



Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles

Pierre Benard

► **To cite this version:**

Pierre Benard. Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. INSA de Rouen, 2015. Français. <NNT : 2015ISAM0018>. <tel-01310811>

HAL Id: tel-01310811

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01310811>

Submitted on 3 May 2016

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.

THÈSE

présentée par

Pierre BENARD

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline : Énergétique
Spécialité : Mécanique des Fluides
Formation doctorale : Sciences Physiques, Mathématiques
et de l'Information pour l'Ingénieur
Laboratoire d'accueil : UMR-CNRS-6614-CORIA

Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles

soutenue le 8 octobre 2015

Membres du jury :

Rapporteurs :

Nasser Darabiha

Professeur, EM2C, Ecole Centrale Paris

Arnaud Mura

Directeur de Recherche CNRS, PPRIME, ENSMA Poitiers

Examineurs :

Xue-Song Bai

Professeur, Université de Lund (Suède)

Fabio Cozzi

Assistant Professor, Politecnico di Milano (Italie)

Vincent Giovangigli

Directeur de Recherche CNRS, CMAP, Ecole Polytechnique Paris

Christophe Goupil

Professeur, LIED, Université Paris Diderot

Directeurs de thèse :

Yves D'Angelo

Professeur, CORIA, INSA de Rouen

Vincent Moureau

Chargé de Recherche CNRS, CORIA, INSA de Rouen

Résumé : Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles

Réaliser un système de combustion à petite échelle reste aujourd'hui un défi. L'augmentation du rapport surface/volume favorise les pertes thermiques, contribue à la diminution du temps de séjour et limite la turbulence. Le premier objectif de cette thèse est de comprendre les phénomènes physiques intervenant dans un brûleur centimétrique tourbillonnaire de $8 \times 10 \times 8 \text{ mm}^3$ et mettre au point des outils numériques adaptés. L'écoulement réactif méthane/air est étudié au moyen de simulations numériques LES. La combustion ne consomme pas l'intégralité du carburant, entraînant un rendement de combustion de l'ordre de 50% et d'importantes émissions de polluants. Le deuxième objectif est d'adapter les performances de ce brûleur. L'enrichissement en hydrogène a montré une amélioration sensible du rendement et une réduction des émissions polluantes. Plusieurs configurations géométriques de la chambre ont aussi été étudiées, ce qui a permis de dégager des axes d'améliorations.

Mots-clés : Mesocombustion, Simulations aux grandes échelles, chimie complexe, enrichissement en hydrogène

Abstract : Analysis and improvement of a centimetric burner by Large-Eddy Simulations

Designing a meso-scale combustion system remains a challenging scientific and technological issue. Increasing the surface-to-volume ratio promotes wall heat losses, reduces the residence time and turbulence intensity. The main objective of this thesis is to understand the physical phenomena involved in the centimetre-sized asymmetric whirl cubic burner of $8 \times 10 \times 8 \text{ mm}^3$ and develop specific adapted numerical tools. The methane/air reactive flow is studied using detailed LES. While fuel and air are injected separately, combustion takes place in the premixed regime. However combustion is far from being complete, causing low combustion efficiency and significant emissions of pollutants. The second objective is to adapt in the best possible way the performances of this burner. Hydrogen enrichment of the fuel mixture showed significant efficiency enhancement and reduced pollutant emissions. Several other combustor geometries are also studied, paving the way for future improvement.

Keywords : Mesocombustion, Large-Eddy Simulation, Complex Chemistry, Hydrogen Enrichment

Remerciements

Ce manuscrit est l'achèvement de trois ans et demi de travaux de recherche. Par ces lignes, je tiens à remercier celles et ceux qui m'ont permis d'accomplir cette entreprise.

Tout d'abord, je remercie Nasser Darabiha et Arnaud Mura d'avoir accepté la charge de rapporteurs de cette thèse et l'ensemble des autres membres du jury pour avoir fait le déplacement jusqu'à Rouen à l'occasion de ma soutenance et jugé la qualité de mon travail. Je tiens spécialement à remercier Fabio Cozzi pour son éclairage d'expérimentateur, sa gentillesse et son accueil lors d'une semaine de travail à Milan.

Cette thèse s'est déroulée au laboratoire CORIA. Je remercie tout naturellement le directeur du laboratoire, Mourad Boukhalfa, ainsi que tous les personnels techniques et administratifs pour leur service et leur sympathie tout au long de ces années.

Pour m'avoir accepté en thèse et transmis une partie de son savoir, je remercie sincèrement mon directeur de thèse, Yves D'Angelo. Merci d'avoir cru en moi, de m'avoir permis de travailler en toute liberté et en toute confiance, de m'avoir fait progresser dans de nombreux domaines. Cette thèse a été aussi l'occasion pour moi de présenter mes résultats lors de nombreuses conférences, ce qui a été enrichissant à tous points de vue. Merci aussi pour cela.

Ces années n'auraient pas été les mêmes sans l'encadrement de deux grandes personnes : Vincent Moureau et Ghislain Lartigue. Merci Vincent pour ton encadrement, ta gentillesse et tes conseils avisés. J'ai toujours senti ton soutien, source de motivation évidente pour donner le meilleur de soi. Merci Ghislain, grand génie logiciel devant l'éternel, de répondre toujours présent quand on en a besoin. Ton aide et ton talent ont été précieux pour résoudre mes nombreux problèmes et questions ($\overline{w} ? ?$). C'était, et c'est toujours, un plaisir de travailler avec vous deux dans cette équipe YALES2. À vous ma sincère reconnaissance.

La bonne ambiance vécue au sein du groupe a été permise grâce aux thésards avec qui j'ai partagé plus ou moins de temps. Donc merci aux plus anciens : Jon, Xavier, Pec, Guimch, Mathias, Suresh, Nicolas, Benjamin, Chloé, Marianne. Un message particulier pour Catherine avec qui j'ai longtemps partagé le bureau et qui m'a beaucoup aidé en début de thèse. Viennent ensuite les doctorants de ma génération. Merci Lisa pour ta bonne humeur et tes connaissances sur la science du cheveu. Merci Lola pour ta (moins) bonne humeur (encore une trahison ?). Compagne de bureau, de course, de voiture (etc.), c'était un réel plaisir de partager ces moments. Merci Ben et Hasnae pour les nombreux moments passés ensemble à Rouen et ailleurs. Viennent ensuite les plus jeunes de l'équipe, Dorian, Nico, Bastien, Eu-

rielle, Thomas, et les encore plus jeunes Lancelot, Hakim, Nico, Yann mon stagiaire préféré, Umut. Bon courage pour vos thèses ! Merci aussi aux inclassables : Pradip, Alvin, Alex, David, Carlo...

Je tiens à tous vous remercier pour les nombreuses discussions, réunions, formations, conférences, pauses cafés, soirées, vacances partagés ensemble.

Pour finir, je remercie profondément toute ma famille et notamment mes parents et ma soeur pour leur présence et leurs encouragements tout au long de cette aventure. Merci aussi à mes amis caennais pour leur soutien sans faille, surtout ceux venus subir ma soutenance : Flo, Mat', Clem, Emeu et Estelle. Vous avez été une source de distraction indispensable pendant ces 3 ans. Enfin, je remercie cette thèse d'avoir mis sur ma route des personnes qui comptent pour moi aujourd'hui et avec qui d'autres aventures sont à vivre.

Table des matières

1	Contexte et objectifs de la thèse	13
1.1	Contexte industriel et développement de la combustion à petite échelle	13
1.2	Expertise du CORIA sur la mésocombustion et projet MESOTHERM	16
1.3	Objectifs de la thèse et plan du manuscrit	16
2	Etat de l'art de la mésocombustion	20
2.1	Définition	20
2.2	Avantages et inconvénients	22
2.3	Problématiques de la mésocombustion	22
2.3.1	Problèmes thermophysiques	23
2.3.2	Problèmes thermiques	24
2.3.3	Problèmes liés à la combustion	24
2.4	Utilisation de l'énergie issue de la mésocombustion et applications	26
2.5	Exemples de solutions technologiques pour la combustion à petite échelle	28
2.5.1	Combustion avec recirculation	28
2.5.2	Brûleurs catalytiques	32
2.5.3	Brûleur tourbillonnaire	34
2.6	Expériences menées au CORIA	40
2.6.1	Géométrie du brûleur MESO-CORIA	40
2.6.2	Résultats expérimentaux notables	41
2.6.3	Simulation numérique DNS	41
3	Equations de l'aérothermochimie	44
3.1	Propriétés d'un mélange	45
3.1.1	Composition d'un mélange	45
3.1.2	Description thermodynamique d'un mélange	45
3.1.3	Loi d'état mécanique	47
3.2	Ecriture des équations bilans	47
3.2.1	Equations de conservation	47
3.2.2	Expression des flux diffusifs dans le cas général	48
3.2.3	Hypothèses simplificatrices	49
3.2.4	Modélisation des phénomènes de transport	49
3.3	Modélisation de la chimie	53
3.3.1	La cinétique chimique	53
3.3.2	Méthodes de réduction du coût de la chimie	55

3.3.3	Variables caractéristiques liées à la flamme	57
3.4	Extension des équations au formalisme LES	60
3.4.1	Introduction à la turbulence	60
3.4.2	Simulation d'écoulements turbulents : approches DNS / LES / RANS	62
3.4.3	Etablissement des équations filtrées de la LES	63
3.4.4	Modélisation de sous-maille pour la turbulence	64
3.4.5	Modèles de combustion turbulente	66
3.5	Le modèle d'épaississement de flamme : TFLES	67
3.5.1	Principe général	67
3.5.2	Conditions sur l'épaississement \mathcal{F}	68
3.5.3	Interaction flamme-turbulence	68
3.5.4	Expression dynamique du modèle TFLES	70
3.6	Résolution numérique dans YALES2	71
3.6.1	Difficultés de résolution des équations bilans	71
3.6.2	Stratégies adoptées et concepts généraux de YALES2	72
3.6.3	Solveur incompressible à densité constante (ICS)	78
3.6.4	Solveur incompressible dilatable (VDS)	80
3.6.5	Résolution de l'équation de Poisson	82
4	Etude de l'écoulement non-réactif dans le brûleur centimétrique	84
4.1	Introduction	85
4.1.1	Objectifs	85
4.1.2	Description du cas de calcul	85
4.2	Analyse phénoménologie	86
4.2.1	Caractéristique tourbillonnaire de l'écoulement	86
4.2.2	Etude de la turbulence	89
4.2.3	Analyse du mélange	91
4.2.4	Distribution en temps de séjour	94
4.3	Influence des paramètres numériques	97
4.3.1	Convergence en maillage	97
4.3.2	Etudes des modèles de turbulence de sous-maille	100
4.4	Adaptation de maillage en parallèle	104
4.4.1	Critères d'adaptation	105
4.4.2	Evaluation des critères	107
4.4.3	Méthodologie d'adaptation en parallèle sur configuration complexe	111
4.4.4	Application sur le brûleur centimétrique	118
4.4.5	Perspectives	125
4.5	Conclusions	126
5	Etude de l'écoulement réactif dans le brûleur centimétrique	128
5.1	Calculs préliminaires	129
5.1.1	Choix de modélisation de la chimie	129
5.1.2	Flammes laminaires 1D	131
5.1.3	Interaction flamme-paroi	134
5.1.4	Etude de la convergence en maillage : bec bunsen 2D	139

5.2	Etude de la combustion air-méthane dans le brûleur centimétrique MESO-CORIA	142
5.2.1	Présentation du cas de calcul	142
5.2.2	Topologie de l'écoulement	143
5.2.3	Structure de flamme	146
5.2.4	Régime de combustion	147
5.2.5	Performances du brûleur	149
5.2.6	Performances de calcul	151
5.3	Impact de l'enrichissement en hydrogène	152
5.3.1	Intérêt	152
5.3.2	Validation sur flammes 1D	153
5.3.3	Description des cas de calcul 3D	155
5.3.4	Topologie de l'écoulement réactif	155
5.3.5	Performances	159
5.3.6	Polluants	162
5.4	Conclusions	162
6	Amélioration de la forme du brûleur centimétrique	165
6.1	Stratégie de réduction du coût de calcul	165
6.1.1	Introduction	165
6.1.2	Implantation du modèle TFLES	166
6.1.3	Validation sur flammes laminaires 1D	170
6.1.4	Interaction flamme-turbulence : cas test flamme-tourbillons 2D	172
6.2	Validation de la stratégie sur la configuration MESO-CORIA	179
6.2.1	Présentation des calculs	179
6.2.2	Topologie de l'écoulement	180
6.2.3	Performances globales et polluants	186
6.2.4	Performances de calcul	187
6.3	Amélioration de la forme du brûleur	188
6.3.1	Méthodologie	188
6.3.2	Configurations étudiées	189
6.3.3	Paramètres physiques et numériques	191
6.3.4	Etude de l'écoulement réactif	191
6.3.5	Performances	193
6.4	Conclusion	197
7	Conclusions et perspectives	200
7.1	Conclusions	200
7.2	Perspectives	202
7.2.1	Amélioration des performances de brûleurs centimétriques	202
7.2.2	Adaptation de maillage	203
A	Algorithme de répartition de charge	206
A.1	Principe	206
A.2	Détails de l'algorithme	206
A.3	Performances avant optimisation	208

A.4	Optimisation	209
A.4.1	Ajout de communicateurs internes	209
A.4.2	Initialisation des communications point-à-point	211
	Table des figures	213
	Liste des tableaux	220
	Bibliographie	223

Chapitre 1

Contexte et objectifs de la thèse

Sommaire

1.1	Contexte industriel et développement de la combustion à petite échelle	13
1.2	Expertise du CORIA sur la mésocombustion et projet MESOTHERM	16
1.3	Objectifs de la thèse et plan du manuscrit	16

1.1 Contexte industriel et développement de la combustion à petite échelle

Un progrès technologique : la miniaturisation

Depuis le XIX^{ème} siècle, le développement industriel et technologique a suivi une évolution extraordinaire, qui s'est encore accélérée au XX^{ème} siècle. Les découvertes scientifiques se sont multipliées dans de nombreux secteurs d'activité : transport, santé, information et communication, énergie... Elles permettront de grandes évolutions sociales et sociétales comme l'allongement de l'espérance de vie ou le déplacement en automobile, avion ou même fusée.

La troisième révolution industrielle a débuté dans les années 1970 mais n'a véritablement émergé qu'à la fin du XX^{ème} siècle avec l'informatique. C'est elle qui voit l'invention d'Internet (1969), du microprocesseur (1971) et de l'ordinateur personnel (1977). Ces inventions vont largement s'améliorer et se diffuser à l'ensemble de l'économie. En parallèle de cette évolution, on assiste également à une course à la miniaturisation des systèmes électroniques et énergétiques, tirée par une demande pour des appareils personnels toujours plus performants et toujours plus compacts.

Les récentes et plus visibles applications dans la société civile sont les ordinateurs et téléphones portables. La taille des ordinateurs, par exemple, est passée d'une salle entière, comme l'ENIAC à la fin des années 1940 (Fig. 1.1 (a)), à quelques centimètres cubes aujourd'hui avec des performances incomparables (de quelques centaines d'opérations par seconde à 10^{12} , soit un téraFLOPS¹, pour les meilleurs ordinateurs personnels).

Les progrès sur la microélectronique, couplés à ceux de la micromécanique, ont donné naissance à de nouvelles applications dans la robotique. Depuis quelques années, on parle beaucoup des drones, ces véhicules volants sans humain embarqué, télécommandés ou autonomes. Les missions de ces appareils peuvent être militaires (renseignement, combat) ou civiles (exploration, transport). On peut aussi citer

1. FLOPS est un acronyme signifiant « opérations à virgule flottante par seconde » (en anglais, *F*loating-*p*oint *O*perations *P*er *S*econd). Le nombre de FLOPS est une mesure commune de la vitesse d'un système informatique.



FIGURE 1.1: Photo de l'ENIAC, premier ordinateur électronique complet en 1946 (source : Wikimedia) (a) et le Kinetic KL03 de Freescale, le microcontrôleur ARM le plus petit du monde (2014), posé sur une balle de golf (source : www.silicon.fr) (b). Le microcontrôleur est 50 000 fois plus petit mais 400 000 fois plus performant que l'ENIAC.

d'autres exemples d'applications alliant microélectronique et électromécanique dans le domaine médical (microsondes, microchirurgie, implants à impact faible, imagerie), ou celui de la chimie (analyseurs chimiques miniatures et parallèles) ou de la communication (micro-satellites) [111, 151, 70].

La tendance générale à la miniaturisation profite également des arguments liés aux économies d'énergie, autre problématique industrielle actuelle. A priori, l'utilisation de systèmes plus petits s'accompagne d'une réduction de la consommation en énergie. Leur fabrication est aussi synonyme d'une moindre consommation de ressources matérielles et d'énergie, et s'accompagne d'une réduction des emballages.

La source d'énergie : facteur limitant

La réduction de consommation d'énergie permet à certains systèmes d'être autonomes. Si on ajoute une réduction de poids, ces derniers deviennent portables. Ils se doivent dès lors d'emporter une source d'énergie, le plus souvent électrique. La demande en énergie s'étend de quelques watts à plusieurs centaines de watts suivant les applications.

Parmi les sources d'alimentation électrique les plus utilisées, on recense deux grands types de batteries chimiques :

- les batteries primaires, communément appelé piles : elles sont non-rechargeables (utilisables une seule fois), ce qui peut entraîner un coût d'utilisation élevé,
- les batteries secondaires : basées souvent sur du lithium ou du nickel, elles sont rechargeables mais perdent de leur capacité avec le temps, se déchargent passivement et sont sensibles aux conditions climatiques.

Bien que les batteries chimiques représentaient un marché de 37 milliards de dollars en 2005 [61], elles montrent plusieurs limites. Ces batteries présentent des inconvénients environnementaux (utilisation de produits chimiques toxiques : mercure dans certaines piles alcalines, plomb, cadmium...), politiques (le lithium couramment utilisé dans les batteries secondaires est principalement produit en Bolivie ou Afghanistan, régions politiquement instables). Mais leur plus grand défaut reste leurs faibles performances : temps de recharge long, coût et poids élevés et une faible densité énergétique (énergie contenue par unité de masse), de l'ordre de 0.2 kWh.kg^{-1} [70]. Ce principal défaut peut même devenir limitant dans la création d'applications très énergivores.

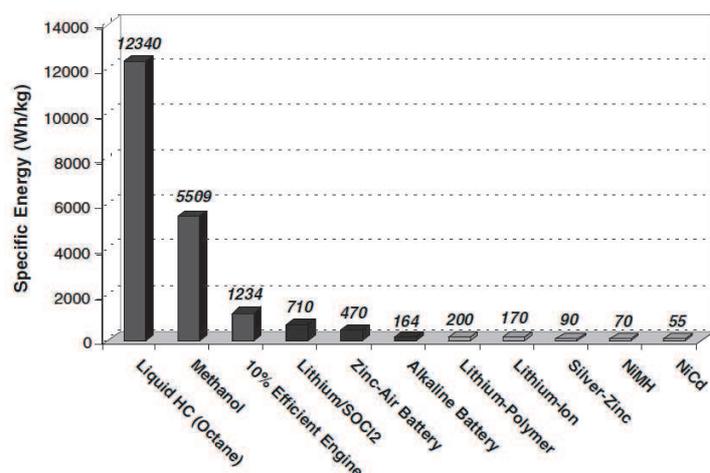


FIGURE 1.2: Energie par unité de masse pour différentes sources d'énergie, tiré de [70].

