the chamber obtained with LES and experiments match perfectly well for both cold flow and for a reacting case at equivalence ratio 0.75. The RMS values are also in very good agreement for the cold flow and limited discrepancies are observed for reacting flows in regions of large intermittency, suggesting that these errors might be due to the definition of the averaging procedure in these regions (Favre vs Reynolds). Generally speaking, these results confirm the remarkable predictive

capacity of LES methods and also highlight the need for well-defined boundary conditions: for example, the computation must include the swirler vanes and cannot start at the chamber inlet plane.

Regarding the unsteady behavior of the flow the LES results (confirmed by experimental data) show that, without combustion, the 3/4 wave acoustic longitudinal mode at 360 Hz coexists with a Precessing Vortex Core (PVC) at 540 Hz. The comparison of average fields of velocities obtained by LES and experiment is very good both for cold and reacting flow. With combustion, the pressure fluctuations in the chamber lock onto the 3/4 wave acoustic mode of the device which shifts from 360 Hz (cold flow) to 588 Hz (reacting case): the PVC disappears and the acoustic structure revealed by LES matches exactly the prediction of the acoustic solver for this mode. Future studies will concentrate on the unsteady flame movements using PLIF and Raman measurements but the present results demonstrate that the nature of the acoustic / flow coupling changes when combustion is activated: hydrodynamic structures such as PVC appearing in cold flow can disappear when combustion starts while acoustic modes are reinforced by combustion. More generally, this study confirms the potential of LES for such flows and also highlights the need for Helmholtz solvers and a joint use of both methods.

8 Acknowledgments

The support of Turbomeca and of the EC project PRECCINSTA is gratefully acknowledged.

9 References

1. Mugridge, B. D., *J. Sound Vibration* 70: 437-452 (1980).

2. Poinsot, T., Trouvé, A., Veynante, D., Candel, S. and Esposito, E., *J. Fluid Mech.* 177: 265-292 (1987).

3. Macquisten, M. A. and Dowling, A. P., *Combust. Flame* 94: 253-264 (1994).

4. Dowling, A. P., *J. Fluid Mech.* 346: 271-290 (1997).

5. Lieuwen, T. and Zinn, B. T., *Proc. of the Combustion Institute* 27: 1809-1816 (1998).

6. Krebs, W., Flohr, P., Prade, B. and Hoffmann, S., *Combust. Sci. Tech.*

174: 99-128 (2002).

7. Crighton, D. G., Dowling, A., Ffowcs Williams, J., Heckl, M. and Leppington, F., *Modern methods in analytical acoustics.* Springer Verlag, 1992.

8. Poinsot, T. and Veynante, D., *Theoretical and numerical combustion.* R.T. Edwards, 2001.

9. Lieuwen, T. and Zinn, B. T., *37th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit,* p. 1809-1816, (1999).

10. Paschereit, C. O., Polifke, W., Schuermans, B. and Mattson, O., *J. Eng. for Gas Turb. and Power* 124: 239-247 (2002).

11. Walz, G., Krebs, W., Hoffmann, S. and Judith, H., *Int. Gas Turbine & Aeroengine Congress & Exhibition,* p. (1999).

12. Stow, S. R. and Dowling, A. P., *ASME Paper 2003-GT-38168,* p. (2003).

13. Zikikout, S., Candel, S., Poinsot, T., Trouvé, A. and Esposito, E., *21st Symp. (Int.) on Combustion,* p. 1427-1434, The Combustion Institute, Pittsburgh, (1986).

14. Culick, F. E. C., *Astronautica Acta* 3: 714-757 (1976).

15. Poinsot, T. and Candel, S., *Combust. Sci. Tech.* 61: 121-153 (1988).

16. Culick, F. E. C., *AIAA Journal* 32: 146-169 (1994).

17. Forkel, H. and Janicka, J., *Flow Turb. and Combustion* 65: 163-175 (2000).

18. Huang, Y., Sung, H. G., Hsieh, S. Y. and Yang, V., *J. Prop. Power* 19: 782-794 (2003).

19. Pierce, C. D. and Moin, P., *J. Fluid Mech.* 504: 73-97 (2004).

20. Selle, L., Lartigue, G., Poinsot, T., Koch, R., Schildmacher, K.-U., Krebs, W., Prade, B., Kaufmann, P. and Veynante, D., *Combust. Flame* 137: 489-505 (2004).

21. Angelberger, C., Egolfopoulos, F. and Veynante, D., *Flow Turb. and Combustion* 65: 205-22 (2000).

22. Lucca-Negro, O. and O'Doherty, T., *Prog. Energy Comb. Sci.* 27: 431-481 (2001).

23. Desjardins, P. E. and Frankel, S. H., *Combust. Flame* 119: 121-133 (1999).

24. Caraeni, D., Bergström, C. and Fuchs, L., *Flow Turb. and Combustion* 65: 223-244 (2000).

25. Peters, N., *Turbulent combustion.* Cambridge University Press, 2000.

26. Pitsch, H. and Duchamp de la Geneste, L., *Proc of the Comb. Institute* 29: in press (2002).

27. Colin, O. and Rudgyard, M., *J. Comput. Phys.* 162: 338-371 (2000).

28. Lartigue, G., Moureau, V., Sommerer, Y., Angelberger, C., Colin, O. and Poinsot, T., *J. Comput. Phys.* : submitted (2004).

29. Nicoud, F. and Ducros, F., *Flow Turb. and Combustion* 62: 183-200 (1999).

30. Colin, O., Ducros, F., Veynante, D. and Poinsot, T., *Phys. Fluids* 12: 1843-1863 (2000).

31. Selle, L., Nicoud, F. and Poinsot, T., *in press AIAA Journal* : (2004).

32. Rayleigh, L., *Nature* July 18: 319-321 (1878).

33. Hall, M. G., *Ann. Rev. Fluid Mech.* 4: 195-217 (1972).

34. Billant, P., Chomaz, J.-M. and Huerre, P., *J. Fluid Mech.* 376: 183-219 (1998).

35. Chen, C., Riley, J. J. and McMurtry, P., *Combust. Flame* 87: 257-277 (1991).

Tables

A_1	n_{1F}	n_{1O}	E_{a1}	A_2	n_{2CO}	n_{2O}	n_{2CO_2}	E_{a2}
$2E15$	0.9	1.1	34500	$2E9$	1	0.5	1	12000

Table 1
Rate constants for methane / air two-step scheme. The activation energies are in cal/moles and the preexponential constants in cgs units.

Mode	Mode	Cold flow (Hz)			Reacting flow (Hz)		
number	name	Helm	Exp	LES	Helm	Exp	LES
(1)	1/4 wave	172	damped	damped	265	300	290
(2)	3/4 wave	363	340	360	588	570	500
(3)	5/4 wave	1409	damped	damped	1440	damped	damped

Table 2
Longitudinal modes frequencies predicted by Helmholtz solver (Helm), measured in the experiment (Exp) and in the LES (LES).

Figures

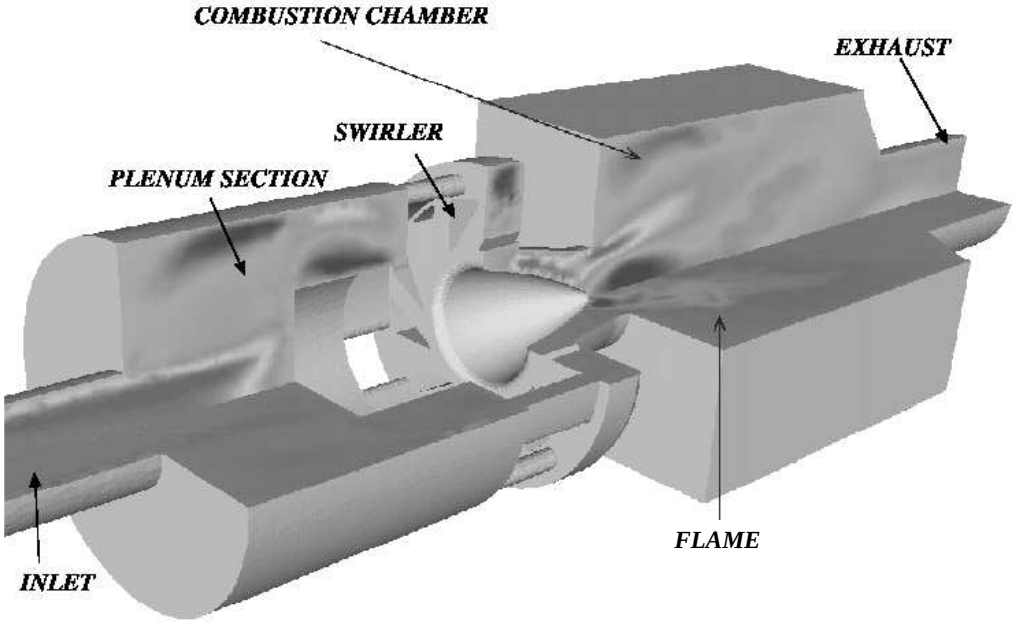


Fig. 1. Global view of the burner and combustion chamber.

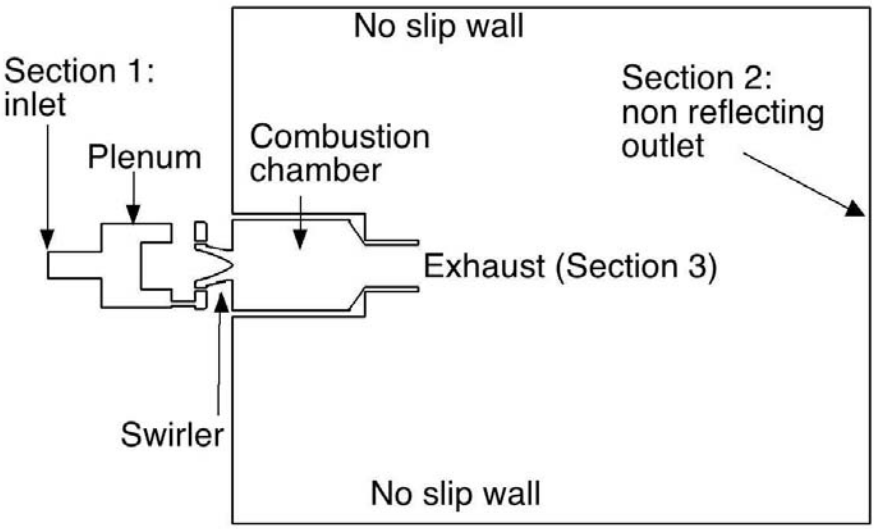


Fig. 2. Boundary conditions: the atmosphere downstream of the exhaust (Section 3) is also meshed to avoid specifying boundary conditions in this section.

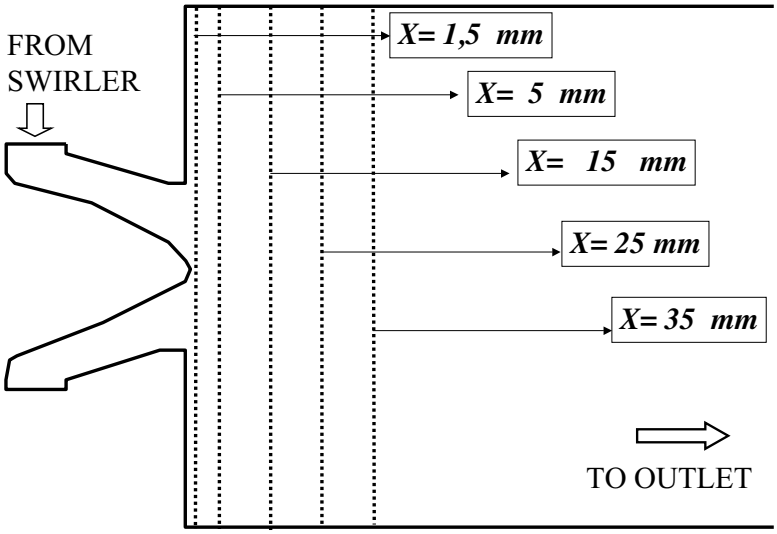


Fig. 3. Location of cuts for velocity profiles comparisons.

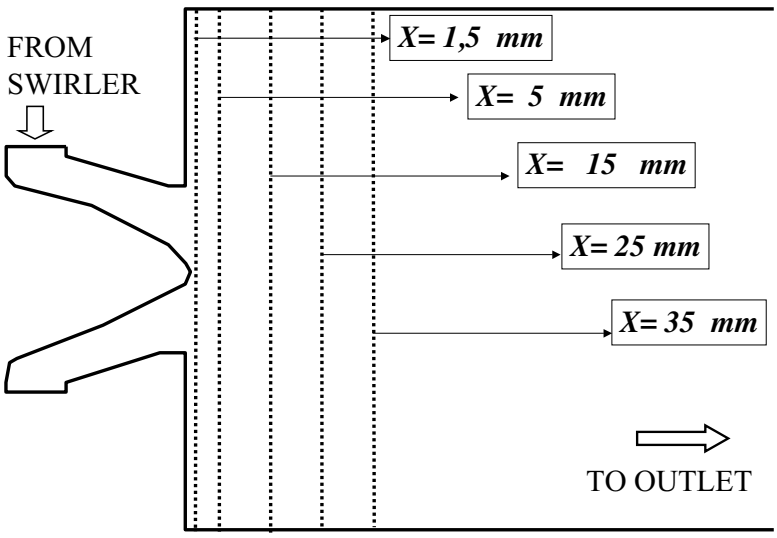


Fig. 4. Instantaneous field of axial velocity for cold flow.