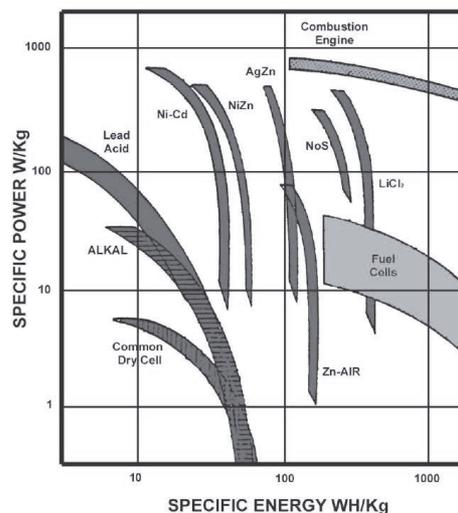


FIGURE 1.3: Diagramme de Ragone : comparaison des performances des techniques de stockage d'énergie, tiré de [43].

Malgré l'amélioration continue des batteries, de nouvelles voies s'ouvrent vers de nouveaux systèmes de génération d'énergie innovants. Parmi ceux-ci, on trouve la combustion à petite échelle.

Une autre voie : la combustion à petite échelle

La combustion constitue la principale source d'énergie de l'histoire et représente toujours aujourd'hui plus de 80 % de l'énergie mondiale produite, d'après l'Agence Internationale de l'Énergie (IEA). Les hommes ont bien compris, au cours du temps, la capacité énergétique des différents carburants : bois, charbon, pétrole, gaz.

C'est toujours cette densité énergétique qui cherche à être exploitée aujourd'hui via la recherche sur des systèmes de génération d'énergie de petite taille basés sur la combustion. Les carburants hydrogénés ou hydrocarbonés présentent d'importantes densités énergétiques : jusqu'à 12 kWh.kg^{-1} pour l'isooctane (Fig. 1.2) et même plus de 33 kWh.kg^{-1} pour l'hydrogène [54], soit 10 à 50 fois ce que permettent les batteries chimiques.

Comme le montre la figure 1.2, un générateur d'électricité basé sur la combustion de carburants hydrocarbonés et ayant un rendement global de 10 % permettrait d'égaliser voire dépasser les performances des meilleures batteries actuelles. En terme de puissance, la combustion est aussi supérieure aux batteries, comme observé sur le diagramme de Ragone de la Fig. 1.3. Alors que la plupart des batteries chimiques plafonnent entre 100 et 500 W.kg^{-1} , un moteur avec combustion permet d'approcher 1000 W.kg^{-1} .

Puisque l'énergie produite est à destination d'applications réduites, la source d'énergie est de petite taille : on parle ici de combustion à petite échelle ou mésocombustion (pour combustion à l'échelle du centimètre). Les expressions macrocombustion et microcombustion désignent respectivement la combustion à l'échelle supérieure (dizaines de centimètres) et inférieure (moins de 1 mm) à la mésocombustion. Comme tout système traditionnel, l'énergie libérée par la combustion peut être convertie en électricité, en travail mécanique, servir à la propulsion ou au chauffage/dégivrage.

Un système basé sur la mésocombustion présente de multiples avantages : il est compact, durable (il ne perd pas, ou peu, de capacité avec le temps), efficace (il peut développer toute sa puissance presque

immédiatement), léger et instantanément rechargeable. Mais en contrepartie, la mésocombustion pose de nombreux problèmes technologiques. Réduire la taille d'une chambre de combustion classique (de l'ordre de la dizaine de centimètres cubes) engendre des problèmes d'échelles cruciaux qui affectent grandement le rendement du système. Néanmoins, un système basé sur la combustion jouit d'une grande flexibilité : la cogénération qui consiste à coupler plusieurs méthodes d'extraction d'énergie (turbine + extraction de la chaleur des gaz chauds) en fait une perspective qui intéresse de nombreuses équipes de recherche ainsi que des industriels.

L'intérêt et le défi que représente la mésocombustion en fait une thématique de recherche mondialement étudiée.

1.2 Expertise du CORIA sur la mésocombustion et projet MESOTHERM

La combustion à petite échelle est un sujet de recherche au sein du laboratoire CORIA depuis 2008. Les travaux de deux doctorantes, en collaboration avec le Politecnico de Milan et l'Université de Cambridge, ont permis d'effectuer une étude expérimentale et numérique sur une chambre de combustion cubique de 640 mm^3 . Ces premières études académiques ont permis d'identifier des paramètres déterminants de la performance du brûleur, et d'analyser certains mécanismes de l'écoulement réactif pour différents régimes de fonctionnement.

Au sein du Labex *EMC3*², un projet de recherche transverse alliant les laboratoires CORIA (Rouen) et CRISMAT (Caen) a démarré en février 2012 sous le nom MESOTHERM pour "MESOCOMBUSTION et THERMOÉLECTRICITÉ". Le but de ce projet est de concevoir et réaliser un démonstrateur de générateur d'électricité sans parties mobiles, composé d'une chambre de combustion de taille centimétrique (la source de chaleur) et de matériaux thermoélectriques qui transforment la chaleur en électricité par effet Seebeck.

A l'intérieur du projet MESOTHERM, une partie de la recherche concerne la chambre de combustion centimétrique. Ce travail fait l'objet du financement d'une thèse qui est l'objet de ce manuscrit.

1.3 Objectifs de la thèse et plan du manuscrit

Dans le cadre du projet MESOTHERM, cette thèse a pour objectif d'étudier et comprendre les phénomènes physiques régissant l'écoulement réactif dans les brûleurs centimétriques et de proposer des éléments d'amélioration des performances pour ces systèmes. A cette fin, la chambre de combustion centimétrique tourbillonnaire analysée expérimentalement au CORIA a été étudiée par simulations numériques LES avec chimie et transport détaillés. Dans le but d'améliorer les performances du brûleur centimétrique, deux pistes ont été exploitées au cours de ces travaux : l'enrichissement en hydrogène du mélange de carburant et la modification de la géométrie. Ce travail a nécessité le développement et la mise au point de stratégies de calcul alliant précision des résultats et faible temps de retour.

Afin de répondre aux objectifs, les travaux menés lors de la thèse sont rassemblés dans ce manuscrit décomposé en 7 chapitres. Il se présente de la manière suivante :

2. Le "Laboratoire d'Excellence" *EMC3*, pour "Energy Materials and Clean Combustion Center", est un centre de recherche consacré aux matériaux pour l'énergie et la combustion propre. Créé en 2011 dans le cadre de l'appel à projets "Laboratoire d'Excellence" du Programme d'Investissement d'Avenir du gouvernement français, il regroupe sept laboratoires normands de Caen, Rouen et Le Havre. Plus d'informations sur www.labex-emc3.fr.

Chapitre 1 Contexte.

Ce présent chapitre a permis de poser le contexte industriel de l'étude, présenter l'avancement des travaux au CORIA et les objectifs de la thèse.

Chapitre 2 Etat de l'art de la mésocombustion.

Ce chapitre est l'occasion de définir la mésocombustion d'un point de vue phénoménologique, à la lumière de la littérature scientifique sur le sujet. Les avantages et problématiques scientifiques posés par cette approche sont présentés. Est également proposée une liste non exhaustive de solutions technologiques tirées de publications scientifiques et répondant au défi de la combustion à petite échelle. Le brûleur étudié au CORIA est présenté plus en détails au travers des résultats expérimentaux et numériques déjà obtenus.

Chapitre 3 Equations de l'aérothermochimie.

Le Chapitre 3 rappelle les équations régissant le mouvement d'un fluide réactif. Une attention particulière est portée sur les phénomènes de transport et l'évaluation des termes sources chimiques. L'hypothèse de faible de nombre de Mach est exposée, le formalisme LES et le modèle d'épaississement de flamme utilisé au cours de cette thèse font également l'objet de ce chapitre. Les caractéristiques du code de calcul YALES2 ainsi que les choix de modélisation sont présentés.

Chapitre 4 Etude de l'écoulement non-réactif dans le brûleur centimétrique.

Ce chapitre porte sur l'écoulement non-réactif dans le brûleur centimétrique du CORIA. La phénoménologie de l'écoulement, l'apparition de l'écoulement turbulent, le mélange et la distribution en temps de séjour y sont décrits. Une analyse de sensibilité aux paramètres numériques tels que l'influence du maillage et du modèle de turbulence est également effectuée.

Dans un objectif de réduction des coûts de calcul, une stratégie d'adaptation de maillage automatique et parallèle est proposée afin d'assurer une bonne fidélité des résultats. Différents critères d'adaptation pour des écoulements non-réactifs sont définis. L'adaptation de maillage est appliquée au brûleur du CORIA.

Chapitre 5 Etude de l'écoulement réactif dans le brûleur centimétrique.

Dans ce chapitre, une stratégie de calcul pour les écoulement réactifs dans les chambres de combustion centimétriques est présentée et validée sur des cas tests simples. Un premier calcul LES réactif 3D méthane-air dans le brûleur du CORIA permet de mieux comprendre les mécanismes physiques en jeu. Les performances du brûleur sont mis en parallèle avec l'analyse de l'écoulement réactif. Afin d'améliorer les performances du brûleur, l'enrichissement en hydrogène du mélange de carburant est testé sur deux points de fonctionnement. Ces résultats numériques sont comparés aux résultats expérimentaux.

Chapitre 6 Amélioration de la forme du brûleur centimétrique.

L'amélioration des performances est aussi étudiée grâce à la modification de la forme du brûleur centimétrique. Des géométries basées sur une forme cylindrique, plutôt que cubique, sont testées. Pour réduire le coût de calcul et augmenter le nombre de configurations étudiées, une stratégie de calcul utilisant des maillages avec une résolution plus grossière que dans le chapitre précédent et le modèle d'épaississement de flamme est proposée.

Chapitre 7 Conclusion et perspectives.

Ce dernier chapitre apporte une conclusion générale de l'étude et propose des perspectives de recherche à la fois sur l'amélioration des performances des brûleurs centimétriques ainsi que sur l'adaptation de maillage.

Chapitre 2

Etat de l'art de la mésocombustion

Ce chapitre est l'occasion de définir la mésocombustion d'un point de vue phénoménologique, à la lumière de la littérature scientifique sur le sujet. Les avantages et problématiques scientifiques posés par cette approche sont présentés. Est également proposée une liste non exhaustive de solutions technologiques tirées de publications scientifiques et répondant au défi de la combustion à petite échelle. Le brûleur étudié au CORIA est présenté plus en détails au travers des résultats expérimentaux et numériques déjà obtenus.

Sommaire

2.1 Définition	20
2.2 Avantages et inconvénients	22
2.3 Problématiques de la mésocombustion	22
2.3.1 Problèmes thermophysiques	23
2.3.2 Problèmes thermiques	24
2.3.3 Problèmes liés à la combustion	24
2.4 Utilisation de l'énergie issue de la mésocombustion et applications	26
2.5 Exemples de solutions technologiques pour la combustion à petite échelle	28
2.5.1 Combustion avec recirculation	28
2.5.2 Brûleurs catalytiques	32
2.5.3 Brûleur tourbillonnaire	34
2.6 Expériences menées au CORIA	40
2.6.1 Géométrie du brûleur MESO-CORIA	40
2.6.2 Résultats expérimentaux notables	41
2.6.3 Simulation numérique DNS	41

2.1 Définition

Le développement technologique et les nouveaux usages mènent au développement de nouvelles sources d'énergie toujours plus performantes et adaptées à l'application concernée. La combustion à petite échelle est l'une d'entre elles.

Par petite échelle, on entend des systèmes plus petits que les systèmes de combustion traditionnels tels que les foyers aéronautiques, les moteurs à combustion internes ou les fours industriels. Ces derniers ont des tailles caractéristiques qui s'étendent de la dizaine de centimètres à plusieurs mètres. Pour toute

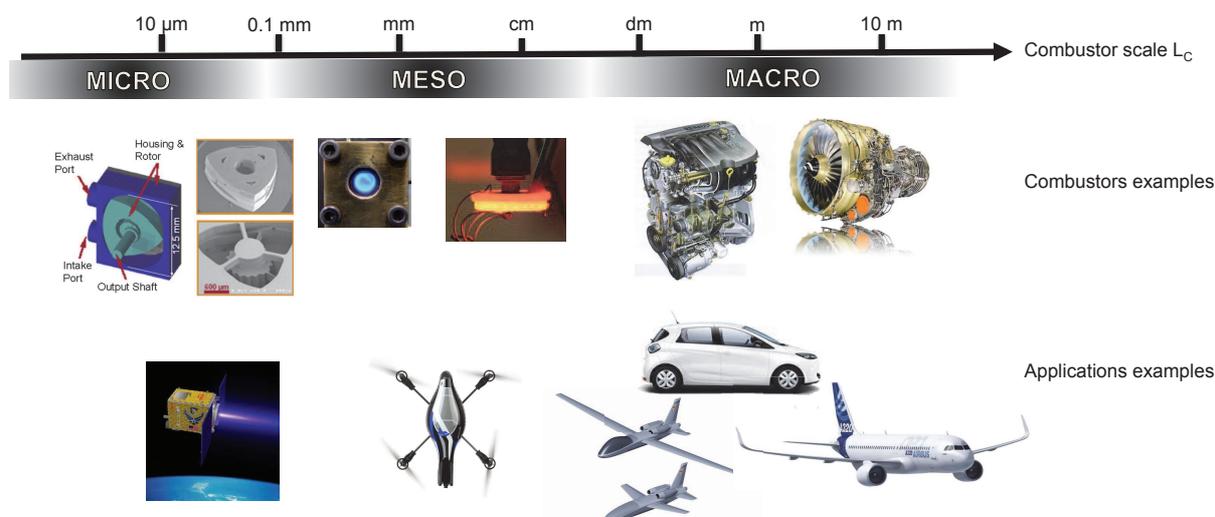


FIGURE 2.1: Echelle de tailles caractéristiques des chambres de combustion, exemples de brûleurs et d'applications.

chambre de combustion de taille inférieure à ces systèmes conventionnels, cette **combustion à petite échelle** pourra, dans le langage courant, être qualifiée de microcombustion. Bien que l'on se trouve loin de l'échelle microscopique, on trouve des applications tels que micro-turbines à gaz ou micro-brûleurs.

La littérature scientifique s'accorde cependant à définir plus précisément cette combustion à petite échelle [70, 111]. En effet, suivant la taille du système, les mécanismes mis en jeu et les phénomènes physiques afférents peuvent conduire à des comportements qualitativement différents de ceux observés sur les macro-systèmes. Par exemple, la définition donnée par Fernandez-Pello [70] est basée sur la longueur physique du système. Ainsi, on appellera :

- **Mésocombustion**, la combustion pour un système d'une taille variant de 1 à 10 mm,
- **Microcombustion**, la combustion dans des brûleurs de $1 \mu\text{m}$ à 1 mm.

Cette définition est illustrée sur une échelle de taille physique caractéristique de la chambre de combustion par la Fig. 2.1. Afin de différencier la combustion des plus petits systèmes avec les plus grands, la combustion des systèmes conventionnels est appelée macrocombustion.

Il existe aussi une autre définition basée sur la distance d'extinction (ou de coincement) [53]. La distance d'extinction ("*quenching diameter*") est la distance au mur à laquelle une flamme s'éteint. Grossièrement, cette extinction est pilotée par la perte thermique qui augmente à mesure que diminue la distance entre le front de flamme et la paroi. La combustion est alors appelée microscopique (respectivement mésoscopique) si la taille de la chambre de combustion est inférieure (supérieure) à cette distance d'extinction. Cette définition fait donc appel directement à une longueur caractéristique de la flamme et est préférée dans certaines études sur la combustion microscopique.

L'ensemble de ces définitions est résumé dans le tableau 2.1.

Dans le cadre de cette thèse, on parlera de combustion à petite échelle en terme de problématique. Cependant, l'ensemble des travaux effectués se sont concentrés sur des brûleurs mésoscopiques, avec des tailles allant de plusieurs millimètres à un peu plus d'un centimètre. On définira la mésocombustion comme le régime de combustion dont la taille caractéristique est proche de la distance d'extinction mais reste sensiblement supérieure à 1 mm [111, 37].

Définition basée sur	Régime de combustion	Longueur	Applications
Longueur physique	Mésoscopique	1 – 10 mm	MEMS
	Microscopique	1 – 1000 μm	Propulseur
Distance d'extinction	Mésoscopique	\sim Distance d'extinction	Générateur d'énergie
	Microscopique	Distance d'extinction \sim libre parcours moyen	Convertisseur d'énergie
Taille du système	Microscopique	Plus petit que les systèmes conventionnels	Micro-satellites Drônes

TABLE 2.1: Définitions de la combustion mésoscopique et microscopique à partir de différentes longueurs caractéristiques, reproduit de [111]. MEMS est l'acronyme anglais pour les systèmes électromécaniques microscopiques.

2.2 Avantages et inconvénients

En plus de tirer parti de la forte densité énergétique des carburants hydrocarbonés, d'autres avantages s'ajoutent :

- les carburants hydrocarbonés sont facilement transportables et relativement sûrs,
- de tels systèmes sont assez facilement miniaturisables et leur production de masse peut être faite à bas coût en utilisant des méthodes de prototypage rapide par exemple,
- le rechargement pourrait se faire sans coupure du système en fonctionnement, ce qui peut s'avérer décisif pour certaines applications [70],
- un tel système pourrait adapter la puissance qu'il délivre,
- une baisse de puissance en cours d'utilisation ne devrait pas être rencontré, contrairement aux batteries,
- la performance ne diminue pas après un certain nombre de cycles de rechargement à l'inverse des batteries rechargeables.

Néanmoins, une difficulté se pose concernant le rendement de telles sources d'énergie en dehors de la gestion de la combustion elle-même. Cela s'explique par la taille réduite de ces systèmes et donc des problèmes liés à la fabrication : la tolérance mécanique dans les parties mobiles est limitante et peut engendrer des fuites et des rendements dégradés. Aussi, la gestion thermique de l'appareil peut s'avérer difficile et provoquer non seulement une baisse de l'efficacité de chaque composant individuellement (compresseur, chambre de combustion) mais également du système entier si chaque composant est mal adapté.

2.3 Problématiques de la mésocombustion

Avec la réduction de la taille de la chambre de combustion, de nombreuses problématiques apparaissent. Pour une taille caractéristique de $L_c = 10^{-3}$ m et avec le libre parcours moyen de l'air ou d'autres gaz $\lambda \approx 10^{-8}$ m, le nombre de Knudsen est de l'ordre de $Kn = \lambda/L_c \approx 10^{-5}$, soit très inférieur à 1. L'hypothèse de continuité de la mécanique des fluides peut toujours être utilisée pour ce type de systèmes : le comportement physico-chimique demeure le même que dans les macro-systèmes.

Cependant, des caractéristiques particulières apparaissent pour les micro et méso-systèmes concernant la mécanique des fluides, les transferts de chaleur et la combustion [70]. Dans la suite de cette

section, des nombres adimensionnels ou caractéristiques décrivant différents phénomènes physiques seront utilisés. Les variables servant à calculer ces nombres sont la taille caractéristique du système L_c , la vitesse de l'écoulement du fluide U , la viscosité du mélange ν , sa diffusivité thermique α , sa masse volumique ρ et le terme source chimique ω . On peut définir une surface comme $S = L_c^2$, le volume $V = L_c^3$ et un débit $\dot{m} = \rho L_c U$.

2.3.1 Problèmes thermophysiques

Le temps de résidence diminue proportionnellement avec la taille caractéristique du système (à vitesse d'écoulement constante) :

$$\tau_{res} \propto \frac{V\rho}{\dot{m}} \propto \frac{V}{SU} \propto \frac{L_c}{U}. \quad (2.1)$$

Pour des problématiques de conception, ce temps de résidence est à comparer au temps chimique. Ce dernier est indépendant de la taille du système et peut être approché par $\tau_{chem} \approx \rho/\omega$. Pour assurer une combustion complète, on doit avoir la relation $\tau_{res} \gg \tau_{chem}$. Le rapport de ces deux termes τ_{res}/τ_{chem} , assimilable au nombre de Damkhöler, doit être supérieur à un. Cette caractéristique, commune avec les chambres de combustion macroscopiques classiques, est conservée et apporte une contrainte sur la vitesse d'injection.