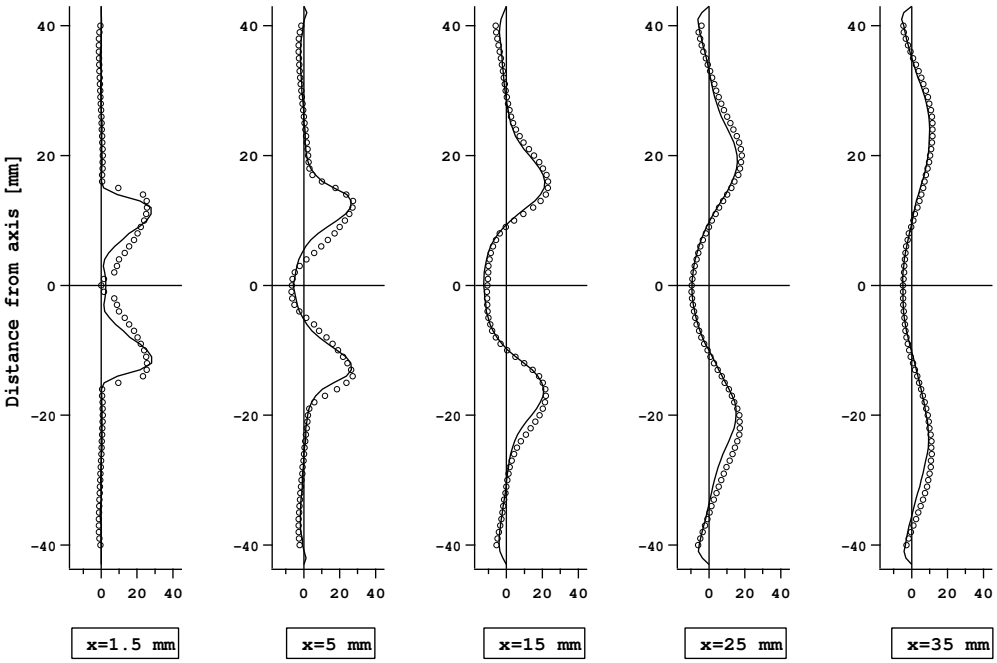


Fig. 5. Average axial velocity profiles for cold flow ○ LDV; —— LES.

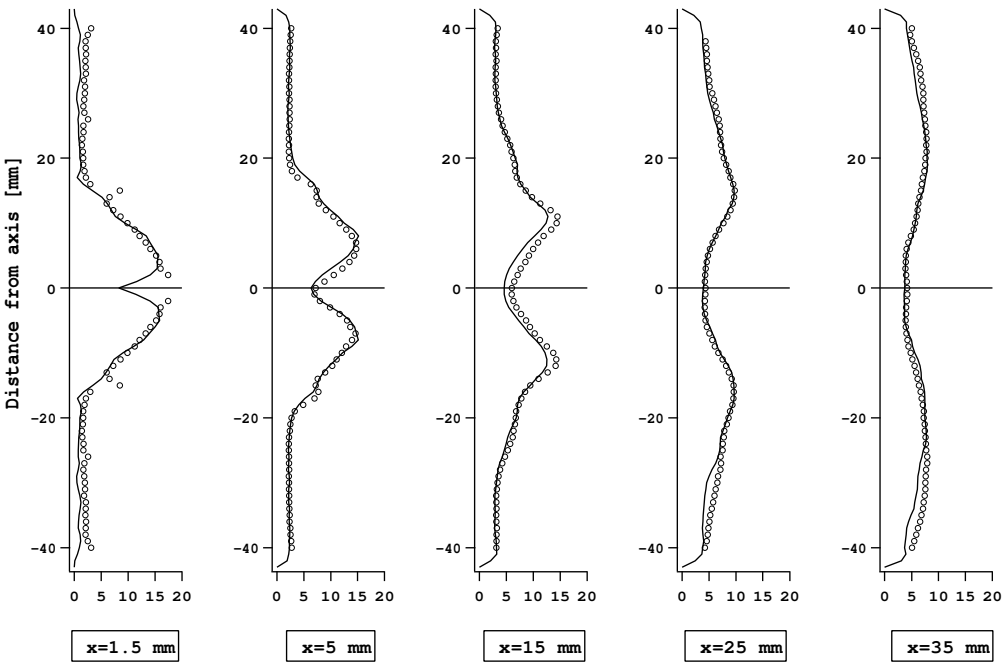


Fig. 6. RMS axial velocity profiles for cold flow. ○ LDV; —— LES.

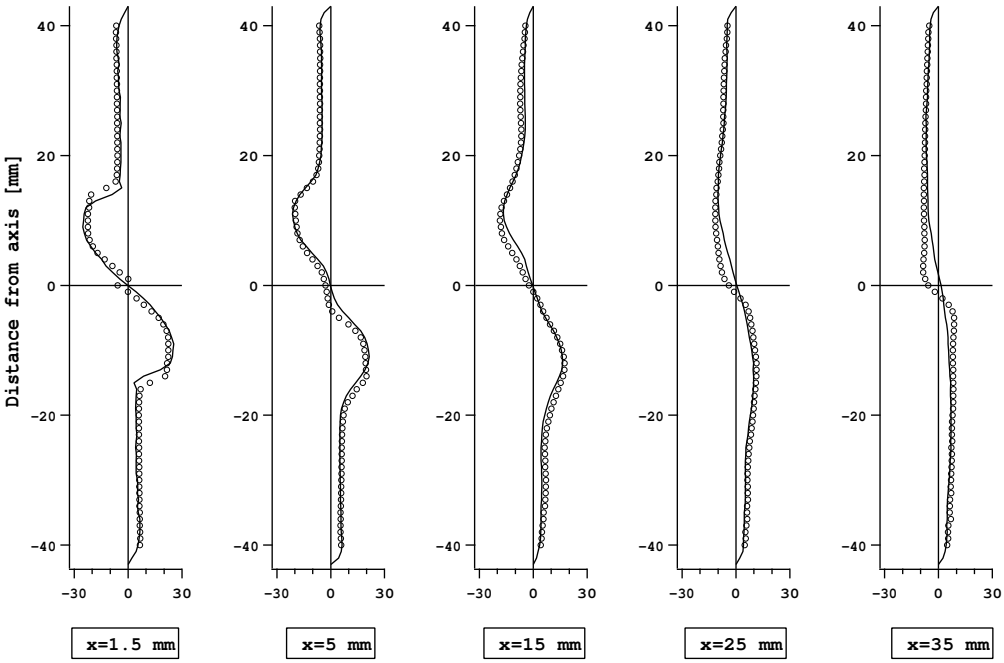


Fig. 7. Average azimuthal velocity profiles for cold flow. ○ LDV; —— LES.

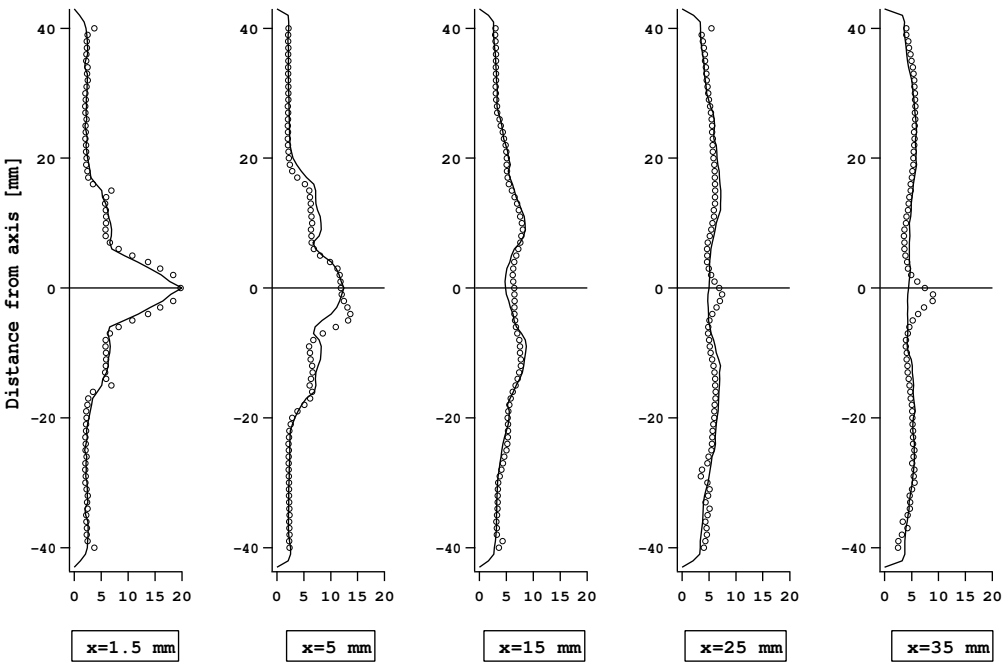


Fig. 8. RMS azimuthal velocity profiles for cold flow ○ LDV; —— LES. .

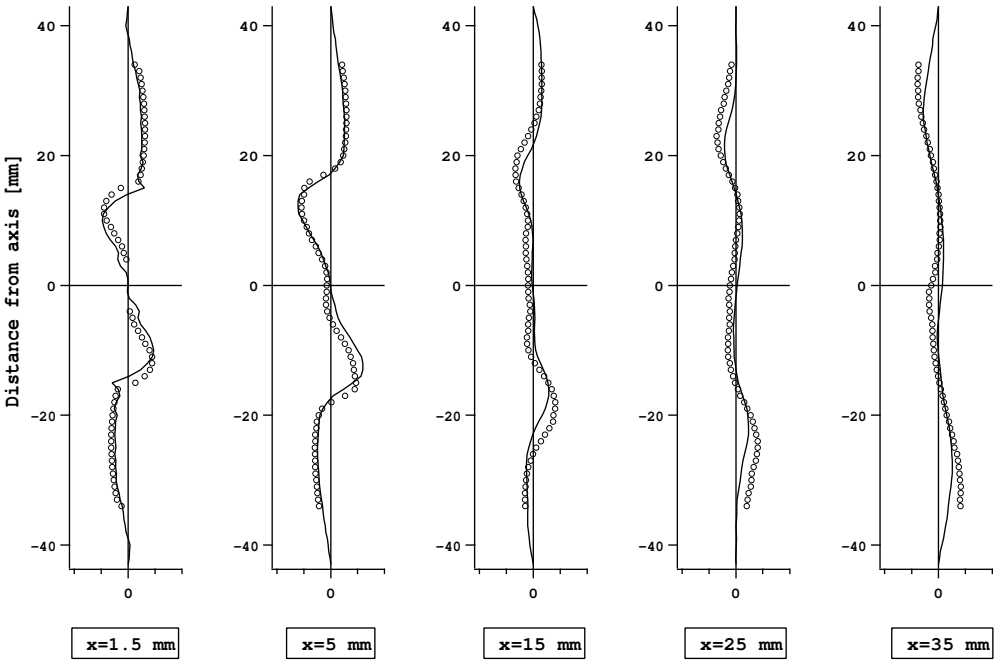


Fig. 9. Average radial velocity profiles for cold flow. ○ LDV; —— LES.

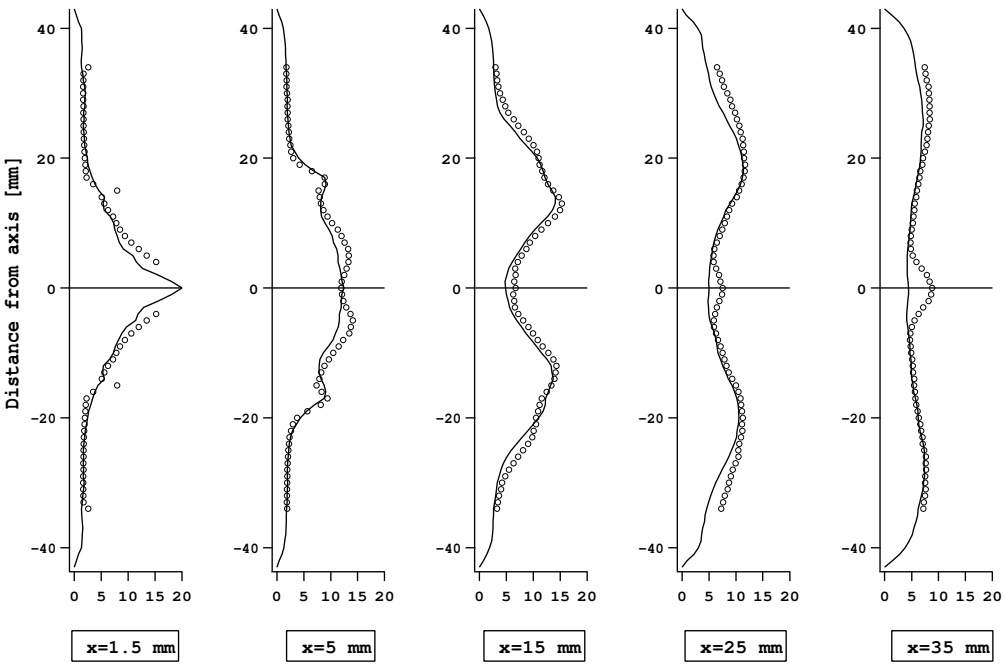


Fig. 10. RMS radial velocity profiles for cold flow ○ LDV; —— LES. .