Par exemple, pour un système dont la taille caractéristique est $L_c = 1 \text{ mm}$ et la vitesse $U = 1 \text{ m.s}^{-1}$, on obtient un temps de résidence $\tau_{res} \approx 1 \text{ ms}$. Le temps chimique avec un carburant hydrocarboné léger et à pression standard est de l'ordre de 0.1 à 1 ms. La contrainte $\tau_{res} \gg \tau_{chem}$ n'est pas forcément respectée. Le temps de résidence dans les brûleurs mésoscopiques à forte densité énergétique peut alors être trop faible pour assurer un bon rendement de combustion. Le seul moyen d'augmenter le temps de résidence revient à diminuer la vitesse.

Dans un petit système où les réactifs sont injectés séparément, le processus de mélange est dominé par les transferts diffusifs. Un temps de mélange $\tau_{diff} = L_c^2/\alpha$ apparaît et s'ajoute au temps chimique pour comparer au temps de résidence. La problématique du mélange est ainsi inhérente aux systèmes à petite échelle [70].

Les nombres de Reynolds $Re = UL_c/\nu$ et Péclet $Pe = UL_c/\alpha$ diminuent aussi avec la taille caractéristique L_c du système. Pour éviter ce phénomène, la vitesse pourrait être augmentée mais cela affecterait directement le temps de résidence. En conséquence, et comparé aux macro-systèmes, le fluide est moins turbulent et les effets visqueux et diffusifs de masse et chaleur peuvent devenir prépondérants par rapport aux effets convectifs.

En prenant l'exemple d'un brûleur de 100 W avec un rendement global de 10 %, le débit volumique du mélange gazeux serait d'environ 0.4 L.s^{-1} . Si l'on suppose un diamètre de 5 mm pour le tube d'entrée, le nombre de Reynolds est de l'ordre de 5000. De façon similaire, une chambre de combustion de 100 mW avec un tube de 0.5 mm de diamètre aura un nombre de Reynolds d'environ 50. Ainsi, l'écoulement est principalement laminaire dans ces systèmes de petite taille et le mélange des différentes espèces se fait majoritairement par diffusion. Autre problème, le rapport d'aspect élevé des micro-canaux, couplé aux effets visqueux importants, augmente les pertes par friction et accroît la puissance de pompage relative nécessaire. Néanmoins, les forces visqueuses permettent d'éviter certains effets non désirés telles que les fuites de gaz aux joints du système ou aux parties mobiles. Ce dernier effet peut être très important dans des systèmes tels que les chambres à combustion interne (ou ICE pour *Internal Combustion Engine*) où le rendement dépend directement du taux de compression, lui-même affecté par les fuites à la surface entre le piston et le cylindre.

2.3.2 Problèmes thermiques

La diminution de la taille caractéristique accompagne l'augmentation des gradients, notamment thermiques. Les transferts thermiques par conduction dans le gaz et par convection dans les tubes d'entrée et sortie sont plus importants par rapport aux macro-systèmes [168, 169].

De plus, le rapport surface-sur-volume augmente lorsque la taille caractéristique diminue :

$$\frac{S}{V} \propto \frac{L_c^2}{L_c^3} \propto \frac{1}{L_c} \quad (2.2)$$

Cette loi reflète que l'espace disponible pour une flamme est plus réduit. La flamme est alors plus proche des parois, ce qui favorise les échanges thermiques.

On peut exprimer le rapport des pertes thermiques HL sur le dégagement de chaleur de la flamme HR :

$$HL \propto \frac{Nu}{L_c} S \propto Re^{0.8} L_c \propto L_c^{1.8}, \quad (2.3)$$

$$HR \propto \dot{Q}V \propto L_c^3, \quad (2.4)$$

$$\frac{HL}{HR} \propto L_c^{-1.2}, \quad (2.5)$$

où Nu est le nombre de Nusselt et \dot{Q} est le taux de dégagement de chaleur volumique. La diminution de la taille d'un brûleur de 0.5 m à 5 mm implique l'augmentation des pertes thermiques de plus de deux ordres de grandeur. Le rendement du système devient alors plus faible.

Isoler thermiquement le système afin de limiter les pertes thermiques peut alors s'avérer pertinent mais cela mène à des conséquences non désirées. Dans une configuration prémélangée, la chaleur non évacuée aux parois peut être transmise aux gaz frais en entrée et ainsi permettre la propagation de la flamme dans le système d'injection et ainsi détériorer le système. C'est le phénomène dit de *flashback*.

Afin d'étudier la thermique dans le solide, on peut estimer le nombre de Biot. Avec une taille caractéristique de $L_c = 10$ mm, un coefficient de transfert thermique de $h = 100 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ et une conductivité thermique $\lambda_s = 500 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, on obtient :

$$Bi = \frac{hL_c}{\lambda_s} \simeq 0.002. \quad (2.6)$$

Le nombre de Biot d'un tel système est petit devant un. Cela signifie que la conduction de la chaleur à l'intérieur du solide est plus rapide qu'à sa surface. La température à l'intérieur du solide peut être considérée comme constante (les gradients thermiques sont négligeables).

Cette analyse indique que les efforts liés à l'expansion thermique et à l'alignement des parties mobiles sont réduits. Néanmoins, cela pose problème pour certaines applications comme certains générateurs de chaleurs où la différence de température des réservoirs froid et chaud influe directement sur le rendement.

En conclusion, la gestion thermique d'un système de taille réduite est essentielle à sa performance.

2.3.3 Problèmes liés à la combustion

La combustion à l'intérieur d'un système de petite taille subit les effets thermophysiques et thermiques cités précédemment.

Ainsi, le temps physique nécessaire aux réactions chimiques pour s'achever (temps de combustion) doit être inférieur au temps de résidence du fluide dans la chambre (temps de résidence). Comme en

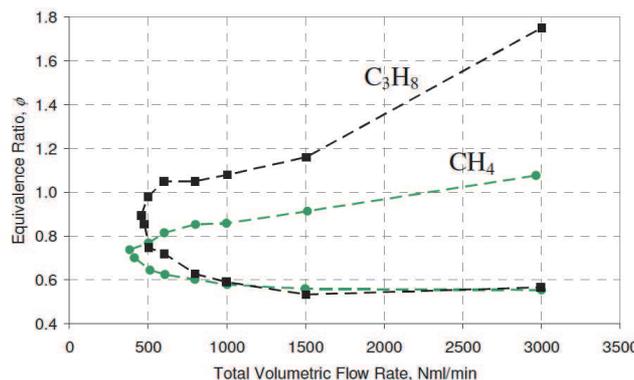


FIGURE 2.2: Limites de stabilité d'un brûleur cylindrique de type asymétrique pour deux carburants, méthane et propane, en fonction du débit total d'entrée, tiré de [46].

général le temps de résidence est faible, il est important que le temps chimique le soit aussi afin d'assurer une combustion aussi complète que possible. De plus, une flamme présente divers temps chimiques. Le temps chimique τ_{chem} est généralement celui du front mais pas celui de la recombinaison du CO et O₂ en CO₂ qui est plus long. Pour s'assurer d'avoir une combustion complète, la combustion peut être réalisée à haute température, donc en limitant les pertes thermiques, en augmentant la température des gaz frais, en utilisant des mélanges stœchiométriques ou des carburants très énergétiques.

D'autre part, la forte intensité des transferts thermiques rencontrés par le système implique des températures plus réduites en proche paroi ainsi qu'une destruction potentielle des espèces radicalaires nécessaire au maintien de la flamme [122]. Ces mécanismes vont augmenter le temps chimique et possiblement empêcher la propagation de flamme ou provoquer son extinction locale ou totale. La distance d'extinction est ici primordiale. En effet, plus cette distance est importante, plus la flamme s'éteint loin des parois. La flamme est confinée à un volume effectif plus faible que le volume de la chambre de combustion. Pour éviter ce phénomène, la distance d'extinction peut être modulée en augmentant la température de paroi (la distance d'extinction est inversement proportionnelle à la racine carré de la température) ou en limitant les pertes thermiques pariétales (isolation thermique du brûleur) [70].

Avec un temps de résidence faible et des pertes thermiques importantes, la flamme est plus facilement proche de ses limites d'extinction. Un tel brûleur voit alors son domaine de flammabilité plus réduit que pour un brûleur classique. La flamme d'un méso ou micro-brûleur est plus instable et sensible aux faibles variations des conditions opératoires qui peuvent mener jusqu'à l'extinction.

Si les réactifs ne sont pas prémélangés et que le carburant est liquide, des temps additionnels sont nécessaires pour l'évaporation et le mélange. Ces temps sont d'autant plus importants que le nombre de Reynolds est faible, ce qui est le cas ici. Ils ne peuvent pas être négligés. Une solution à ce problème est d'utiliser le carburant liquide pour former un film liquide le long d'une paroi de la chambre de combustion [202]. Cette approche présente l'avantage de limiter les pertes thermiques tout en proposant une surface d'évaporation liée au rapport surface-sur-volume important dans ce type de brûleur.

Les conséquences de tous les problèmes rencontrés par un brûleur de taille réduite est d'avoir une flamme instable, soumise à l'extinction locale. En plus de diminuer le rendement du système, ceci résulte en une combustion qui peut être incomplète, et à la production de polluants et imbrûlés en grande quantité.

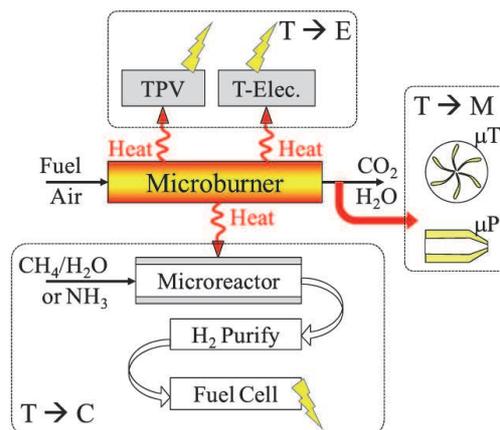


FIGURE 2.3: Schéma de l'utilisation de l'énergie thermique libérée par la combustion à petite échelle, tiré de [115]

2.4 Utilisation de l'énergie issue de la mésocombustion et applications

Comme tout système usuel utilisant la combustion comme source primaire, l'énergie chimique contenue dans le carburant est libérée via la mésocombustion pour être ensuite utilisée de différentes manières [115, 111]. L'énergie thermique peut être transformée en d'autres types d'énergies : électrique, mécanique ou chimique. La figure 2.3 illustre différents mécanismes :

- La chaleur est directement utilisée en tant que source d'énergie dans un système. Par exemple, Whalen [227] a conçu un réacteur dont la chaleur aide à la vaporisation d'un fluide diphasique. Cette chaleur peut aussi servir un processus chimique. On peut citer l'exemple d'application du reformage de l'hydrogène pour une pile à combustible : un micro-réacteur utilise la chaleur issue de la combustion pour produire de l'hydrogène à partir de réactions chimiques endothermiques [115].
- L'énergie thermique peut être transformée en électricité grâce à des procédés thermoélectriques ou thermophotovoltaïques. De nombreuses études se sont intéressées à ce processus dans des chambres centimétriques et ont démontré l'intérêt d'un tel système [70, 225]. L'avantage de cette transformation réside dans l'absence de parties mobiles, souvent responsables de la diminution de l'efficacité et de l'usure du système. Le faible rendement des matériaux thermoélectriques, 5 – 10 % voire moins, et la gestion essentielle mais délicate de la thermique du système rend cette approche difficile à très petite échelle.
- La chaleur est transformée en énergie mécanique. Le couplage d'un réacteur avec une micro-turbine a été étudié dans de nombreux laboratoires : le projet DecaWATT de l'ONERA [60, 91] (Fig. 2.4 (a)), le moteur à turbine à gaz le plus petit au monde de l'Université de Tohoku [105], le projet HEX-Combustor de l'Université d'Auckland [213] ou encore la micro-turbine du MIT [64] (Fig. 2.4 (b)). Cette dernière, faisant figure de précurseur, est capable de produire jusqu'à 20 W électrique à l'aide d'un alternateur, alors que la chambre de combustion ne fait que 55 mm³. Ces études ont montré de nombreux défis sur la faisabilité de turbines à gaz centimétriques, tant sur les performances, sur la fabrication ou l'ajout d'agents catalytiques. D'autres équipes se sont intéressées à des micro-moteurs à piston [235, 3] ou de type Wankel [70] (Fig. 2.4 (c)).
- L'énergie est utilisée à des fins de propulsion. Une chambre de combustion de petite taille, par

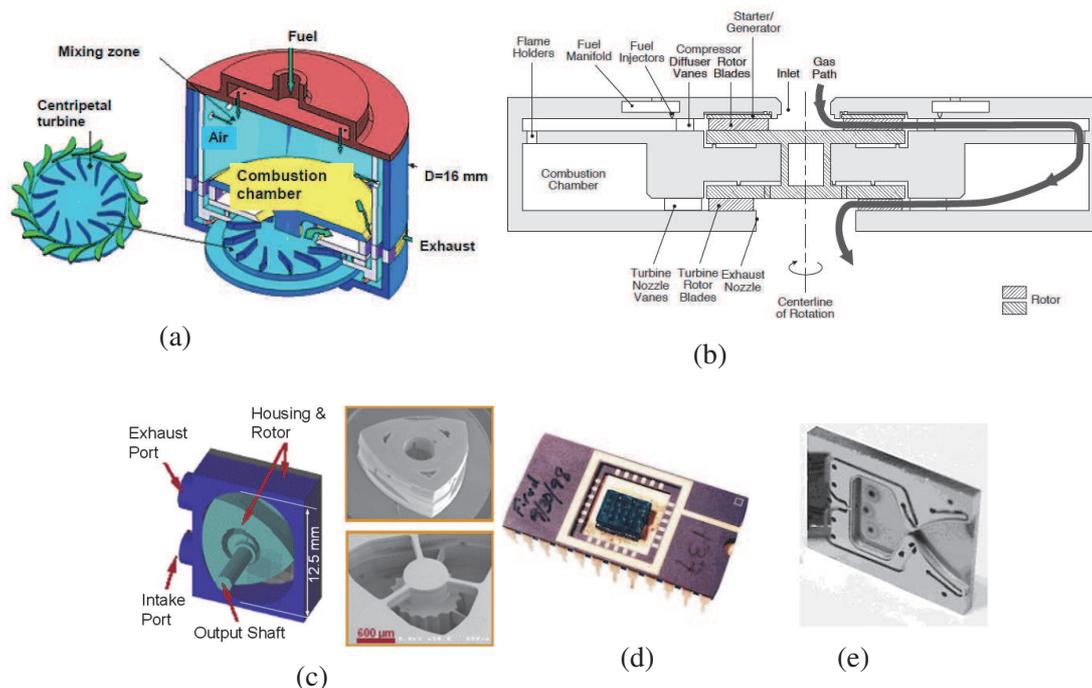


FIGURE 2.4: (a) : Schéma de la micro-turbine de l'ONERA [91]. (b) : schéma de la micro-turbine du MIT de 12 mm de diamètre et 3 mm de long [64]. (c) : mini moteur Wankel [70]. (d) : micro-propulsor digital de TRW. (e) : micro-propulsor haute pression du MIT [151].

rapport aux systèmes conventionnels, a l'avantage de délivrer une poussée faible (~ 1 mN) avec une faible impulsion ($\sim 10^{-5}$ N.s) pour du positionnement et contrôle de trajectoire précis de micro-satellites [232]. Par exemple, un propulsor de 10^{-4} N.s d'impulsion et de 100 W de puissance a été développé par le TRW [109] (Fig. 2.4 (d)). Le MIT a développé un micro-propulsor de 1 N de poussée, de 300 s d'impulsion spécifique pour une chambre de combustion de 1.2 g [141] (Fig. 2.4 (e)).

Les diverses utilisations de l'énergie produite par combustion à petite échelle mènent à des applications très variées, dont les puissances attendues vont de quelques watts à plusieurs centaines de watts.

La mésocombustion peut être utilisée pour la propulsion de micro-satellites ou drones, pour générer de l'électricité à des MEMS (*Micro-Electro Mechanical Systems*), à des appareils électriques classiques (ordinateurs et téléphones portables) ou tout simplement apporter de la chaleur à d'autres systèmes. Un autre exemple non cité concerne des applications militaires, qui peuvent être envisagées afin d'alimenter en énergie les équipements de soldats en milieu hostile (*i.e.* sans source d'électricité proche) ou encore soumises à des contraintes de furtivité.

Un autre grand intérêt de la combustion à petite échelle est son intégration dans des systèmes ou processus de plus grandes tailles. Par exemple, la chaleur issue de petits réacteurs peut s'avérer utile pour améliorer l'efficacité des raffineries ou usines chimiques et a déjà démontré son intérêt [145]. L'utilisation de micro-chambre de combustion afin de pré-oxyder une partie du carburant dans des turbines à gaz a montré une réduction sensible des émissions de NOx et de suies [144].

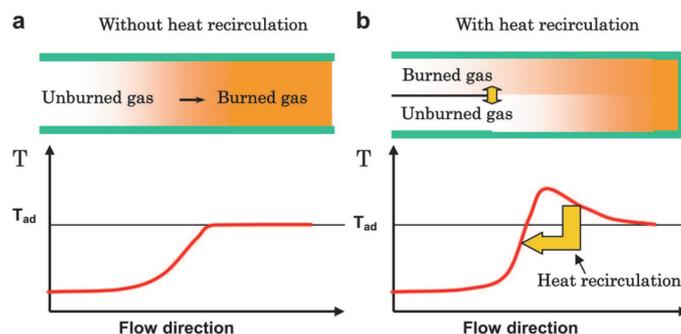


FIGURE 2.5: Distribution de température d'un brûleur swirlé (a) et d'un brûleur avec recirculation (b), tiré de [111].

2.5 Exemples de solutions technologiques pour la combustion à petite échelle

La recherche sur la combustion à petite échelle a fait l'objet de nombreuses études dans différents laboratoires internationaux. Les revues de Maruta [151], Ju [112, 111], Kaisare [115], Shirsat [201] rassemblent de nombreuses informations à ce propos. Cette section présente quelques axes de recherche répondant à la problématique de la combustion micro- et mésoscopique.

2.5.1 Combustion avec recirculation

Afin d'améliorer les performances du brûleur et de palier aux problèmes de combustion à petite échelle, une première solution concerne la combustion avec recirculation (en anglais *excess enthalpy burner* ou *non-adiabatic heat recirculating combustor*). Le principe consiste à utiliser l'énergie issue des gaz brûlés en sortie du brûleur afin de préchauffer les gaz frais en entrée, comme montré en Fig. 2.5. L'énergie apportée aux gaz frais permet à la combustion d'atteindre un régime hors-équilibre où la température de fin de combustion dépasse la température adiabatique de flamme théorique. Les limites de flammabilité de la flamme sont étendues et la vitesse de flamme augmentée. La combustion peut devenir plus stable. Cette méthode n'est pas nouvelle : elle a été développée par Weinberg il y a déjà plusieurs décennies [138, 107]. Appliquée à des systèmes de petite taille, elle permet une voie prometteuse pour améliorer les performances d'un brûleur centimétrique. De nombreuses configurations géométriques utilisant ce concept ont été étudiées. Le rendement maximum pouvant être obtenu dans des systèmes utilisant la recirculation de chaleur pour des applications de conversion en électricité a été analysé de façon théorique par Weinberg [225].