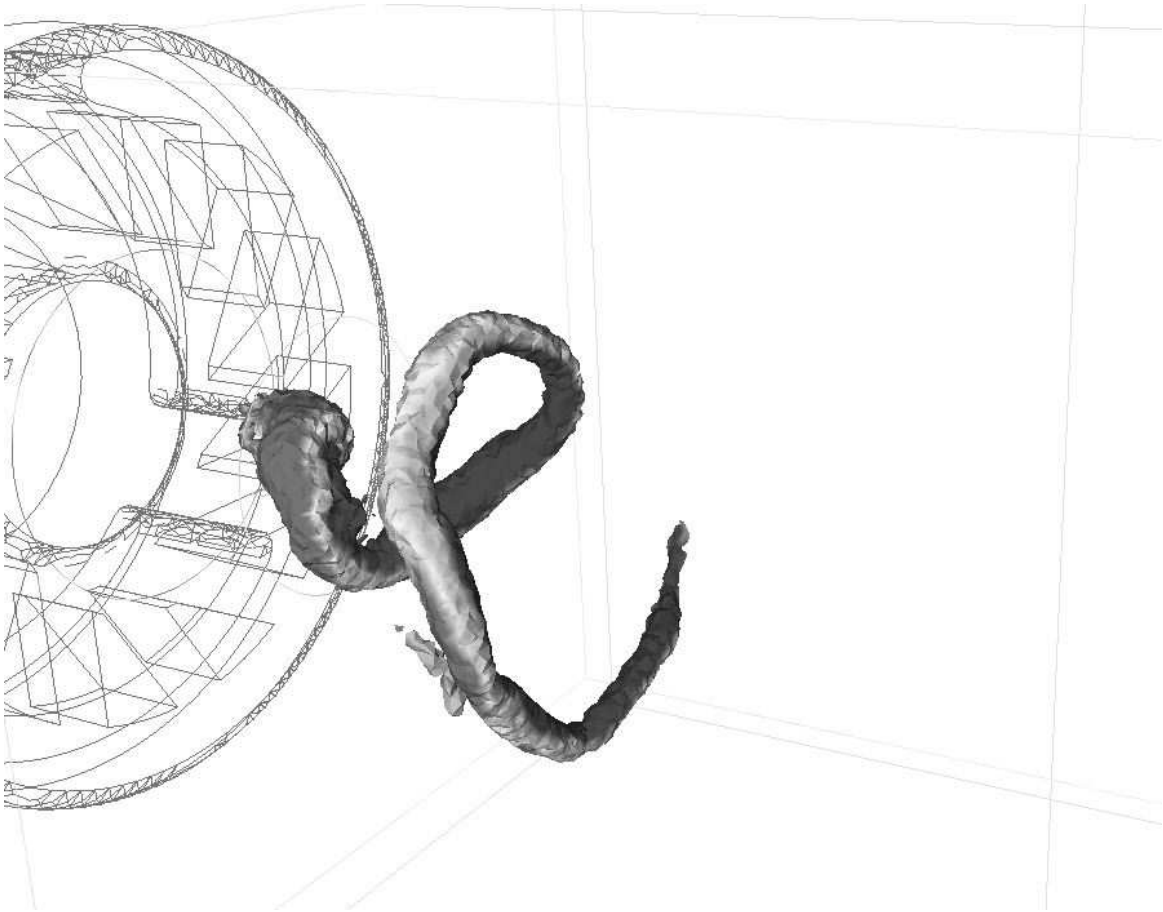


Fig. 11. Visualization of the 540 Hz PVC hydrodynamic instability at the exit of the swirler using an isosurface of low pressure.

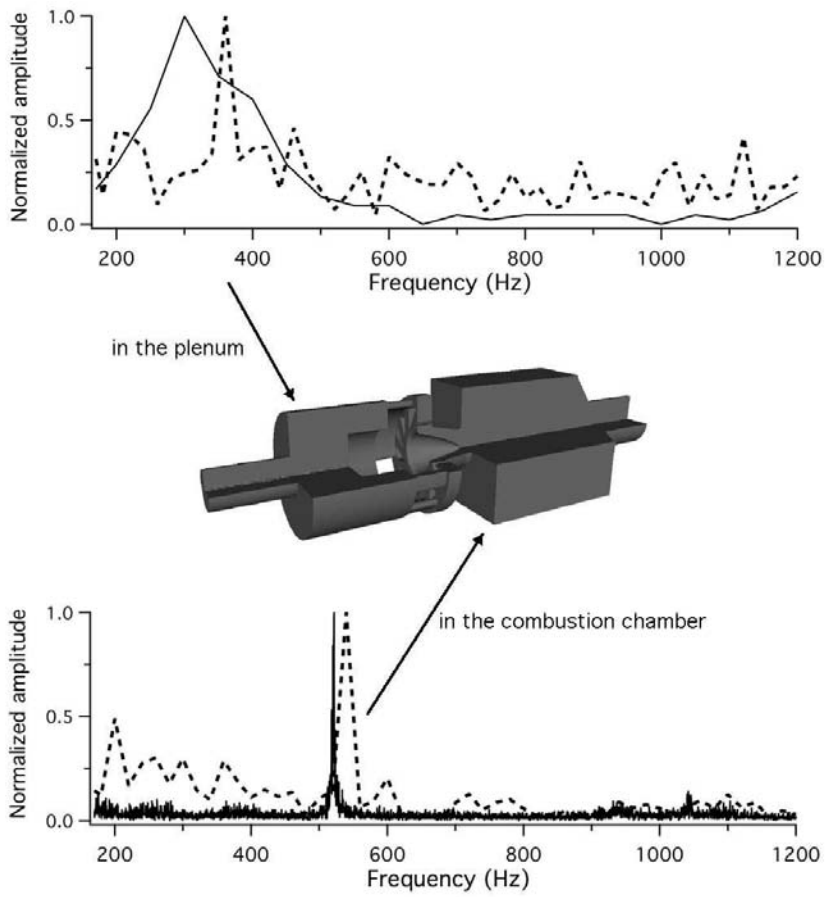


Fig. 12. Pressure fluctuations spectra for cold flow at two locations. Solid line: experiment; Dashed line: LES

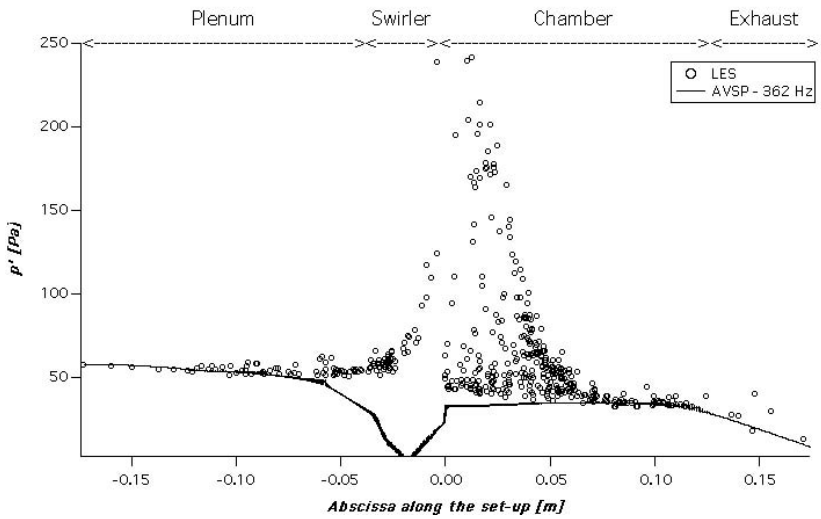


Fig. 13. Pressure fluctuations amplitude obtained by LES (circles) and acoustic (solid line) code for cold flow.

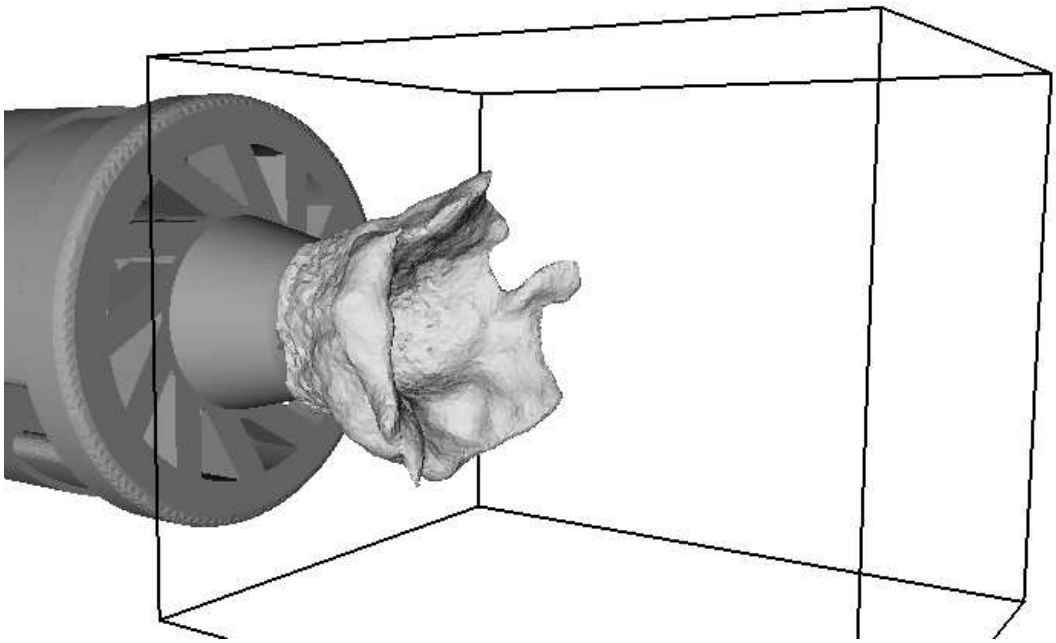


Fig. 14. Instantaneous 1250 K isosurface (LES data).

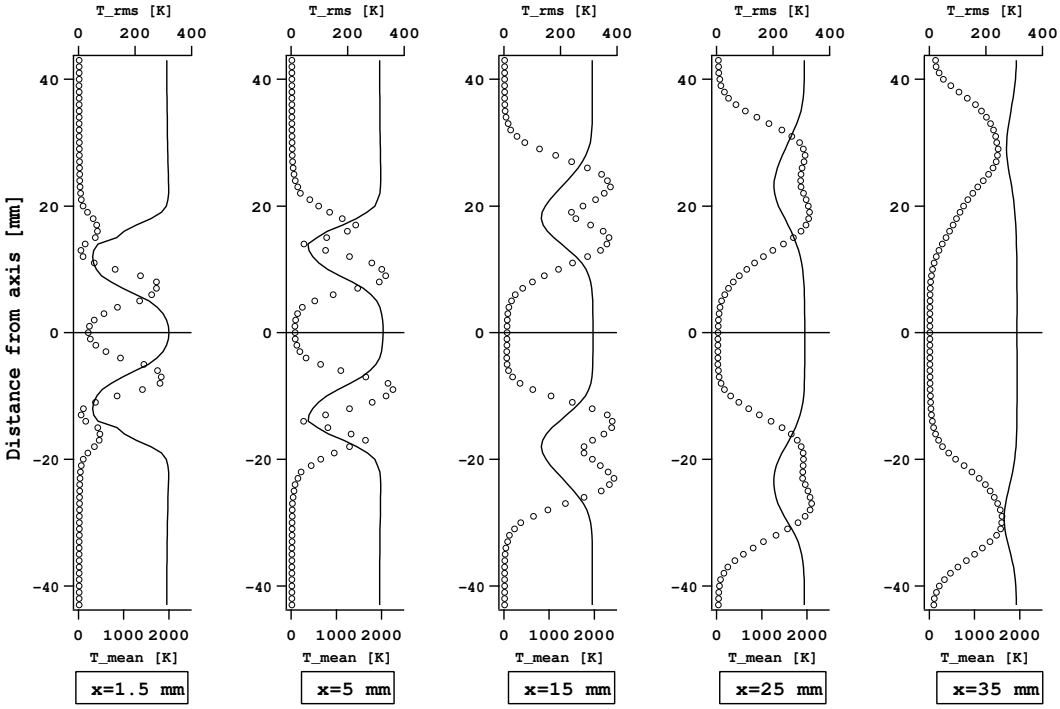


Fig. 15. Mean (solid line) and RMS (circles) temperature in the central plane of the combustor (LES data).

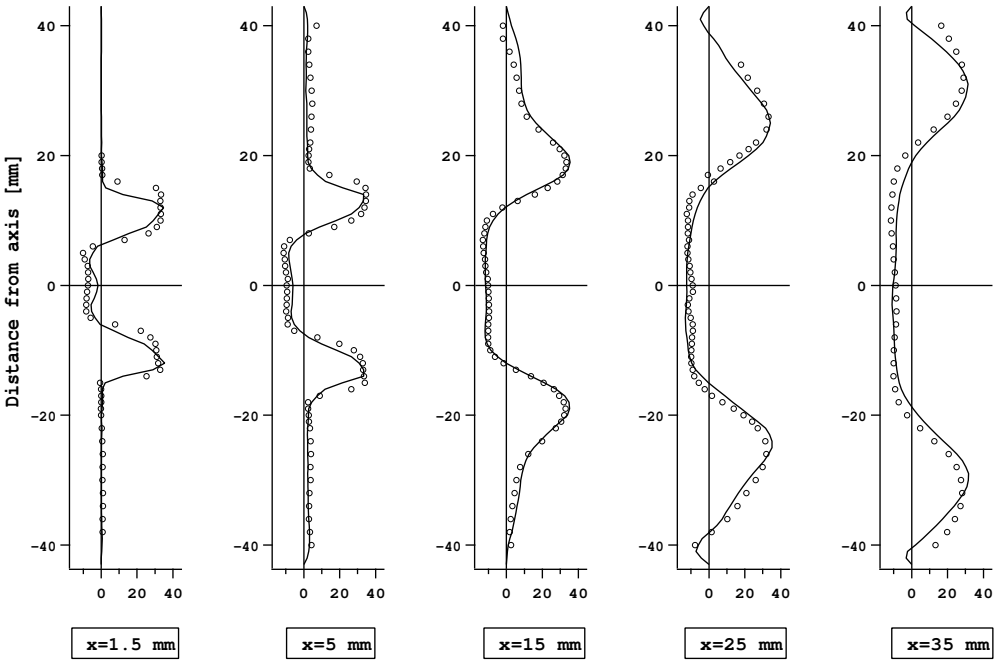


Fig. 16. Mean axial velocity in the central plane for reacting flow. ○ LDV; —— LES.