L'idée la plus simple de configuration utilisant le principe de la recirculation est un brûleur droit (Fig. 2.6 (a)) : la flamme chauffe la paroi par sa proximité, la paroi conduit la chaleur vers les zones plus froides (*i.e.* l'entrée), puis la paroi chaude préchauffe les gaz frais entrants, menant jusqu'à l'allumage du mélange. La recirculation de chaleur est ici indirecte, à travers un couplage thermique entre la flamme et la paroi. La figure 2.6 (b) montre les flux thermiques d'un tel système. Les parois agissent comme des pompes à chaleur, récupérant l'énergie dans les gaz chauds pour les transmettre aux gaz froids (courbe rouge de la Fig. 2.6 (b)). Des parois solides avec une conductivité thermique élevée réduisent les maximums de température et évitent les points chauds, très agressifs envers les matériaux.

La récupération de chaleur dans des configurations de type "à flux inversés" a été étudié par Kaisare

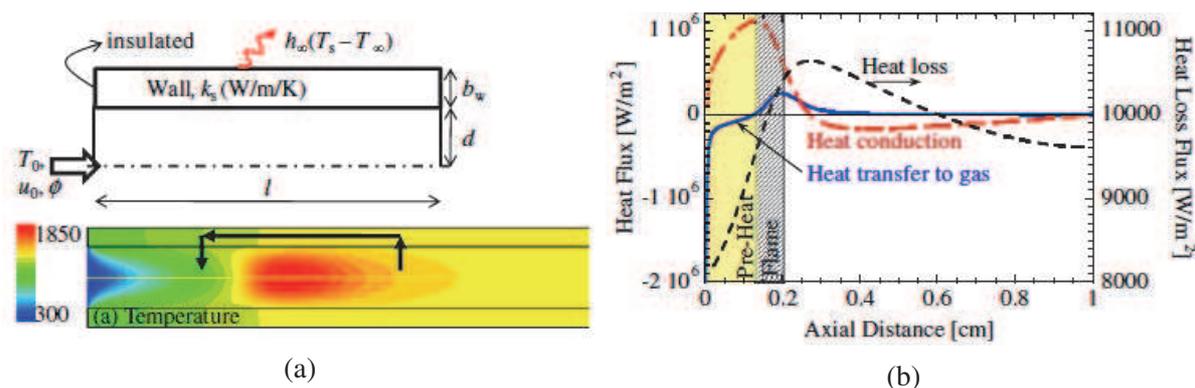


FIGURE 2.6: (a) : Schéma et champs de température d'un brûleur droit de 0.5 cm étudié dans [169]. (b) : Profils des flux thermiques en fonction de la direction axiale de ce même brûleur. Figures reprises de [115].

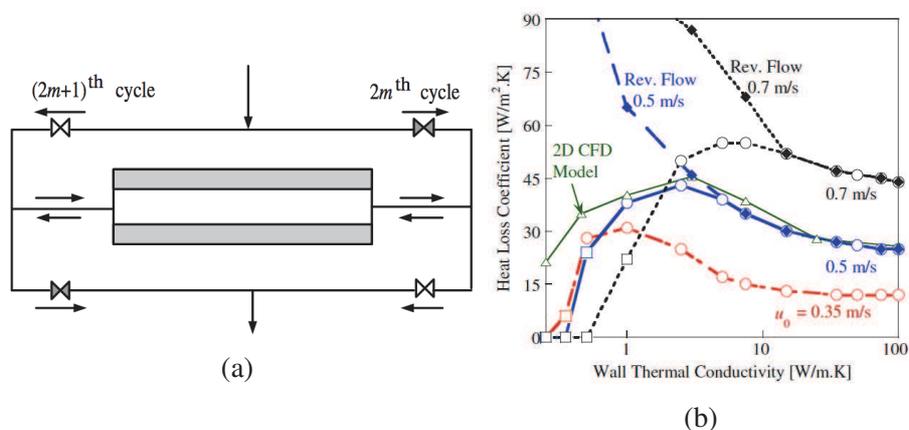


FIGURE 2.7: (a) : Schéma illustrant le principe d'un système à flux inversés, tiré de [114]. (b) : coefficient thermique critique en fonction de la conductivité thermique pariétale, figure tirée de [115].

et Vlachos [114] ainsi que Matros et Bunimovich [153]. Le principe consiste ici à inverser l'entrée et la sortie de la chambre de combustion droite de façon périodique. Ainsi, la chaleur contenue dans les gaz brûlés est transmise aux parois solides qui réchaufferont les gaz frais au prochain cycle, comme le montre la Fig. 2.7 (a). Cette technique fonctionne à condition que le transfert thermique gaz-solide se fasse de façon suffisamment rapide. La faible taille de chambre de combustion qui nous intéresse ici permet justement de bonnes conditions pour ce fonctionnement. Cette méthode "à flux inversés" améliore la stabilité en repoussant la limite du soufflage de la flamme mais n'évite pas l'extinction (Fig. 2.7 (b)).

Sans utiliser la technique des flux inversés, mais toujours afin d'assurer un meilleur couplage thermique et de favoriser l'échange de chaleur entre gaz brûlés et gaz frais, d'autres configurations géométriques peuvent être imaginées (Fig. 2.8 (a)). Ces configurations sont reprises de la théorie des échangeurs thermiques. Par exemple, on trouve la configuration de flamme U (configuration (b)) étudiée par Ronney [192], ou celle de deux flammes en propagations opposées (exemple (a)) étudiée par Ju [110]. Federici et Vlachos [69] se sont intéressés aux effets de transferts thermiques dans une configuration axisymétrique (configuration (d) de la figure 2.8 (a)). Le graphique 2.8 (b) représente la vitesse critique en fonction de la conductivité thermique pariétale obtenue grâce à des simulations 2D. Deux vitesses sont obtenues : la plus basse correspond à l'extinction de la flamme et la plus haute à son soufflage. La région située entre

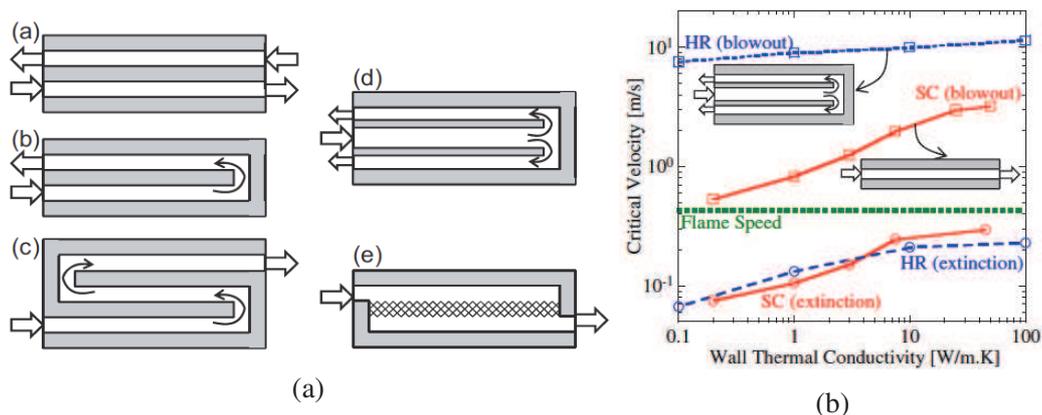


FIGURE 2.8: (a) : Différentes géométries possibles de brûleurs à enthalpie excédentaire. (b) : Profils des flux thermiques en fonction de la direction axiale de ce même brûleur. Figures tirées de [115].

ces deux vitesses correspondent au régime où la flamme est stable. En dehors de cette région, la flamme ne peut pas s'auto-entretenir. Une configuration géométrique optimisant les transferts thermiques permet d'améliorer le domaine de stabilité par rapport à une configuration droite.

Le concept de *swiss-roll* est sûrement le concept le plus connu, mais aussi dans toute la littérature le plus complexe des brûleurs avec recirculation. Il a principalement été développé pour la génération d'électricité via des modules thermoélectriques. Il consiste en l'enroulement sous forme de spirale des tubes d'injection des gaz frais et de sortie des gaz brûlés autour de la zone de combustion (Fig. 2.9 (a)). Ainsi, chaque tube contenant des gaz frais est en contact direct avec deux tubes contenant des gaz brûlés, et inversement, comme le montre le schéma 2.9 (b). Cette stratégie permet de fournir une très grande surface d'échange au transfert thermique, qui peut être modulé en modifiant le nombre de spirales. Le diamètre des canaux peut rester petit afin d'amplifier le transfert de chaleur, tandis que la taille de la zone de combustion centrale peut être conçue indépendamment de la partie d'échange thermique.

L'Université de Californie du Sud (USC) a été l'une des premières à étudier ce concept [41]. Parmi les différentes déclinaisons conçues et fabriquées, la version mésoscopique consiste en une configuration toroïdale 3D (Fig. 2.9 (d)). La génération d'électricité est assurée par des modules thermoélectriques qui sont intégrés dans toutes les parois de ce brûleur. L'étude expérimentale a montré que la combustion pouvait s'auto-entretenir dans cette configuration. Néanmoins, la fabrication de cette géométrie reste très difficile à mettre en œuvre et les performances obtenues inférieures aux attentes [151].

Un autre brûleur *swiss-roll* de dimension $12.5 \times 12.5 \times 5.0$ mm a été conçu par Vican [219]. La puissance chimique injectée est d'environ 10 W (combustion hydrogène/air) et la puissance électrique récupérée par des modules thermoélectriques commerciaux ne dépasse pas 55 mW : le rendement de ce brûleur n'atteint pas les 1%. Différentes explications peuvent être avancées : le rendement de ces modules est faible, leur couverture sur la surface du *swiss-roll* n'était pas optimale. Néanmoins, cette expérience a démontré la faisabilité d'un tel réacteur à petite échelle et faibles débits.

Un *swiss-roll* sensiblement plus grand a été étudié par Ahn [2]. Ses dimensions extérieures sont $70 \times 70 \times 50$ mm, les canaux font 3.5 mm de large et le mélange gazeux utilisé était un mélange propane/air. Les résultats expérimentaux ont montré des taux de conversion du propane entre 40 et 100% pour des nombres de Reynolds testés de 100 et 1000. Les meilleurs résultats ont été observés pour des mélanges pauvres.

Une recherche sur des brûleurs *swiss-roll* cylindriques a été menée à l'université de Tohoku [124,

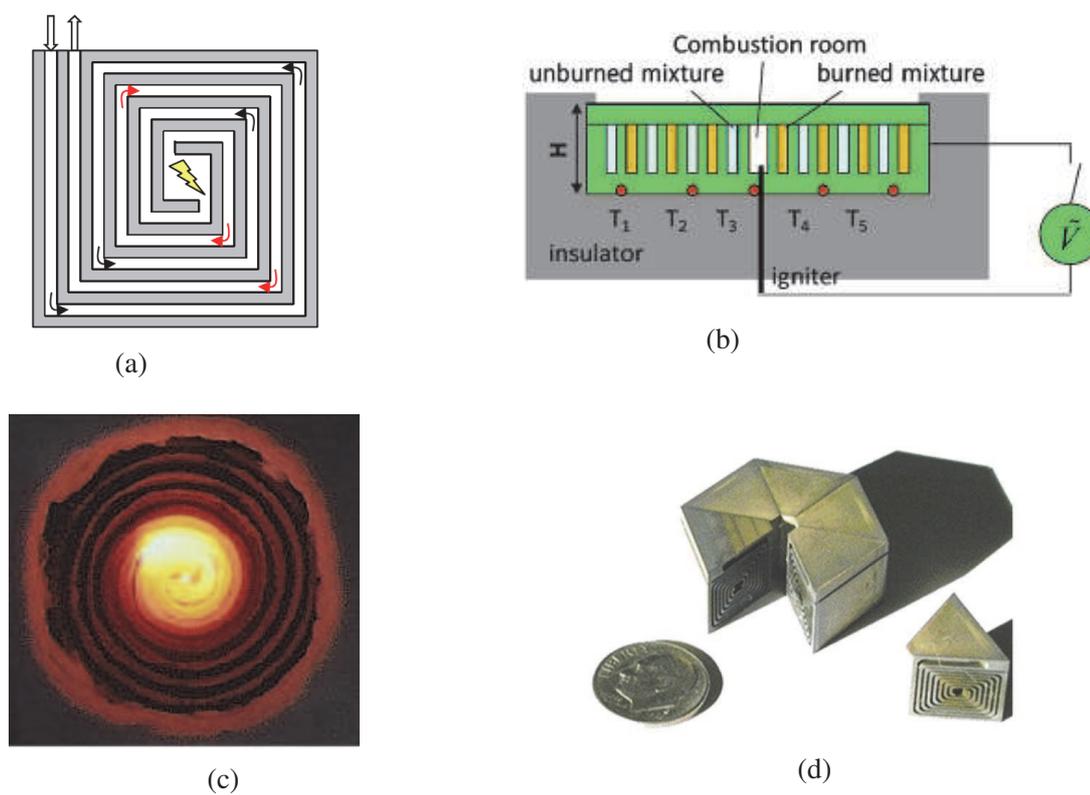


FIGURE 2.9: (a) : schéma d'un *swiss-roll* carré vu de dessus, tiré de [115]. (b) et (c) : schéma vu de côté et photo du brûleur *swiss-roll* cylindrique de Tohoku de 64 mm de diamètre. (d) : photo du *swiss-roll* de l'University of South California, tirés de [111].

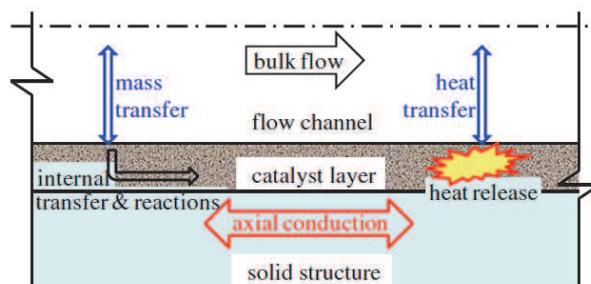


FIGURE 2.10: Schéma des différents phénomènes physiques dans un brûleur catalytique, tiré de [115].

123]. Plusieurs prototypes avec des diamètres allant de 20 à 64 mm ont été testés (Fig. 2.9 (b) et (c)). Ce brûleur a montré une bonne efficacité thermique globale de 60 à 85 %, et la température de surface s'étend de 400 à plus de 1100 K.

La recirculation de chaleur a démontré la capacité de la combustion à pouvoir s'auto-entretenir, avec de faibles températures d'injection. Cependant, cette méthode n'a pas été retenue dans les travaux de cette thèse car elle présente une trop forte complexité de mise en œuvre et de fabrication.

2.5.2 Brûleurs catalytiques

La faible taille des systèmes à petite échelle mène à un ratio surface-sur-volume très important, ce qui accroît les transferts de masse et chaleur. Ces effets rendent la combustion en phase gazeuse très sensible à l'extinction. La combustion catalytique en revanche peut tirer parti des forts transferts de masse. Elle présente aussi l'avantage de l'absence de distance d'extinction, de température de réaction modérée et d'émissions propres [151].

La figure 2.10 montre les différents phénomènes physiques en jeu dans un brûleur catalytique. Les réactifs contenus dans le fluide diffusent de l'écoulement gazeux vers le revêtement catalytique. Les réactions catalytiques ont lieu dans la couche catalytique et les produits issus de la réaction diffusent dans le média poreux puis dans le fluide gazeux. La chaleur fournie par la combustion est ensuite transmise par conduction dans le gaz et dans la paroi solide. Les parois sont responsables de pertes thermiques, au même titre que la combustion en phase gazeuse.

Les limites de stabilité de la combustion catalytique d'un brûleur swiss-roll de $70 \times 70 \times 50$ mm contenant une surface de 30 cm^2 de platine ont été étudiées dans [2]. Elles sont présentées sur la figure 2.11 (a) en fonction du nombre de Reynolds et de la richesse du mélange propane/air. L'étude a montré que l'ajout de matériau catalytique permet à la combustion de se maintenir à des valeurs du nombre de Reynolds sensiblement plus faibles (jusqu'à $Re = 1$). La limite de flammabilité devient aussi asymétrique par rapport à la stœchiométrie : la flamme se maintient pour des mélanges riches jusqu'à une richesse de 40 (à $Re = 15$). La combustion catalytique est gouvernée par des mécanismes différents de la combustion en phase gazeuse. Ce brûleur a montré des températures maximales au centre du brûleur bien inférieures avec la combustion catalytique (350 K à $Re = 1.2$ quand de l'ammoniac NH_3 est utilisé comme agent catalytique). L'interaction entre la combustion catalytique et la combustion en phase gazeuse a été étudiée par simulation numérique pour un mélange hydrogène/air à température et pression ambiantes dans un cylindre en platine de 10 mm de long et 1 mm de diamètre [35]. Les champs de température de concentration de OH sont montrés sur la figure 2.11 (b) pour différents régimes. Une augmentation plus rapide de la température est observée dans le cas avec combustion en phase gazeuse

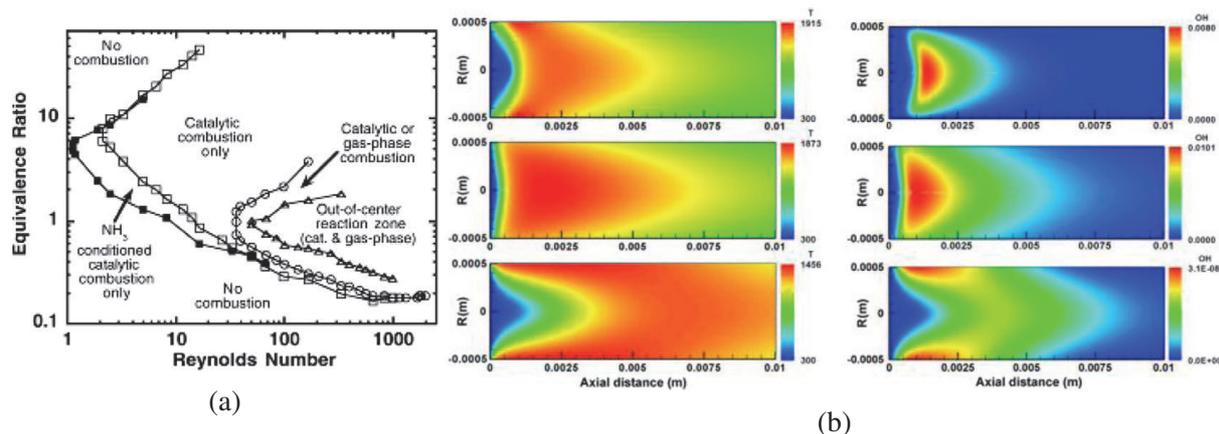


FIGURE 2.11: (a) : Limites de stabilité de la combustion catalytique et en phase gazeuse en fonction du nombre de Reynolds pour un brûleur de type *swiss-roll* en Inconel, tiré de [2]. (b) : champs de température (gauche) et concentration de OH (droite) pour trois différents modes : réactions de surface et en phase gazeuse (haut), réactions en phase gazeuse seulement (milieu) et réaction de surface uniquement (bas) [35].

seulement. Cela implique que la réaction exothermique est inhibée par la présence de l'agent catalytique. Il est aussi observé que le radical OH est beaucoup plus présent en proche paroi dans le cas de la réaction de surface seule.

L'impact du diamètre du canal sur l'interaction "réaction de surface"- "réaction en phase gazeuse" est ainsi essentielle. La diminution du diamètre mène à une réaction en phase gazeuse plus faible par épuisement du combustible dans les réactions de surface. Chen *et al.* [35] ont classé l'interaction entre combustion catalytique et en phase gazeuse en trois régions (Fig. 2.12 (a)) : lorsque la réaction en phase gazeuse domine la réaction de surface (région I), lorsque les deux types de combustion cohabitent (région II) et quand la réaction de surface prédomine (région III). La ligne A correspond ainsi à la limite d'extinction de la flamme en phase gazeuse. La figure montre bien l'influence de la taille du système et de la vitesse d'injection. En dehors des limites de flammabilité du mélange gazeux, la combustion catalytique peut prendre le relais et élargir la plage de fonctionnement du brûleur. Kaisare *et al.* [113, 115] ont aussi étudié par simulation numérique l'influence de la taille du système sur l'interaction entre réactions de surface et en phase gazeuse (Fig. 2.12 (b)). La ligne horizontale représente une contribution similaire entre les deux régimes de combustion. Pour de grandes tailles de domaine, la combustion catalytique est limitée par le faible transfert de masse vers la paroi. La combustion en phase gazeuse n'est pas affectée donc domine la réaction de surface. Au contraire, pour de faibles tailles, la chimie de surface prévaut car les énergies d'activation sont plus faibles. La transition entre ces deux régimes dépend fortement de la température : $\sim 300 \mu\text{m}$ à 1500 K, $\sim 2 \text{ mm}$ à 1100 K et $\sim 5 \text{ cm}$ à 1700 K. Si l'on considère que la combustion catalytique de carburants hydrocarbonés comme le propane est stabilisée à des températures supérieures à 800 K, l'échelle du domaine appropriée est de l'ordre du millimètre ou inférieure.

La figure 2.12 (c) montre le coefficient de transfert thermique critique (valeur jusqu'à laquelle la flamme peut s'auto-entretenir) en fonction de l'échelle de la chambre de combustion pour les trois régimes de combustion. La combustion catalytique seule d'une part, et la combustion combinée (catalytique et en phase gazeuse) d'autre part, présentent sensiblement les mêmes limites de stabilité car la combustion en phase gazeuse seule est négligeable. Globalement, la combustion catalytique est plus stable que la combustion en phase homogène jusqu'à des tailles d'environ 5 mm.

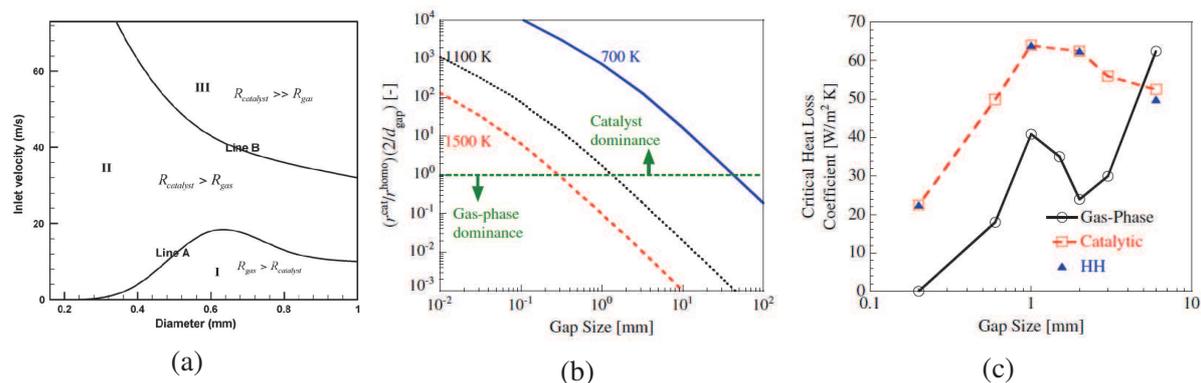


FIGURE 2.12: (a) : Interaction entre combustion catalytique et en phase gazeuse en fonction de la taille du canal et de la vitesse d'injection [35]. (b) : Ratio des réactions de surface en phase gazeuse en fonction de la dimension du système pour différentes températures de fonctionnement [115]. (c) : coefficient de transfert thermique critique en fonction du diamètre du canal pour la combustion en phase gazeuse, catalytique ou les deux combinés (HH) [115].

En résumé, la littérature scientifique s'accorde pour dire que la combustion catalytique présente l'intérêt d'étendre les limites de flammabilité et améliorer la stabilité de la flamme. Les réactions de surface sont actives même avec des températures plus basses, et une meilleure résistance aux fortes pertes thermiques est observée, dans le cas où la dimension du système n'est pas trop grande (inférieure à l'échelle du millimètre environ).

2.5.3 Brûleur tourbillonnaire

Une autre méthode envisageable pour la stabilisation de la combustion à petite échelle en phase gazeuse consiste à modifier la topologie de l'écoulement. En effet, un écoulement permettant à une flamme confinée de s'établir en restant suffisamment loin des parois limite les pertes thermiques et favorise un bon mélange des réactifs. C'est notamment le cas des écoulements tourbillonnaires comme l'écoulement swirlé et l'écoulement whirled définis ci-dessous.

Écoulement swirlé

Dans un écoulement swirlé, classiquement rencontré dans des chambres de combustion de type turbine à gaz, l'écoulement est mis en rotation par un injecteur appelé le swirlleur avec une composante de vitesse axiale et une composante de vitesse tangentielle.

Ces systèmes ont été et sont toujours largement étudiés sur des systèmes de taille conventionnelle [92, 208, 209]. Ils sont caractérisés par le nombre de swirl calculé comme le rapport du flux axial de quantité de mouvement azimutale sur le flux axial de quantité de mouvement axiale [92]. Les flammes swirlées confinées possèdent une structure caractéristique, qui varie selon l'intensité du swirl :

- Dans les brûleurs peu swirlés, une zone de recirculation externe (ORZ pour *Outer Recirculation Zone*) se forme autour du jet principal. Elle améliore la stabilité et l'accrochage de la flamme.
- Quand le nombre de swirl augmente, la vitesse axiale a tendance à diminuer au niveau de l'axe de symétrie. Pour un nombre de swirl supérieur à 0.6, cette zone de faible vitesse axiale se transforme en une zone de recirculation centrale (CRZ pour *Central Recirculation Zone*), dans laquelle les gaz brûlés viennent alimenter et réchauffer les gaz frais.

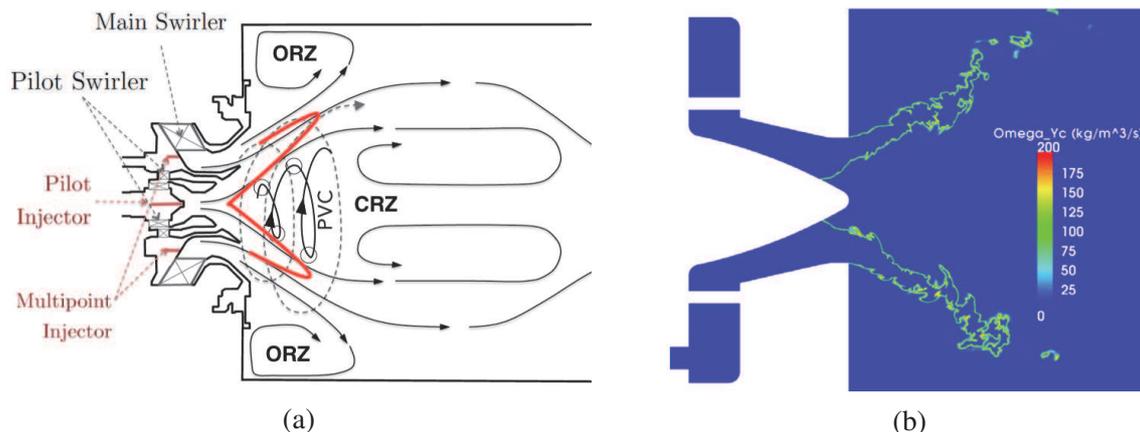


FIGURE 2.13: (a) : schéma des principales structures tourbillonnaires identifiées à la sortie d'injection TLC et flamme en V (en rouge), tiré de la thèse de Guedot [89]. (b) : flamme en V dans le brûleur PRECCINSTA matérialisée par la variable d'avancement dans le plan médian, issu de [160].

- Pour des nombres de swirl plus élevés, la taille de la zone de recirculation centrale a tendance à augmenter. Des nombres de swirl élevés peuvent générer des instabilités, et augmentent le risque de flashback.

Ces principales structures tourbillonnaires sont illustrées par la figure 2.13 (a). Les avantages technologiques de la stabilisation par le swirl sont multiples :

- Contrairement à une stabilisation par accroche-flamme, la stabilisation par swirl est faite grâce à un point d'arrêt aérodynamique. Elle permet de s'affranchir des contraintes thermo-mécaniques liées à la présence de pièces mécaniques dans la zone de réaction où les gaz sont les plus chauds.
- Un autre avantage du swirl est la compacité de la flamme, le rapport de longueur par rapport à une flamme de type jet étant d'environ 1/3. La combustion ayant lieu dans un volume plus petit, cela permet de réduire la taille du brûleur. La flamme, stabilisée sur l'avant de la zone de recirculation centrale est dite "en V" ou "en M" [170], du fait de sa forme caractéristique (visible sur la Fig. 2.13 (a) et (b)).
- La zone de recirculation joue le rôle de réservoir énergétique. L'importante quantité de gaz contenue dans la zone de recirculation permet de stabiliser la flamme sur une large plage de fonctionnement. Par ailleurs, dans la zone de cisaillement entre le jet principal et les zones de recirculation, les gradients de vitesse sont très importants, donnant lieu à des niveaux de turbulence élevés qui améliorent le mélange des réactifs, et contribuent au bon fonctionnement du brûleur sur une large gamme de débits.

Shimura *et al.* [210, 8] ont réalisé des simulations numériques directes avec chimie détaillée d'un brûleur swirlé de taille $10 \times 10 \times 15 \text{ mm}^3$ avec une injection annulaire de diamètre intérieur 0.6 mm et extérieur 2.5 mm (voir figure 2.14 (a)). Le mélange gazeux est un mélange hydrogène/air à la stœchiométrie et 300 K et la paroi est considérée comme isotherme à 700 K. Deux points de fonctionnement ont été testés avec des nombres de swirl à 0.6 et 1.2. De larges structures cohérentes annulaires et hélicoïdales sont générées près de l'injection dans la chambre. Des tourbillons de plus petite échelle apparaissent en amont de l'écoulement comme représenté par l'iso-contour de critère-Q sur la figure 2.14 (b) et (c). Ces derniers jouent un rôle important dans le plissement de la flamme provoquant des oscillations de pression à haute fréquence. Les pertes thermiques aux parois représentent environ 25 % du taux de dégagement de chaleur de la flamme dans les deux points de fonctionnement. Une analyse acoustique a été réalisée

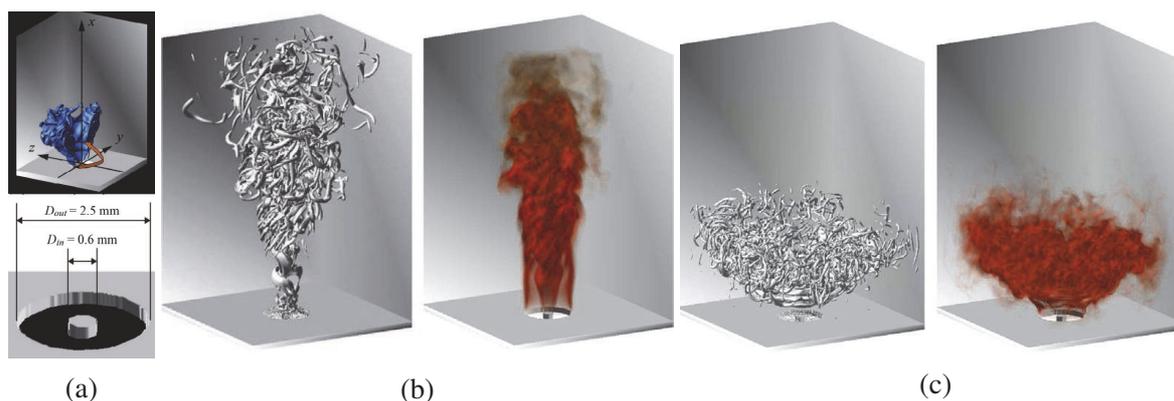


FIGURE 2.14: (a) : schéma du domaine calculé et de l'injection du microbrûleur swirlé. Iso-contour de critère Q et rendu volumique du taux de dégagement de chaleur pour un nombre de swirl de 0.6 (b) et 1.2 (c). Figures tirées de [210].

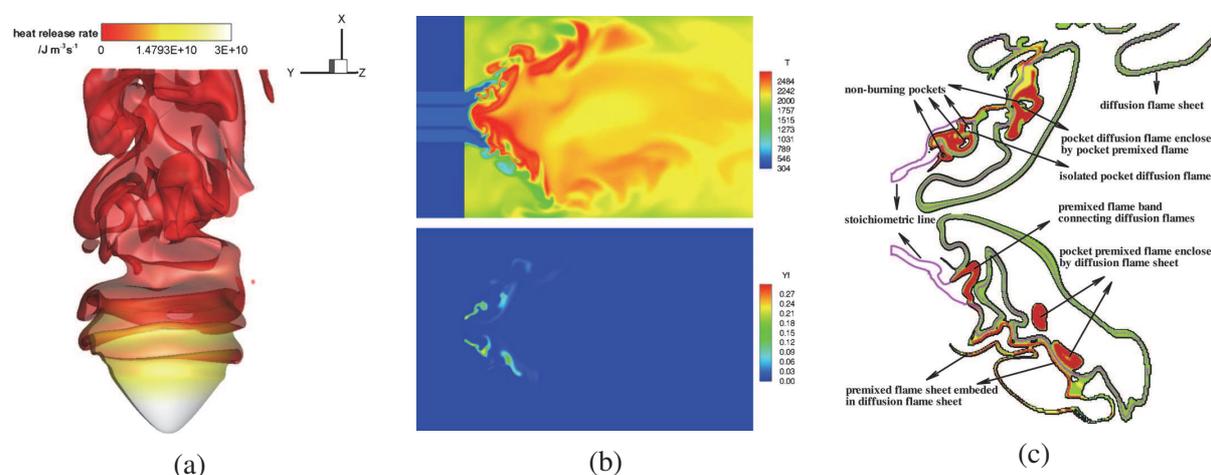


FIGURE 2.15: (a) : iso-contour de la variable de progrès $c=0,2$ colorisée par le dégagement de chaleur [222]. Champs de température et fraction massique de carburant instantané (b) et structure de la flamme de spray (c) [143].

à l'aide de DMD (*Dynamic Mode Decomposition*) du champ de pression et du taux de dégagement de chaleur afin d'étudier les instabilités thermo-acoustiques.

Wang *et al.* [222, 223] ont calculé en DNS une configuration similaire avec une chimie hydrogène/air à 9 espèces et 19 réactions. Leur analyse de la flamme a montré que les radicaux O et OH sont présents à la base de la zone de recirculation centrale, qui est considérée comme le mécanisme de stabilisation des flammes à haut nombre de swirl (Fig. 2.15 (a)). A partir d'un diagramme de Peters, ils montrent que la flamme réside majoritairement dans le régime de flamme plissée-épaissie. Les flammelettes locales apparaissent moins épaisses que la flamme laminaire, du fait de l'étirement. Les effets de diffusion différentielle ont quasiment disparu dans le cas de la flamme swirlée, comparée à des flammes planes en propagation libre dans une turbulence homogène isotrope. La forte intensité turbulente de l'écoulement swirlé tend à gommer ces effets de diffusion différentielle. L'influence de la richesse du mélange gazeux a aussi été étudiée : des flammes pauvres ont montré une intensité turbulente plus importante en aval de l'écoulement du fait de températures moins élevées.

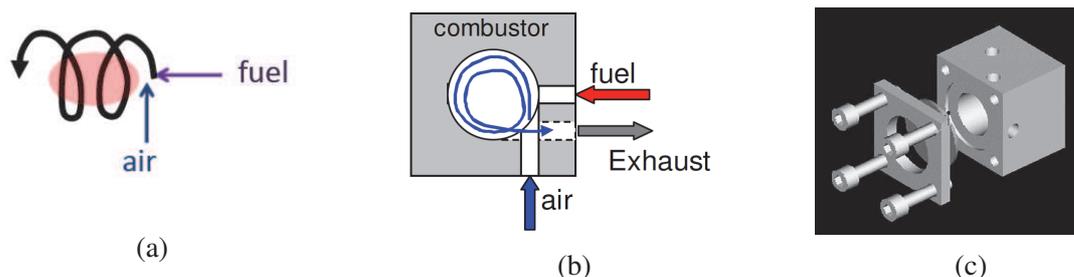


FIGURE 2.16: (a) : schéma de l'écoulement d'air dans la chambre de combustion ; intersection avec l'injection de carburant. (b) : schéma d'une chambre de combustion cylindrique de type whirl. (c) : vue 3D du méso-brûleur de Wu *et al.* [231]

Luo *et al.* [143] ont réalisé des simulations DNS d'une flamme swirlée diphasique de n-heptane. Le nombre de Reynolds est $Re = 3000$ et le nombre de swirl $S = 1.0$ dans une géométrie cylindrique de 40 mm de diamètre et 60 mm de long. Le carburant est injecté dans le brûleur à l'aide de gouttes Lagrangiennes et d'un modèle d'évaporation. La chimie en phase gazeuse est traitée de façon globale (Fig. 2.15 (b)). Les résultats montrent que 70% du taux de dégagement de chaleur se fait en régime de prémélange, bien que le régime de diffusion représente une part plus importante en volume (Fig. 2.15 (c)).

Écoulement whirlé

L'écoulement de type whirl est un écoulement tourbillonnaire créé par la géométrie de la chambre de combustion [230, 236]. Par rapport au swirl, ses caractéristiques sont les suivantes :

- L'air est introduit tangentiellement à une paroi (Fig. 2.16 (a,b)).
- Le carburant est injecté de façon perpendiculaire à l'air afin que les deux jets se croisent, favorisant le mélange.

En régime de combustion, l'écoulement whirlé améliore la stabilisation de la flamme via une zone de recirculation centrale, composée de gaz chauds et avec des niveaux de turbulence faibles. La force centrifuge repousse les gaz frais lourds près des parois et concentre les gaz chauds légers au centre de l'écoulement. L'autre avantage de ce concept est de limiter les pertes thermiques pariétales grâce à la présence des gaz frais en proche paroi. L'ensemble de ces caractéristiques fait apparaître l'écoulement whirlé comme un concept très intéressant pour la combustion centimétrique.

Swirl et whirl conduisent à des structures et des mécanismes différents pour l'écoulement et la stabilisation de la flamme. La flamme whirlée ressemble à un cylindre creux avec un cœur chaud central relativement calme. Au contraire, la flamme swirlée est caractérisée par une zone de recirculation centrale produite par éclatement tourbillonnaire de l'écoulement fortement swirlé [236]. Cette zone conduit à la stabilisation de la flamme grâce à une région de vitesse opposée à l'écoulement swirlé qui alimente en gaz brûlés la zone de réaction.