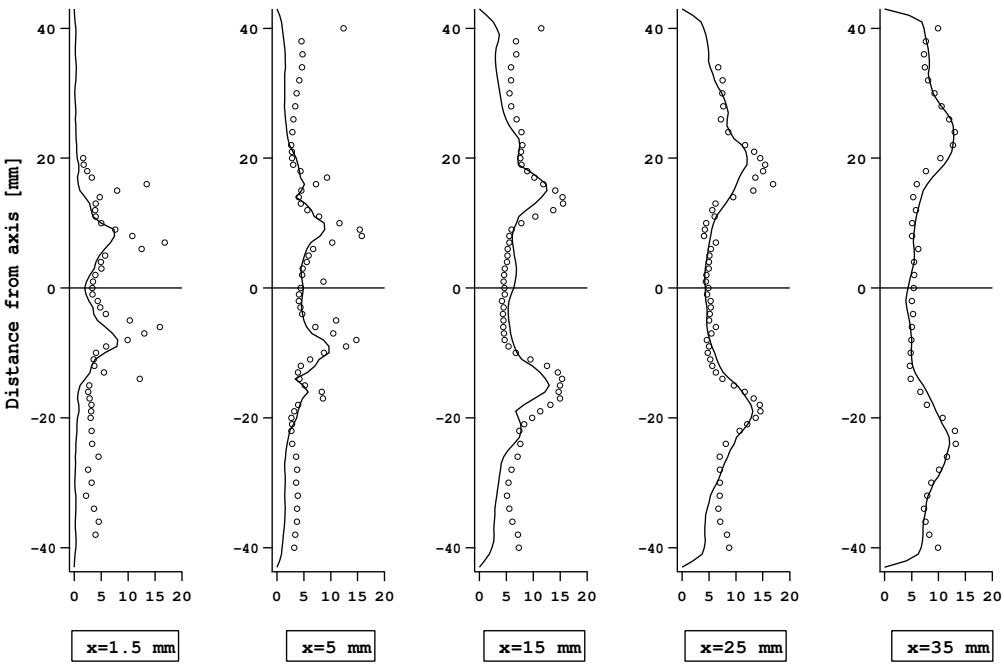


Fig. 17. RMS axial velocity in the central plane for reacting flow ○ LDV; —— LES.

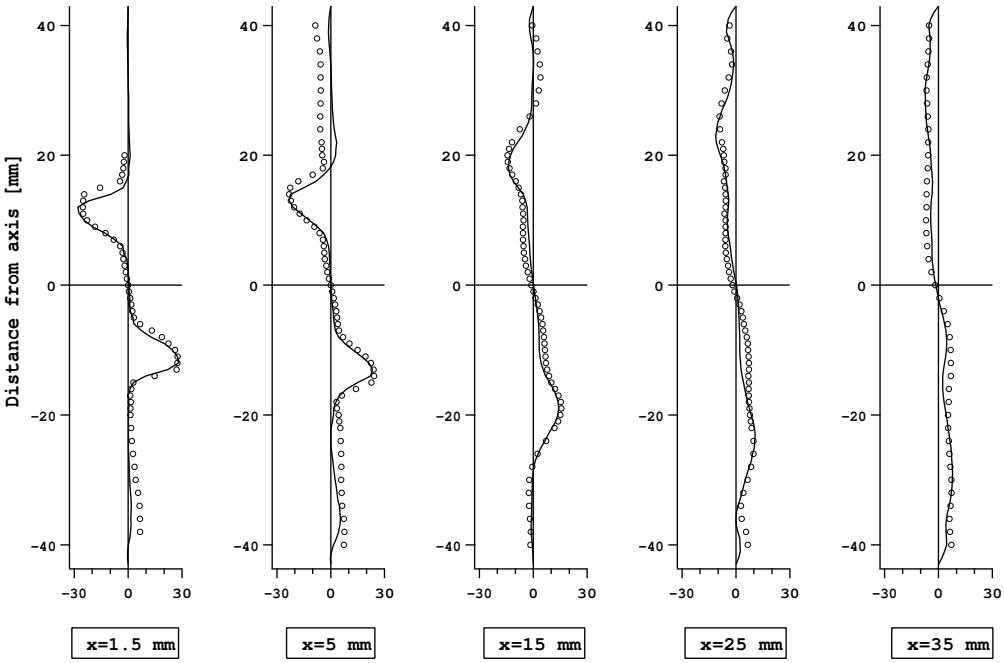


Fig. 18. Mean tangential velocity in central plane for reacting flow.
○ LDV; —— LES.

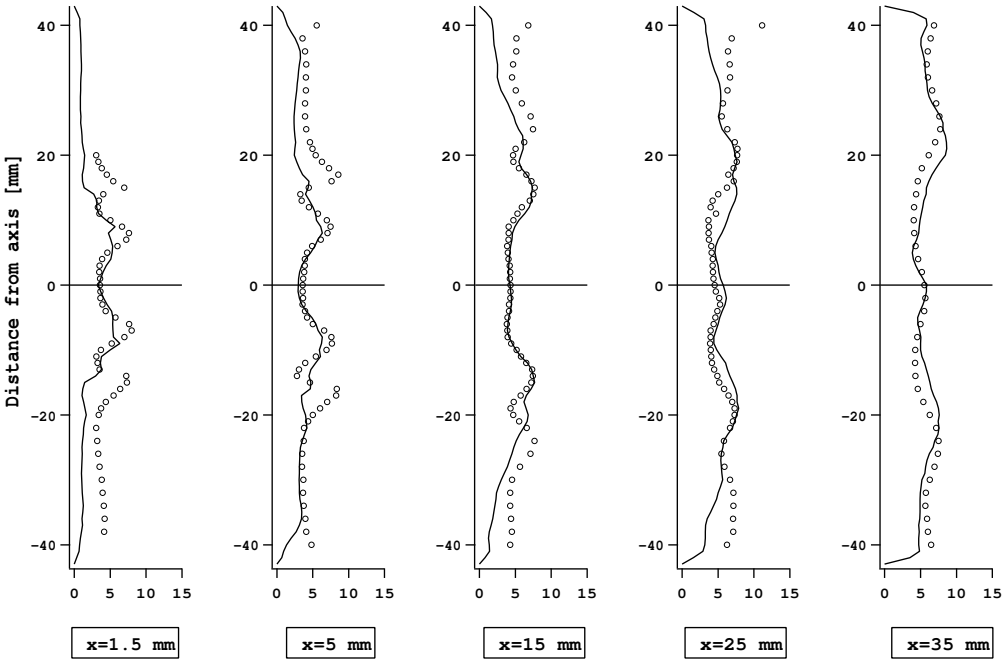


Fig. 19. RMS tangential velocity in central plane for reacting flow.
○ LDV; —— LES.

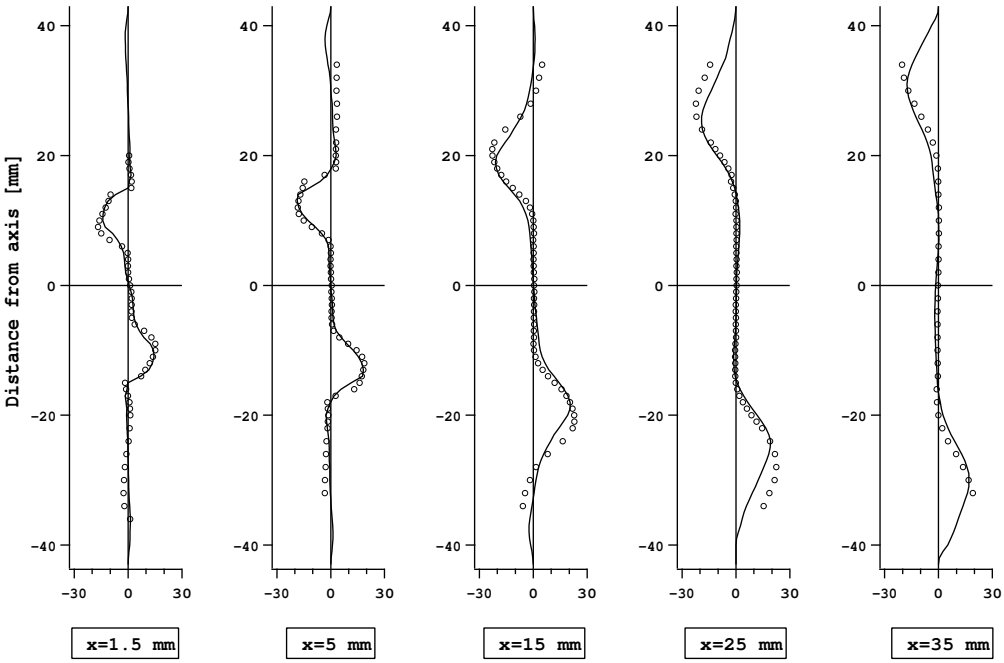


Fig. 20. Mean radial velocity in central plane for reacting flow. ○ LDV; —— LES.

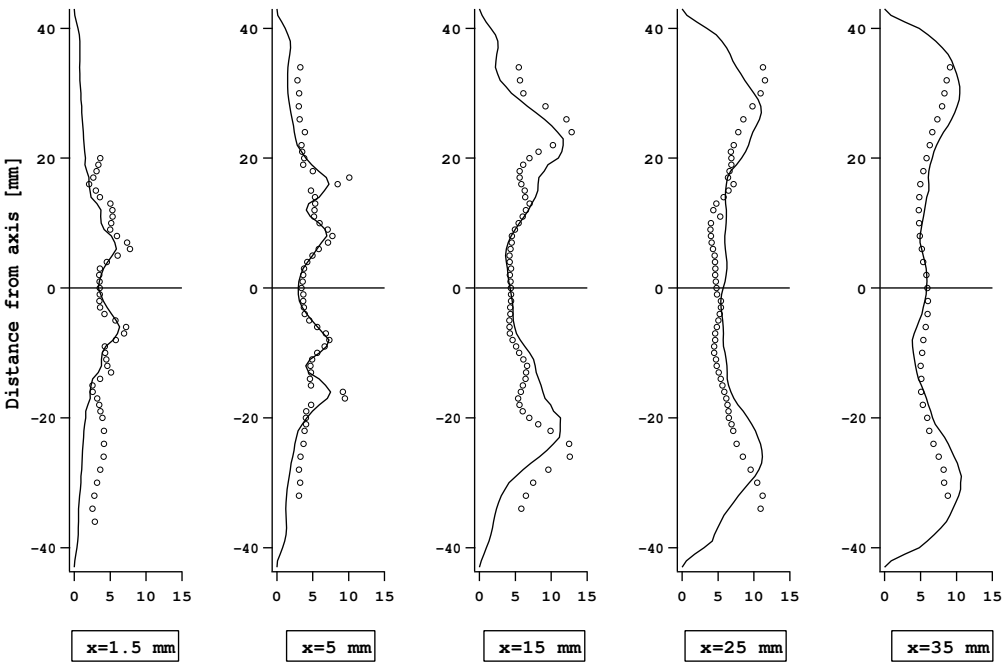


Fig. 21. RMS radial velocity in central plane for reacting flow. ○ LDV; —— LES.

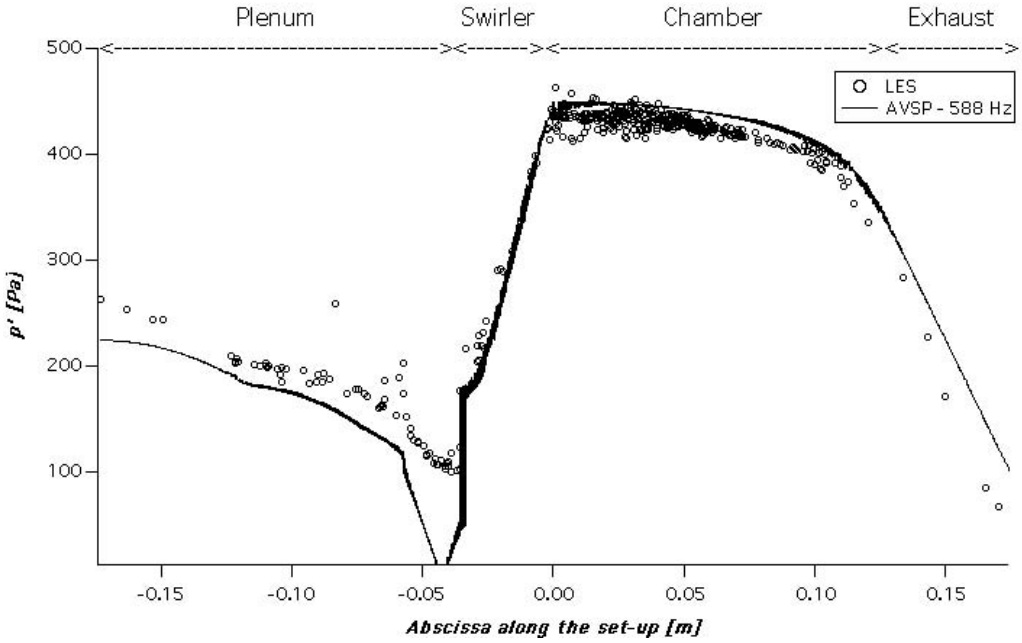


Fig. 22. Pressure fluctuations amplitude predicted by the LES code (circles) and the acoustic solver (line) for reacting flow.