Wu *et al.* [231] ont testé expérimentalement et numériquement plusieurs brûleurs whirlés asymétriques dont les volumes vont de 10.6 à 124 mm³ (les diamètres s'étalant de 2.4 à 6.4 mm) avec des carburants de types alcanes ou hydrogène, et pour des puissances variant de 25 à 174 W (Fig. 2.17 (a)). L'étude a montré que la combustion alcane/air était plus efficace pour les plus grands volumes de brûleur. Pour les plus petits volumes, il est nécessaire d'enrichir en oxygène l'air afin de stabiliser la flamme d'alcanes. La combustion avec méthane est la plus difficile à stabiliser et nécessite un enrichissement en oxygène à 40 % en volume de l'oxydant afin de fonctionner sur le plus petit brûleur et ainsi atteindre

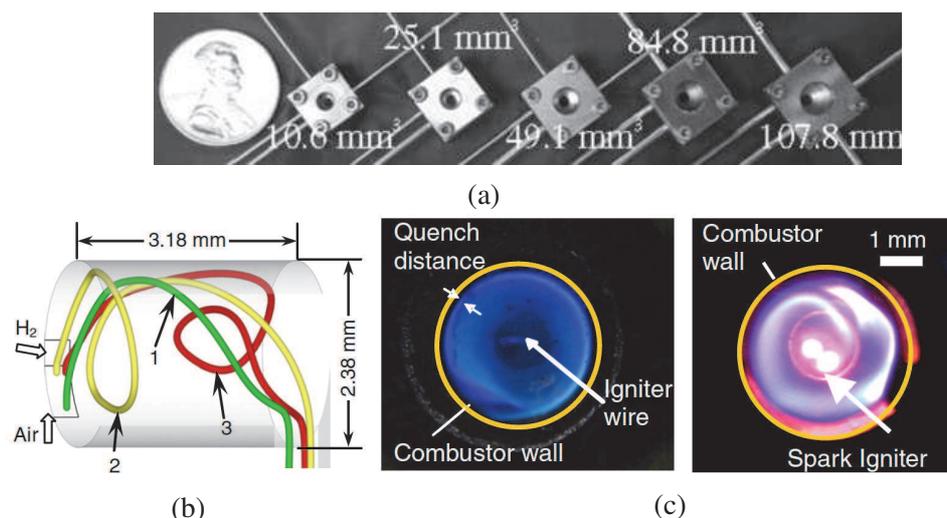


FIGURE 2.17: (a) : micro- et méso-brûleurs whirlés de différents volumes étudiés à Pennsylvania State University. (b) : trajectoires principales de l'écoulement d'air dans la combustion hydrogène/air à la stœchiométrie. (c) : vue de face de la structure de flamme issue de l'expérience du brûleur propane/air de 124 mm^3 et richesse 0.8 (image de gauche) et méthane/air enrichi en oxygène de 49.1 mm^3 à richesse 0.3 (image de droite). Images tirées de [231].

une efficacité chimique de 85 %. Avec l'hydrogène, les limites de stabilité du brûleur s'étendent entre des richesses de 0.25, côté pauvre, et de 3 à 6, côté riche (suivant le débit injecté), pour un rendement chimique pouvant atteindre 97 %. La figure 2.17 (b) montre les trois principaux chemins de l'écoulement d'air. Le chemin principal 1 de l'air pivote le long de la paroi, comme une spirale, pour atteindre la sortie. Les chemins mineurs 2 et 3 alimentent deux zones de recirculation en haut et en bas du brûleur. Ces dernières sont importantes pour le mélange et la stabilisation de la flamme, car elles assurent un temps de résidence long et un bon rendement de combustion. La Fig. 2.17 (c) présente deux photos de la flamme, vue de face, issues de l'expérience de Wu [231]. La première est un mélange propane/air de richesse 0.8 dans le brûleur de 124 mm^3 . La flamme est de forme annulaire et de couleur bleutée. Elle résulte de l'injection de carburant dans la zone de plus forte énergie cinétique turbulente de l'écoulement d'air whirlé, produisant un mélange rapide entre comburant et carburant. La distance de coincement est estimée expérimentalement à 0.5 mm. La photo de droite représente la flamme d'un mélange méthane/air enrichi en oxygène à richesse 0.3 dans la chambre de 49.1 mm^3 . Une flamme bleue swirlée est visible de façon plus intense que la flamme propane/air du fait des réactions plus fortes. Deux points brillants au centre de la chambre sont observables, provenant du rayonnement de la bougie d'allumage.

L'influence de la position d'injection de méthane dans un brûleur similaire a été analysée par Yetter *et al.* [236] (voir Fig. 2.18 (a)) : deux positions ont été testées, une au centre de la surface circulaire (injection symétrique) et l'autre plus proche de l'injection d'air (injection asymétrique). Cette deuxième position a montré de bien meilleures performances : une flamme très stable, jusqu'à des richesses globales inférieures à 0.1 et de bien meilleures émissions polluantes (notamment les NOx). La figure 2.18 (b) présente deux photos de la flamme lors de l'expérience pour les deux positions d'injection. L'injection symétrique (image du haut) produit une flamme allongée orange et très lumineuse de l'ordre de 3-4 diamètres de long. Le changement d'injection (image du bas) induit une flamme bleue beaucoup moins lumineuse et dont la longueur est de l'ordre du diamètre du brûleur. Afin de mieux appréhender les raisons de ces performances, la physique et la structure interne de la flamme ont été étudiées par

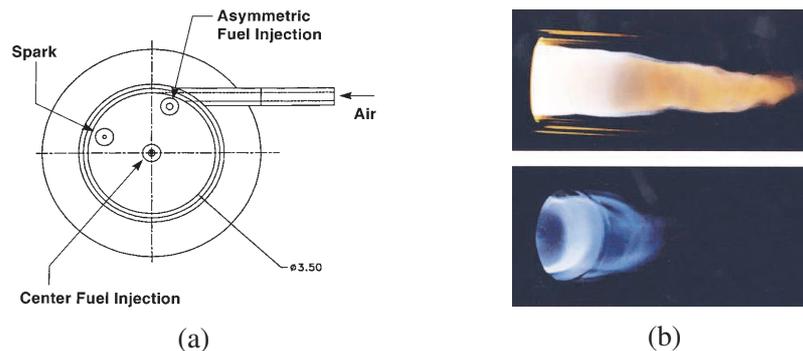


FIGURE 2.18: (a) : schéma de la géométrie et des positions des entrées du brûleur de Yetter [236]. (b) : trajectoires principales de l'écoulement d'air dans la combustion hydrogène/air à la stœchiométrie.

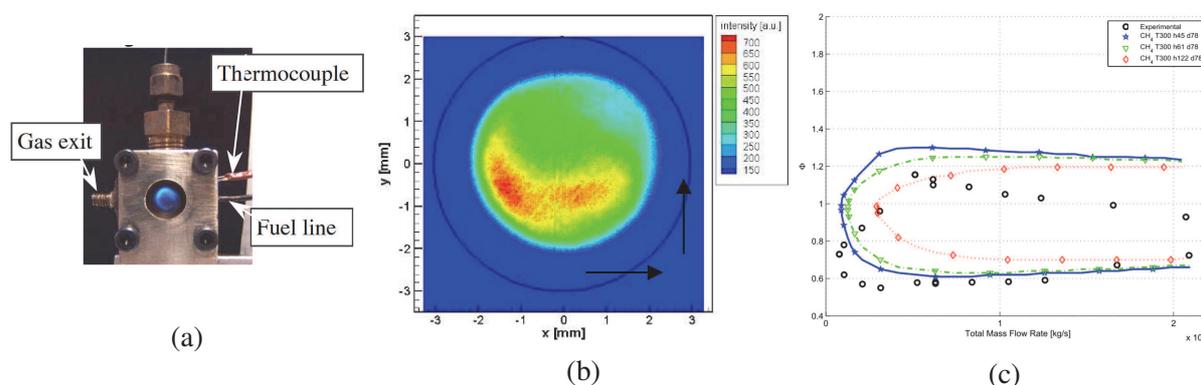


FIGURE 2.19: (a) : dispositif expérimental du brûleur whirled de Milan [49]. (b) : image moyenne obtenue par chimiluminescence CH^* , représentant la position moyenne de la flamme d'un mélange méthane/air à richesse 0.58 ; la flèche verticale indique l'injection d'air et celle horizontale la sortie ; la paroi est indiquée par le cercle noir [46]. (c) : diagramme de stabilité obtenue avec le modèle 0D pour un mélange méthane/air pour différents niveaux de pertes thermiques (lignes de couleur) et comparaison à l'expérience (points) [47].

calcul numérique. La forte température du cœur chaud au centre du brûleur, supérieure à la température adiabatique de flamme, permet à la flamme de se stabiliser tout autour, même à faible richesse.

Un brûleur whirled a aussi été étudié par Cozzi *et al.* au Politecnico de Milan [49, 48, 46]. La géométrie cylindrique fait 6 mm de diamètre et 9 mm de long, soit un volume d'environ 250 mm^3 (Fig. 2.19 (a)). Comme carburant, du méthane et propane avec différents enrichissements en hydrogène ont été testés. La température de paroi mesurée était de l'ordre de 200°C . Cette étude a permis d'établir les diagrammes de stabilité et de mesurer les performances (rendements et polluants) du brûleur [49]. Le rendement de conversion chimique (puissance émise par la flamme sur puissance chimique injectée) est de l'ordre de 70 – 90 % et le rendement thermique (puissance récupérée en sortie sur puissance émise par la flamme) de 30 – 50 % suivant les conditions opératoires. L'expérience a mis en évidence la plus grande zone de flammabilité du propane et butane comparé au méthane [48]. Des diagnostics optiques ont aussi été appliqués [46]. La mesure du champ de vitesse de l'écoulement non réactif a montré une zone très turbulente dans la région proche de l'injection alors que la zone centrale de l'écoulement semble beaucoup plus laminaire. La localisation de la flamme via chimiluminescence CH^* a montré que la flamme se positionne en spirale le long de la paroi interne du cylindre (voir Fig. 2.19 (b)).

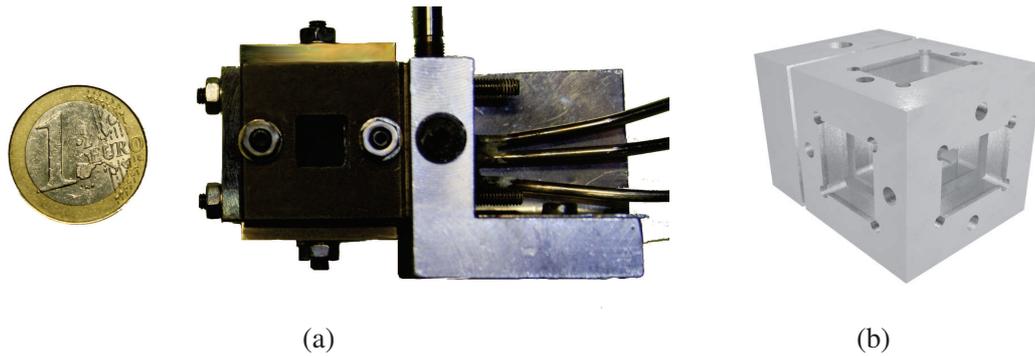


FIGURE 2.20: Photo issue de l'expérience CORIA (a). Rendu 3D de la chambre de combustion (b).

Un modèle 0D a été construit à partir des données expérimentales [47]. Ce modèle, basé sur le concept de réacteur homogène et un schéma cinétique complexe, a permis de reproduire de façon relativement fidèle les limites de stabilité du brûleur whirled côté pauvre, mais semble toutefois incapable de reproduire correctement la tendance côté riche. Les performances et rendements sont en revanche assez semblables entre l'expérience et le modèle. Cette étude a mis en évidence la capacité de reproduire certaines caractéristiques d'un méso-brûleur à partir d'un modèle très simple.

2.6 Expériences menées au CORIA

Initié en 2008 par Y. D'Angelo (CORIA), B. Renou (CORIA) et F. Cozzi (Politecnico di Milano), le projet d'étude de la mésocombustion au CORIA a mené à la fabrication d'un brûleur centimétrique et au financement de deux thèses : une sur l'étude expérimentale, l'autre sur l'étude numérique de ce brûleur. Ce brûleur sera appelé MESO-CORIA dans la suite de ce manuscrit.

2.6.1 Géométrie du brûleur MESO-CORIA

Le brûleur a été conçu pour les besoins de l'expérience de S. Liu en 2008. Fortement relié aux travaux expérimentaux de Cozzi [49], il adopte le même concept d'écoulement whirled.

Au cours de l'expérience menée au CORIA, l'objectif était de réaliser des diagnostics laser sur cette chambre de combustion. C'est pourquoi la forme cubique a été privilégiée au détriment de la forme cylindrique, afin de permettre des accès optiques via des fenêtres planes en quartz, comme montré sur la Fig. 2.20 (b). La forme cubique n'est pas la forme la plus adaptée pour un écoulement whirled. Les conséquences sur les performances du brûleur étaient attendues.

Pour éviter que le volume de la chambre de combustion à chaud ne diffère trop du volume à froid du fait de la dilatation thermique, la chambre a été construite en Invar (FeNi36), matériau à faible coefficient d'expansion thermique. L'utilisation d'un matériau différent pour les hublots de visualisation, du quartz donc avec une dilatation différente, a contraint à l'utilisation de joints en laiton (Fig. 2.20 (a)).

Les dimensions du brûleur sont $8 \times 8 \times 10 \text{ mm}^3$, ce qui correspond à un volume fluide d'environ 640 mm^3 , les arêtes du cube selon la direction axiale étant arrondies (Fig. 2.21). Il présente deux entrées cylindriques : une pour l'air avec un diamètre de 0.8 mm et une autre pour le carburant de 1 mm de diamètre. La sortie du brûleur est un tube de diamètre 2 mm.

L'allumage du mélange gazeux était assuré via une étincelle produite par un allumeur électrique introduit dans la chambre par le tube de sortie, puis retiré une fois la combustion stabilisée.

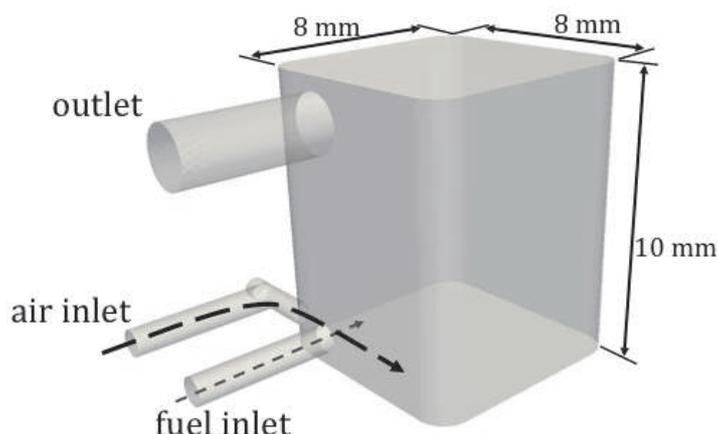


FIGURE 2.21: Représentation 3D du volume fluide.

2.6.2 Résultats expérimentaux notables

L'étude expérimentale du brûleur MESO-CORIA a permis d'accéder facilement à de nombreuses mesures macroscopiques telles que les températures de paroi et de sortie des gaz chauds, aux polluants en sortie, à la pression dans la chambre. Les diagnostics optiques sont en revanche beaucoup plus difficiles à obtenir dans un volume d'étude de cette taille. Par exemple, la mesure du champ de vitesse par PIV nécessite l'ensemencement en particules. Mais l'injection de ces particules via de petits injecteurs et à faible nombre de Reynolds est particulièrement difficile. La faible taille des hublots en quartz, $6 \times 6 \text{ mm}^2$, pose une difficulté supplémentaire. De plus, l'utilisation de gouttes d'huile en tant que particules limite l'étude à des écoulements non réactifs.

Néanmoins, l'ensemble des mesures a permis de tirer de nombreux enseignements sur ce brûleur. Ce dernier est susceptible de fonctionner avec différents mélanges gazeux (méthane-air et propane-air) et à différents débits et richesses. Les performances globales du brûleur, puissances et rendements de combustion et thermique, ont pu être déterminés. Les diagrammes de stabilité de combustion ont été construits. L'utilisation d'une baie d'analyse a permis la mesure des polluants sur un grand nombre de points de fonctionnement et des rendements chimiques associés ont été déduits [137].

Les instabilités thermo-acoustiques ont été étudiées via la mesure de la pression dans la chambre et l'évaluation de l'indice de Rayleigh. Comme indiqué précédemment, la mesure du champ de vitesse de l'écoulement non réactif par PIV, du fait de sa difficulté, n'a pas donné de résultats véritablement exploitables. Cependant des mesures de chimiluminescence CH^* et OH^* ont été possibles. Ces mesures de chimiluminescence permettent d'accéder à la localisation instantanée de la flamme avec une intégration du signal suivant la direction d'observation. Ainsi, la position moyenne de la flamme a été obtenue suivant deux directions différentes et pour différents points de fonctionnement.

L'enrichissement en hydrogène du mélange de carburant a aussi été étudié. L'ajout d'hydrogène a eu pour effet une meilleure stabilisation de la flamme et a ainsi étendu le domaine de flammabilité du brûleur. De plus, une réduction sensible des émissions polluantes tels que CO et imbrûlés a été observée.

2.6.3 Simulation numérique DNS

En parallèle de l'étude expérimentale, une étude numérique a été menée sur le brûleur MESO-CORIA [203]. L'étude s'est concentrée sur la topologie de l'écoulement, le régime de combustion, l'influence

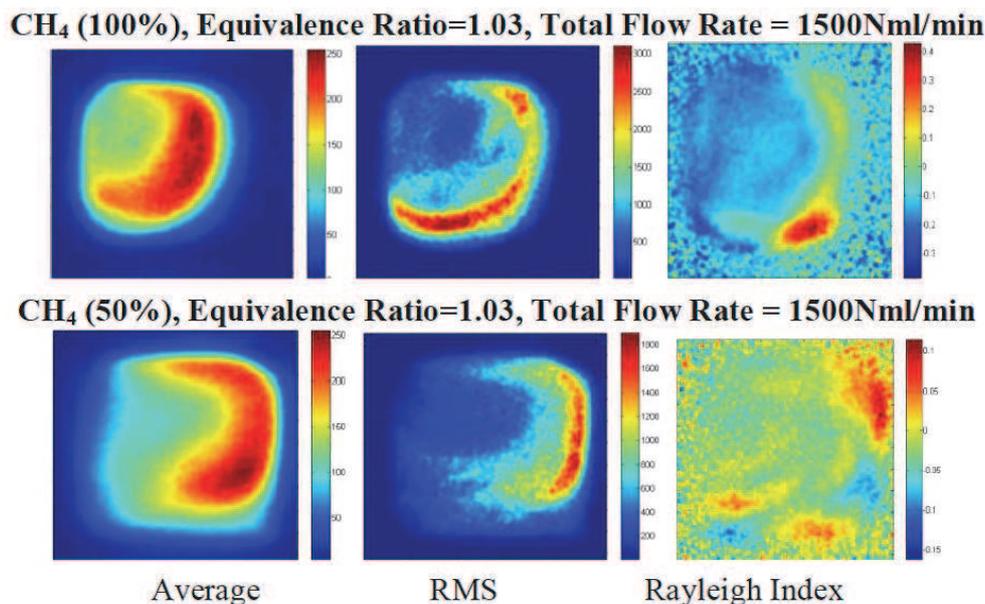


FIGURE 2.22: Impact de l'ajout d'hydrogène dans le mélange gazeux sur la position de la flamme (gauche et milieu) et instabilité thermo-acoustique (droite), tiré de [137].

des débits et richesse, uniquement pour un mélange méthane-air. Pour cela, le code H-Allegro a été utilisé et adapté pour réaliser des calculs DNS du brûleur. H-Allegro est un solveur des équations de Navier-Stokes 3D compressibles et réactives, massivement parallèle et à précision élevée [5]. Il utilise un schéma spatial de différences finies explicite d'ordre 6. L'avancement temporel est réalisé avec un schéma Runge-Kutta d'ordre 3. Le code étant structuré, il est limité aux domaines parallélépipédiques. Une méthode couplant grille décalée (*staggered*) et grille non décalée (*colocated*), dite méthode hybride, permet un gain en temps de calcul important. Les conditions aux limites sont traitées via une version adaptée de la condition NSCBC3D [139] et via une condition de mur réfléchissant isotherme [204]. Une chimie méthane-air à une étape et à masse volumique constante a été adaptée aux écoulements partiellement pré-mélangés, présentant des inhomogénéités de richesse.

Deux points de fonctionnement non-réactifs et trois autres réactifs ont été investigués. Concernant l'écoulement réactif, il a été vérifié que le cœur chaud central lié à l'écoulement whirlé permet bien de stabiliser la combustion. L'augmentation de la richesse globale implique une combustion plus en aval de l'écoulement tandis que l'augmentation de débit permet de mieux répartir la flamme dans le domaine, du fait de l'augmentation de la turbulence.

L'analyse de la flamme a montré que la combustion s'effectuait principalement en régime prémélangé, même si une flamme de diffusion était visible en "post-combustion" dans les gaz brûlés. D'autre part, l'observation du taux de réaction global indique que la flamme est très instationnaire. Enfin, la réalisation de diagrammes de combustion a montré que de nombreux régimes de combustion sont présents au sein de la chambre de combustion.

Cette étude a apporté de nombreuses informations sur l'écoulement réactif dans ce brûleur centimétrique. Néanmoins, certaines limites de l'étude sont à noter comme l'utilisation d'un schéma de cinétique chimique trop simple (une étape) ou bien la non prise en compte de la géométrie réelle (parfaitement cubique dans la simulation DNS et sans les tubes d'entrées et sortie).

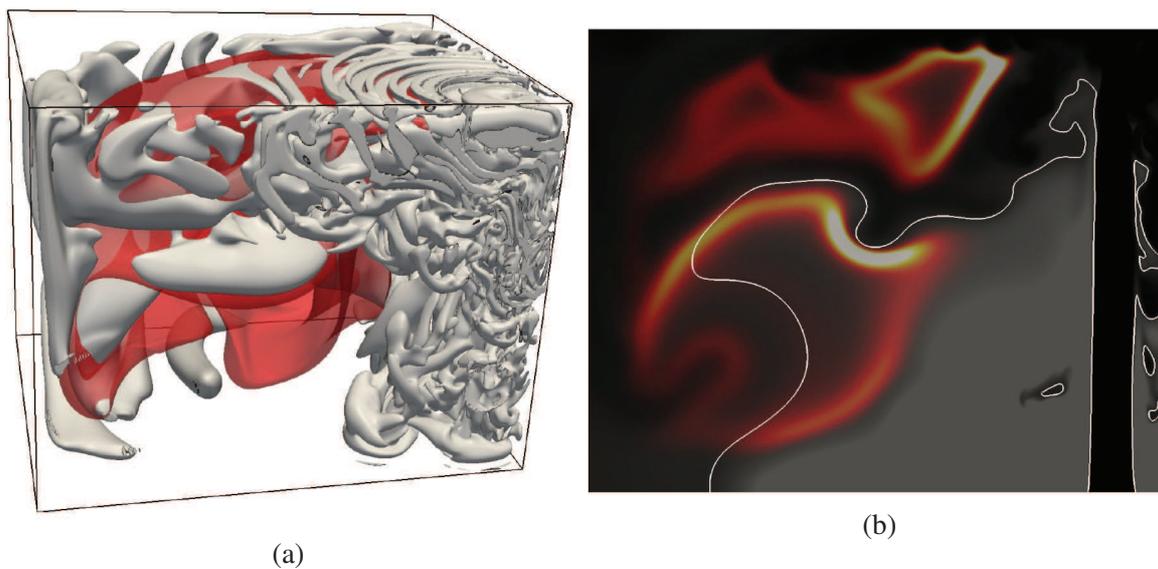


FIGURE 2.23: (a) : Iso-contour du taux de réaction (rouge) et du critère-Q (gris). (b) : Visualisation du taux de réaction (couleur feu) et de la fraction de mélange Z (surimposition en échelle de gris, iso-contour de la stœchiométrie en blanc) sur une coupe dans un plan du domaine.

Chapitre 3

Equations de l'aérothermochimie

Le Chapitre 3 rappelle les équations régissant le mouvement d'un fluide réactif. Une attention particulière est portée sur les phénomènes de transport et l'évaluation des termes sources chimiques. L'hypothèse de faible de nombre de Mach est exposée, le formalisme LES et le modèle d'épaississement de flamme utilisé au cours de cette thèse font également l'objet de ce chapitre. Les caractéristiques du code de calcul YALES2 ainsi que les choix de modélisation sont présentés.

Sommaire

3.1 Propriétés d'un mélange	45
3.1.1 Composition d'un mélange	45
3.1.2 Description thermodynamique d'un mélange	45
3.1.3 Loi d'état mécanique	47
3.2 Ecriture des équations bilans	47
3.2.1 Equations de conservation	47
3.2.2 Expression des flux diffusifs dans le cas général	48
3.2.3 Hypothèses simplificatrices	49
3.2.4 Modélisation des phénomènes de transport	49
3.3 Modélisation de la chimie	53
3.3.1 La cinétique chimique	53
3.3.2 Méthodes de réduction du coût de la chimie	55
3.3.3 Variables caractéristiques liées à la flamme	57
3.4 Extension des équations au formalisme LES	60
3.4.1 Introduction à la turbulence	60
3.4.2 Simulation d'écoulements turbulents : approches DNS / LES / RANS	62
3.4.3 Etablissement des équations filtrées de la LES	63
3.4.4 Modélisation de sous-maille pour la turbulence	64
3.4.5 Modèles de combustion turbulente	66
3.5 Le modèle d'épaississement de flamme : TFLES	67
3.5.1 Principe général	67
3.5.2 Conditions sur l'épaississement \mathcal{F}	68
3.5.3 Interaction flamme-turbulence	68
3.5.4 Expression dynamique du modèle TFLES	70
3.6 Résolution numérique dans YALES2	71
3.6.1 Difficultés de résolution des équations bilans	71

3.6.2	Stratégies adoptées et concepts généraux de YALES2	72
3.6.3	Solveur incompressible à densité constante (ICS)	78
3.6.4	Solveur incompressible dilatable (VDS)	80
3.6.5	Résolution de l'équation de Poisson	82

3.1 Propriétés d'un mélange

3.1.1 Composition d'un mélange

Avant de présenter les équations régissant l'aérothermochimie, il est nécessaire de définir quelques propriétés du mélange utilisées par la suite. Le mélange considéré possède N_{sp} espèces chimiques indiquées k .

La densité ou masse volumique du mélange ρ correspond à la somme des densités partielles ρ_k des espèces qui le compose :

$$\rho = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho_k . \quad (3.1)$$

La fraction massique Y_k de chaque espèce k s'en déduit directement :

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho} . \quad (3.2)$$

Par définition, les fractions massiques sont comprises entre 0 et 1, leur somme étant égale à 1 :

$$0 \leq Y_k \leq 1 , \quad (3.3)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = 1 . \quad (3.4)$$

La masse molaire du mélange W est évaluée à partir des fractions massiques Y_k et des masses molaires W_k des espèces,

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} . \quad (3.5)$$

Les fractions molaires des espèces X_k et les concentrations des espèces C_k sont alors déduites à l'aide des formules suivantes :

$$X_k = \frac{W}{W_k} Y_k , \quad (3.6)$$

$$C_k = \frac{\rho_k}{W_k} . \quad (3.7)$$

3.1.2 Description thermodynamique d'un mélange

La capacité calorifique molaire de l'espèce k à la pression standard $P^0 = 1$ atm en fonction de la température T est déterminée à l'aide d'une approximation polynomiale ajustée à partir de données expérimentales [85], aussi appelée "polynôme NASA" :

$$\frac{C_{p,k}^m(T, P^0)}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4 , \quad (3.8)$$

où $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ désigne la constante des gaz parfaits.

A partir de la capacité calorifique, on peut définir l'enthalpie et l'entropie :

$$H_k^m(T, P^0) = \int_{T^0}^T C_p^m(\theta, P^0) d\theta + \Delta h_{f,k}^{0,m}, \quad (3.9)$$

$$S_k^m(T, P^0) = \int_{T^0}^T \frac{C_p^m(\theta, P^0)}{\theta} d\theta, \quad (3.10)$$

avec $\Delta h_{f,k}^{0,m}$ l'enthalpie molaire de formation de l'espèce k à la pression standard P^0 et température de référence T^0 . T^0 est définie de manière à obtenir $H_k^m(T^0, P^0) = \Delta h_{f,k}^{0,m}$. N'importe quelle valeur de température de référence peut être prise pour T^0 et choisir $T^0 = 0 \text{ K}$ pourrait être un choix logique [190]. Néanmoins, réunir des informations expérimentales sur l'enthalpie à 0 K s'avère difficile. La température de référence est alors couramment choisie à $T^0 = 298.15 \text{ K}$ [179]. On peut alors déduire les approximations polynomiales pour l'enthalpie et l'entropie :

$$\frac{H_k^m(T, P^0)}{RT} = \frac{a_{6,k}}{T} + a_{1,k} + \frac{a_{2,k}}{2}T + \frac{a_{3,k}}{3}T^2 + \frac{a_{4,k}}{4}T^3 + \frac{a_{5,k}}{5}T^4, \quad (3.11)$$

$$\frac{S_k^m(T, P^0)}{R} = a_{7,k} + a_{1,k} \ln(T) + a_{2,k}T + \frac{a_{3,k}}{2}T^2 + \frac{a_{4,k}}{3}T^3 + \frac{a_{5,k}}{4}T^4. \quad (3.12)$$

On constate dès lors que $a_{6,k} = \Delta h_{f,k}^{0,m}$. Les coefficients $a_{n,k}$ dépendent évidemment de chaque espèce mais aussi du domaine de température dans lequel le mélange se situe. Il existe 7 coefficients pour les températures basses et 7 autres pour les températures hautes. Les températures basses s'étendent typiquement de 300 à $1\,000 \text{ K}$ et les températures hautes de $1\,000$ à $5\,000 \text{ K}$. Cependant, ces valeurs sont *a priori* définies indépendamment pour chaque espèce. Un ensemble de 14 coefficients et 3 températures est donc nécessaire pour chaque espèce.

A partir des propriétés individuelles des espèces, il est possible de déterminer les propriétés molaires du mélange à l'aide des lois de mélange suivantes,

$$C_p^m(T, P, X) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k C_{p,k}^m(T, P^0), \quad (3.13)$$

$$H^m(T, P, X) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k H_k^m(T, P^0), \quad (3.14)$$

$$S^m(T, P, X) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \left(S_k^m(T, P^0) - R \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) - R \ln(X_k) \right). \quad (3.15)$$

Les deux premières lois correspondent à de simples lois additives alors que celle sur l'entropie est plus complexe et fait intervenir un terme de pression et un terme de mélange. Les relations (3.13), (3.14) et (3.15) permettent de calculer directement les propriétés molaires. La capacité calorifique massique C_p , l'enthalpie massique H et l'entropie massique S sont alors obtenues suivant :

$$C_p = \frac{C_p^m}{W}, \quad (3.16)$$

$$H = \frac{H^m}{W}, \quad (3.17)$$

$$S = \frac{S^m}{W}. \quad (3.18)$$

3.1.3 Loi d'état mécanique

Afin de prédire l'évolution thermodynamique du système étudié, une équation d'état est nécessaire afin d'établir une relation entre les différentes variables d'état. Plusieurs types d'équations d'état existent. Le choix s'effectue suivant les phénomènes physiques étudiés.

Au cours de cette thèse, le mélange sera considéré comme un gaz parfait. L'équation d'état reliant température et pression s'écrit :

$$P = \rho \frac{R}{W} T. \quad (3.19)$$

3.2 Ecriture des équations bilans

3.2.1 Equations de conservation

Dans un milieu continu, le mouvement des fluides est régi par les équations de Navier-Stokes. Ces équations peuvent être rigoureusement déduites de la mécanique statistique et des principes de base (conservation du nombre de molécules, de la quantité de mouvement, de l'énergie...). Cette dérivation n'est pas triviale et peut être trouvée dans [83, 100, 15].

Les équations bilans traduisent au niveau macroscopique la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. La conservation de la masse peut aussi s'écrire via la conservation des espèces chimiques. Cela implique la résolution d'une équation de transport pour chaque espèce présente dans le mélange.

Ces équations sont exprimées ci-dessous sous leur forme conservative et utilisent la convention d'Einstein sur les indices répétés.

La conservation de la quantité de mouvement est donnée selon :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}, \quad (3.20)$$

où τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses.

L'équation de conservation de espèces est :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k, \quad (3.21)$$

où $\mathcal{F}_{k,i}$ représente le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i et $\dot{\omega}_k$ le terme source de l'espèce k .

La conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.22)$$

avec u_i la composante du vecteur vitesse selon la direction i .

La conservation de l'énergie peut être présentée sous différentes formes selon la grandeur considérée. La variable choisie dans ces travaux pour écrire l'équation bilan est l'enthalpie sensible h_s car les calculs sont effectués à pression constante. Elle définie comme :

$$h_s(T) = \int_{T^0}^T C_p(\theta) d\theta. \quad (3.23)$$

L'équation de conservation de l'enthalpie sensible h_s s'écrit :

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h_s}{\partial x_i} = \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial Q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \dot{\omega}_T, \quad (3.24)$$

où Q_i correspond au flux diffusif dans la direction i , $\dot{\omega}_T$ au terme source chimique et \dot{Q} au terme source de chaleur (par exemple étincelle, laser ou flux radiatif). L'opérateur $D \cdot / Dt$ est appelé la dérivée particulaire et s'exprime $D \cdot / Dt = \partial \cdot / \partial t + u_i \partial \cdot / \partial x_i$. Le terme source d'énergie chimique représente le dégagement de chaleur produit lors de la combustion et est fonction des enthalpies de formation des espèces :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k. \quad (3.25)$$

3.2.2 Expression des flux diffusifs dans le cas général

La diffusion est le résultat de mouvements microscopiques qui tendent à effacer les gradients macroscopiques présents dans un fluide, représentant un écart à la distribution de Maxwell sous l'hypothèse d'un équilibre thermodynamique local.

A partir de la théorie cinétique des gaz, plusieurs flux diffusifs sont mis en évidence lors des écritures des équations de Navier-Stokes [83] : τ_{ij} , Q_i et $\mathcal{F}_{k,i}$ des équations (3.20), (3.21) et (3.24). Ces trois flux sont exprimés ci-après [31, 83] :

- le tenseur des contraintes visqueuses, pour un fluide Newtonien,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.26)$$

avec μ la viscosité dynamique, δ_{ij} le symbole de Kronecker et κ la viscosité volumique. On peut introduire ici la viscosité cinématique ν à partir de la viscosité dynamique du mélange $\nu = \mu/\rho$.

- le flux de diffusion de l'espèce k

$$\mathcal{F}_{k,i} = \rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k, \quad (3.27)$$

où $\mathcal{V}_{k,i}$ est la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i . Elle s'écrit :

$$\mathcal{V}_{k,i} = - \sum_{j=1}^{N_{sp}} D_{kj} d_{j,i} - \theta_k \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} = - \sum_{j=1}^{N_{sp}} D_{kj} \left(d_{j,i} + \chi_j \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \right), \quad (3.28)$$

avec :

$$d_{k,i} = \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + (X_k - Y_k) \frac{\partial \ln P}{\partial x_i}. \quad (3.29)$$

Dans ces équations, D est la matrice de diffusion dont les éléments D_{kj} dépendent de la température T , de la pression P et de la fraction massique Y_k . θ_k est le coefficient de diffusion thermique de l'espèce k et χ_k le rapport de diffusion thermique de l'espèce k qui doit satisfaire la contrainte $\sum_{k=1}^{N_{sp}} \chi_k = 0$. Ils sont associés aux effets de Soret et Dufour.

- le flux de chaleur

$$Q_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} - P \sum_{k=1}^{N_{sp}} \chi_k \mathcal{V}_{k,i}, \quad (3.30)$$

$$= \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} (\rho h_{s,k} Y_k + P \chi_k) \mathcal{V}_{k,i}. \quad (3.31)$$

3.2.3 Hypothèses simplificatrices

Certains termes apparus dans les équations précédentes ont une faible influence sur l'écoulement et sont donc négligés, notamment dans l'approche à faible nombre de Mach faite dans le code YALES2 :

- le terme source de chaleur \dot{Q} de l'Eq. 3.24 est négligé car aucune source de chaleur n'intervient dans les travaux de cette thèse, le rayonnement n'est pas pris en compte,
- le terme de travail visqueux $\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ de l'Eq. 3.24 est négligé car il évolue comme le carré du nombre de Mach,
- le terme incluant κ dans l'Eq. 3.26 a peu d'influence sur la structure du fluide dans les écoulements à faible nombre de Mach,
- le terme $\frac{\partial \ln P}{\partial x_i}$ de l'Eq. 3.29 est aussi négligé, la pression thermodynamique étant constante en espace dans le formalisme à faible nombre de Mach.

A partir de ces hypothèses, on peut ré-écrire les flux diffusifs :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.32)$$

$$\mathcal{F}_{k,i} = \rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k, \quad (3.33)$$

$$\mathcal{Q}_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} - P \sum_{k=1}^{N_{sp}} \chi_k \mathcal{V}_{k,i}. \quad (3.34)$$

avec

$$\mathcal{V}_{k,i} = - \sum_{j=1}^{N_{sp}} D_{kj} \left(\frac{\partial X_j}{\partial x_i} + \chi_j \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \right). \quad (3.35)$$

L'importance des effets Soret et Dufour sera discuté au cours de cette thèse. Les flux diffusifs dans une approche de transport complexe sont décrits dans les sections suivantes avec et sans prise en compte de ces effets, menant à deux systèmes d'équations différents. Un modèle de transport simplifié classique est ensuite proposé.

3.2.4 Modélisation des phénomènes de transport

Différents niveaux de complexité peuvent être apportés pour le calcul des propriétés de transport, c'est-à-dire la viscosité μ , la conductivité thermique λ et les vitesses de diffusion des espèces $\mathcal{V}_{k,i}$. Trois approches sont présentées ici, de la plus à la moins coûteuse : l'approche multicomposant, les lois de mélange et une approche dite simplifiée.

3.2.4.1 Approche multicomposant

Les propriétés de transport d'un mélange interviennent directement dans les équations de l'aérothermochimie mais découlent de la théorie cinétique des gaz. Cette théorie fait intervenir des notions comme le potentiel de Lennard-Jones, les intégrales de collisions calculées par Mason et Monchick et les relations d'Eucken étendues par Warnatz. Le lecteur pourra se référer à la thèse de Gruselle [88] pour plus de détails ou encore aux papiers suivants [31, 158, 224]. La théorie permet d'exprimer la viscosité μ_i , la conductivité λ_i de chaque espèce i et le coefficient de diffusion binaire \mathcal{D}_{ij} de chaque paire d'espèces (i, j) .

A partir de ces propriétés par espèce, les propriétés locales du mélange doivent être déterminées. La façon la plus précise de calculer ces propriétés consiste en la résolution de systèmes linéaires de taille

$(N_{sp})^2$ dans chaque direction spatiale. Cette approche, appelée multicomposant ou "*Multicomponent*", s'avère difficile et très coûteuse à réaliser d'un point de vue algorithmique [65].

3.2.4.2 Lois de mélange

Un modèle plus simple est utilisé dans cette thèse. Il consiste à calculer des propriétés de transport à partir de lois de mélanges. Ces lois sont beaucoup moins chères à calculer que les vraies propriétés obtenues avec l'approche multicomposant. Parmi les lois de mélanges disponibles dans la littérature, sont présentées ici celle utilisées au cours de cette thèse.

La viscosité de cisaillement μ d'un mélange est calculée à partir de la formule de Wilke [15],

$$\mu = \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{X_i \mu_i}{\sum_j \Phi_{ij}}, \quad (3.36)$$

où les poids Φ_{ij} sont donnés par :

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \frac{1}{\sqrt{1 + W_i/W_j}} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_j}{\mu_i}} \left(\frac{W_i}{W_j} \right)^{1/4} \right). \quad (3.37)$$

La conductivité thermique λ du mélange est calculée via la loi de mélange donnée par Brocaw [22] et Mathur, Tondon et Saxena [152],

$$\lambda = \frac{1}{2} (\lambda_{\parallel} + \lambda_{\perp}). \quad (3.38)$$

avec λ_{\parallel} et λ_{\perp} définis comme :

$$\lambda_{\parallel} = \sum_{i=1}^{N_{sp}} X_i \lambda_i, \quad (3.39)$$

$$\lambda_{\perp}^{-1} = \sum_{i=1}^{N_{sp}} X_i \lambda_i^{-1}. \quad (3.40)$$

Hirschfelder et Curtiss [100] proposent une approximation considérée comme la meilleure au premier ordre selon Ern et Giovangigli [65, 83]. Cette approche, dite "*Mixture Averaged*", consiste à définir un seul coefficient par espèce k dans le mélange. On définit alors le coefficient de diffusion D_k^* par espèce à partir des coefficients de diffusion binaires \mathcal{D}_{kj} :

$$D_k^* = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / \mathcal{D}_{kj}}. \quad (3.41)$$

Lorsqu'une espèce k est seule dans le mélange (en pratique lorsque $Y_k > 1 - \epsilon$ avec $\epsilon = 10^{-4}$), le coefficient binaire de l'espèce k avec elle-même est la meilleure approximation pour D_k^* , à la place de l'Eq. 3.41 :

$$D_k^* = \mathcal{D}_{kk}. \quad (3.42)$$

Simplification des flux sans effets Soret et Dufour

Sans prise en compte des effets Soret et Dufour, et pour l'approximation d'Hirshfelder et Curtiss, la vitesse de diffusion $\mathcal{V}_{k,i}$ s'exprime selon :

$$\mathcal{V}_{k,i} = -\frac{D_k^*}{X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + V_{c,i}. \quad (3.43)$$

Le terme $V_{c,i}$ correspond à une vitesse de correction, introduite afin d'assurer la conservation de la masse :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{V}_{k,i} Y_k = 0. \quad (3.44)$$

La vitesse de correction est déduite :

$$V_{c,i} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} D_k^* \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}. \quad (3.45)$$

Sans prise en compte des effets Soret et Dufour, les flux diffusifs s'écrivent :

$$\mathcal{F}_{k,i} = -\rho \frac{D_k^*}{X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \rho Y_k V_{c,i}, \quad (3.46)$$

$$\mathcal{Q}_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{V}_{k,i} Y_k. \quad (3.47)$$

Simplification des flux avec effets Soret et Dufour

Lorsqu'un mélange est soumis à un gradient de température, une séparation des espèces le long du gradient est observée. Cet effet est appelé effet Soret ou effet thermodiffusif. Mis en évidence indépendamment par Soret en 1879 et Ludwig en 1856, démontré pour un mélange binaire à partir de la théorie cinétique des gaz par Chapman, cet effet se manifeste sans aucun mouvement du fluide : c'est un mécanisme de diffusion pur. L'amplitude de la séparation des constituants du mélange est caractérisé par un coefficient de thermodiffusion, le coefficient Soret.

Le phénomène inverse peut également se produire : c'est l'effet Dufour (1872). Dans ce cas, un gradient de température s'établit lorsque deux constituants, initialement à la même température, se mélangent par diffusion.

Le plus souvent, les effets thermodiffusifs sont faibles et dans la plupart des cas négligés. Cependant, des études révèlent qu'il convient de prendre en compte les effets Soret et Dufour dans certains cas comme le mélange de gaz à Schmidt différents de l'unité [18] ou encore l'interaction flamme-paroi [179, 187].

La théorie cinétique des gaz permet d'obtenir des coefficients thermiques binaires χ_{ij} (diffusion d'une espèce par rapport à une autre), comme pour la diffusion moléculaire. On peut définir un coefficient thermique χ_k par espèce dans le mélange [31] :

$$\chi_k = \sum_{j \neq k}^{N_{sp}} \chi_{kj}. \quad (3.48)$$

La vitesse de diffusion d'une espèce $\mathcal{V}_{k,i}$ en formulation Hirschfelder & Curtiss et avec les effets Soret et Dufour s'écrit [118, 82] :

$$\mathcal{V}_{k,i} = -\frac{D_k^*}{X_k} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \chi_k \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + V_{c,i}, \quad (3.49)$$

$$\mathcal{V}_{k,i} Y_k = -D_k^* \frac{W_k}{W} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \chi_k \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + Y_k V_{c,i}. \quad (3.50)$$

De nouveau, la vitesse de correction $V_{c,i}$ est introduite afin de conserver la masse totale $\sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{V}_{k,i} Y_k = 0$:

$$V_{c,i} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} -D_k^* \frac{W_k}{W} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \chi_k \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right). \quad (3.51)$$

Avec prise en compte des effets Soret et Dufour, les flux diffusifs s'écrivent :

$$\mathcal{F}_{k,i} = -\rho D_k^* \frac{W_k}{W} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \chi_k \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \rho Y_k V_{c,i}, \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \left[\rho D_k^* \frac{W_k}{W} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \chi_k \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \rho Y_k V_{c,i} \right] + \\ P \sum_{k=1}^{N_{sp}} \chi_k \left[-\frac{D_k^*}{X_k} \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \chi_k \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + V_{c,i} \right]. \end{aligned} \quad (3.53)$$

3.2.4.3 Modèle de transport simplifié

Dans beaucoup de cas, comme par exemple les écoulements fortement turbulents, la modélisation des phénomènes de transport ne nécessite pas une telle précision. Pour des raisons de coût de calcul un modèle de transport simplifié est alors préféré. Il est basé sur des lois empiriques largement utilisées et couramment trouvées dans les codes de simulation numérique des fluides.

La viscosité dynamique peut être calculée par l'intermédiaire d'une loi dépendant de la température. La loi la plus courante est la loi de Sutherland [207] :

$$\mu = \mu_{ref} \frac{T_{ref} + C}{T + C} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2}, \quad (3.54)$$

où la viscosité de référence μ_{ref} , la température de référence T_{ref} et la température de Sutherland C dépendent du mélange considéré. Pour l'air, à une température comprise entre 170 et 1 900 K, on utilise $\mu_{ref} = 1.715 \times 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, $T_{ref} = 273.15 \text{ K}$ et $C = 110.4 \text{ K}$.

Pour les diffusivités thermique et massique, il est nécessaire d'introduire des nombres adimensionnels :

- Le nombre de Schmidt caractérise le rapport entre la viscosité cinématique ν et la diffusivité moléculaire D_k de l'espèce k :

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} = \frac{\mu}{\rho D_k}. \quad (3.55)$$

Certaines espèces ont un nombre de Schmidt très inférieur à 1, comme l'hydrogène moléculaire ($Sc_{H_2} = 0.2$) ou l'hydrogène atomique ($Sc_H = 0.1$). Cela signifie que l'espèce diffuse beaucoup plus vite que la quantité de mouvement.

- Le nombre de Prandtl est le rapport de la viscosité par la diffusivité thermique,

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}. \quad (3.56)$$

De la même façon, un Prandtl inférieur à 1 révèle que la chaleur diffuse plus vite dans le mélange que la quantité de mouvement.

- Le nombre de Lewis se calcule comme le rapport de la diffusivité thermique sur la diffusivité moléculaire :

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho C_p D_k}. \quad (3.57)$$

De la même façon, un Lewis inférieur à 1 signifie que l'espèce k diffuse plus vite que la chaleur.

On remarque que l'on peut définir un nombre de Schmidt et de Lewis par espèce alors que le nombre de Prandtl est propre au mélange. Une relation existe entre ces trois nombres sans dimensions :

$$Sc_k = Le_k Pr. \quad (3.58)$$

Le nombre de Prandtl pour les gaz est usuellement de $Pr \approx 0.72$. Le nombre de Lewis varie entre 0.2 et 2.

On peut alors écrire les flux diffusifs simplement :

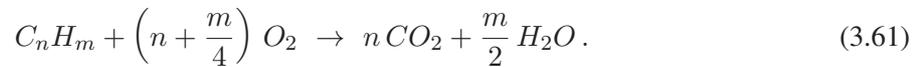
$$\mathcal{F}_{k,i} = \rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} = \rho \frac{\mu}{Sc_k} \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (3.59)$$

$$\mathcal{Q}_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (3.60)$$

3.3 Modélisation de la chimie

3.3.1 La cinétique chimique

Pour des écoulements réactifs, il est nécessaire de calculer précisément les termes sources chimiques $\dot{\omega}_k$ issus des réactions de la combustion (équation 3.21). Dans le cas de la réaction d'un hydrocarbure avec l'air, la réaction globale s'écrit :



Dans le cas du méthane, elle se traduit sous la forme :



Cependant, dans la réalité, une telle réaction globale n'est pas pertinente. La description d'une réaction par une seule équation chimique globale ne peut permettre de capter tous les phénomènes chimiques qui sont bien plus complexes. En effet, la combustion ne se déroule pas en une seule étape mais en une multitude de réactions N_r qui peuvent entraîner un grand nombre d'espèces intermédiaires N_{sp} . Il est nécessaire de décrire l'enchaînement des étapes élémentaires ainsi que déterminer la vitesse associée à ces réactions [228, 130, 179].

D'une manière générale, on peut écrire les réactions sous la forme suivante :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{kr} M_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{kr} M_k, \quad r = 1, \dots, N_r, \quad (3.63)$$

où M_k représente le symbole chimique de l'espèce k , ν'_{kr} et ν''_{kr} sont les coefficients stœchiométriques de cette espèce dans la réaction r .

Le taux d'avancement q_r de la réaction r s'écrit :

$$q_r = k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}} - k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}, \quad (3.64)$$

avec C_k la concentration molaire de l'espèce k , k_{fr} et k_{br} étant respectivement les constantes de taux de réactions direct (indice f comme *forward* en anglais) et indirect (indice b comme *backward* en anglais) de la réaction r . Le taux de réaction massique $\dot{\omega}_k$ est défini comme la somme des taux de production $\dot{\omega}_{kr}$ de chaque réaction r impliquant l'espèce k tel que :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{k=1}^{N_r} \dot{\omega}_{kr} = W_k \sum_{k=1}^{N_r} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) q_r. \quad (3.65)$$

Le calcul des constantes de taux de réactions directes k_{fr} représente un problème central pour la modélisation de la combustion. En général, une loi d'Arrhenius est adoptée :

$$k_{fr} = A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_{a,r}}{RT}\right) = A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right), \quad (3.66)$$

avec A_r la constante pré-exponentielle, β_r l'exposant de température, E_r l'énergie d'activation et T_a la température d'activation de la réaction r .

On détermine les taux de réactions indirects k_{br} à partir de la constante d'équilibre $K_{eq,r}$ de la réaction r :

$$k_{br} = \frac{k_{fr}}{K_{eq,r}}. \quad (3.67)$$

La constante d'équilibre $K_{eq,r}$ s'exprime en fonction de la variation d'enthalpie libre standard de la réaction selon :

$$K_{eq,r}(T) = \left(\frac{P^0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr})} \exp\left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT}\right), \quad (3.68)$$

où ΔS_r^0 et ΔH_r^0 sont respectivement les variations d'entropie et d'enthalpie au cours de la réaction et P^0 la pression de référence, utilisée pour la détermination des propriétés thermodynamiques (présentées dans la section 3.1.2).

Toutes les formules présentées jusqu'ici sont suffisantes pour exprimer de façon explicite le terme source d'espèces $\dot{\omega}_k$. Toutefois, la résolution numérique des équations de la cinétique chimique peut faire appel à des méthodes implicites. Il devient nécessaire de résoudre un système linéaire qui demande de calculer une matrice Jacobienne, ce qui requiert de calculer les dérivées partielles suivantes :

$$\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial C_j} = W_k \sum_{k=1}^{N_r} (\nu'_{kr} - \nu''_{kr}) \left[\frac{\partial k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}}{\partial C_j} - \frac{\partial k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}}{\partial C_j} \right], \quad (3.69)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial T} = W_k \sum_{k=1}^{N_r} (\nu'_{kr} - \nu''_{kr}) \left[\frac{\partial k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}}{\partial T} - \frac{\partial k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}}{\partial T} \right]. \quad (3.70)$$

avec

$$\frac{\partial k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}}{\partial C_j} = k_{fr} \frac{\partial \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}}{\partial C_j} = k_{fr} \nu'_{jr} C_j^{-1} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}, \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}}{\partial C_j} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr})}{K_{eq,r} \sum_{k=1}^{N_{sp}} C_k} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}} k_{fr} + k_{br} \nu''_{jr} C_j^{-1} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}, \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}}{\partial T} = \frac{\partial k_{fr}}{\partial T} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}} = k_{fr} T^{-1} (\beta + T_a T^{-1}) \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu'_{kr}}, \quad (3.73)$$

$$\frac{\partial k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}}{\partial T} = \frac{\partial k_{fr}}{\partial T} \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}} = \frac{1}{K_{eq,r}} \left(\frac{\partial k_{fr}}{\partial T} - k_{fr} \frac{\Delta H_r^0}{RT^2} \right) \prod_{k=1}^{N_{sp}} C_k^{\nu''_{kr}}. \quad (3.74)$$

L'utilisation de ces dérivées partielles calculées de façon analytique, ainsi que la résolution implicite de la chimie, est précisée dans la section 3.6.2.

Un type particulier de réaction existe : les réactions *Fall-off*. Dans ces réactions, le taux de réaction k_{fr} a une dépendance en pression impliquant l'ajout d'un troisième corps aux réactions chimiques. Cela modifie légèrement les équations décrites précédemment [136, 81].

L'ensemble des constantes présentées (constante pré-exponentielle A_r , exposant de température β_r , énergie d'activation E_r et paramètres des réactions *Fall-off*) sont rassemblées dans une base de données appelée un schéma cinétique chimique [179]. Il y a donc un jeu de constantes pour les N_r réactions composant le schéma cinétique impliquant les N_{sp} espèces.

La complexité de tels schémas dépend du niveau de précision désirée en terme de caractéristique de flamme, du carburant considéré et des plages de validité du schéma en température, pression et richesse. Plus un schéma sera précis, pour un carburant lourd et avec de grandes plages de validité, plus il sera complexe : il peut contenir plusieurs milliers de réactions et plusieurs centaines d'espèces. La Fig. 3.1 illustre la complexité des schémas cinétiques en fonction du nombre d'espèces et de réactions. Pour un carburant donné, par exemple CH_4 , plusieurs schémas sont proposés : Leeds, GRI1.2, GRI3.0, Konnov... Entre ces schémas, le nombre d'espèces peut varier d'un facteur quatre, le nombre de réactions d'un facteur cinq. Il est important de noter qu'avec le temps, les schémas cinétiques ont tendance à devenir de plus en plus complexes : la puissance de calcul permet aujourd'hui de gérer de tels schémas dans des configurations simples.

La complexité de calcul provient également de la nature même des opérations à effectuer : exponentielles, puissances non entières... De plus, le schéma cinétique peut être raide, au sens où des temps caractéristiques de réaction des espèces très disparates interviennent dans le processus chimique.

3.3.2 Méthodes de réduction du coût de la chimie

Les schémas cinétiques dits "complexes" peuvent comporter plusieurs centaines d'espèces et plusieurs milliers de réactions. Ces schémas sont précis sur des plages d'utilisation très étendues en pression, température et richesse. L'utilisation de tels schémas implique leur résolution sur des maillages très fins afin de traiter correctement l'ensemble des espèces intermédiaires et radicalaires. Il va de soi que les ressources informatiques nécessaires pour les utiliser sont importantes et que le temps de calcul est très élevé. Cette approche n'est pas compatible avec les simulations numériques 3D de configurations industrielles. De plus, les temps caractéristiques chimiques associés à ces schémas complexes peuvent être très courts, limitant le pas temps et augmentant d'autant plus le coût de calcul. Diverses approches

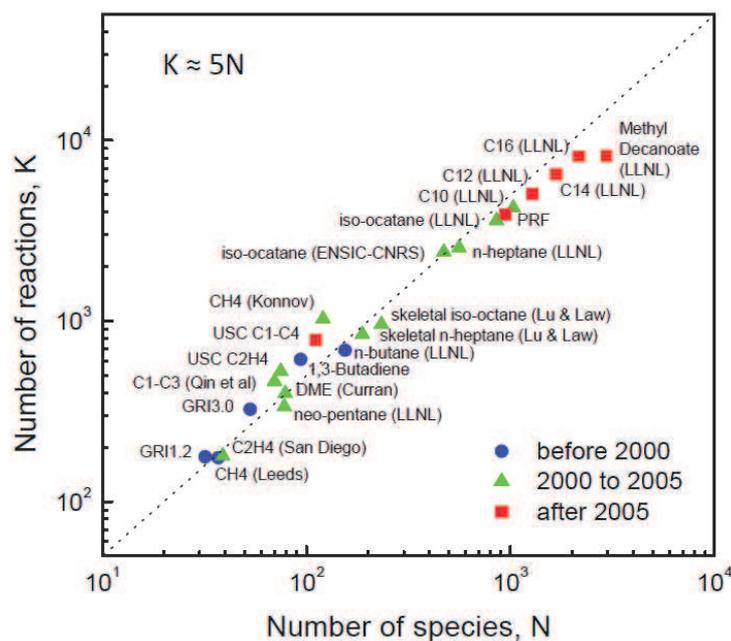


FIGURE 3.1: Taille de différents schémas cinétiques issus de la littérature en fonction du nombre d'espèces N et du nombre de réactions K pour différents carburants, tiré de [131].

ont été développées afin de palier à ces difficultés et rendre accessible le coût de calcul de la chimie pour des simulations numériques de fluides réactifs.

Réduction de schémas cinétiques complexes

Une première approche consiste à réduire la complexité du mécanisme chimique en ne conservant que les espèces et réactions les plus importantes. Diverses méthodes peuvent être trouvées dans la littérature pour arriver à cet objectif.

Parmi elles, les méthodes de type *Directed Relation Graph* (DRG) introduites par Lu [142] consistent à cartographier les relations et dépendances entre les espèces d'un schéma cinétique complexe pour ne conserver que celles qui sont dépendantes d'un ensemble réduit d'espèces importantes. Pepiot [173] propose, avec la *Directed Relation Graph with Error Propagation* (DRGEP), une amélioration de cette méthode en portant une attention particulière à l'erreur introduite en enlevant un groupe d'espèces du mécanisme.

La méthode dite *lumping* consiste à réduire un schéma cinétique détaillé en regroupant plusieurs molécules présentant des comportements identiques en une seule espèce. Une réduction assez importante du nombre d'espèces peut alors être obtenue.

L'Approximation des Etats Quasi-Stationnaires (AEQS) ou encore l'Approximation des Equilibres Partiels (AEP) [174, 176] consistent à négliger les phénomènes rapides, c'est à dire ayant une durée de vie très courte. Autrement dit, les taux de production et consommation d'une espèce sont en équilibre par rapport aux réactions les plus lentes. La grande disparité d'échelles de temps caractéristiques du schéma cinétique détaillé est diminué ainsi que la raideur du système.

Les schémas obtenus grâce à ces diverses méthodes présentent une complexité variée. On distingue plusieurs types de schémas :

- les schémas détaillés : plusieurs dizaines d'espèces et plusieurs centaines de réactions. Ces sché-

- mas disposent de grandes plages de validité en richesse, pression et température ;
- les schémas réduits : une dizaine d'espèces et plusieurs dizaines de réactions. On peut distinguer deux sous-catégories :
 - les schémas squelettiques : toutes les espèces sont transportées et leur taux de réaction sont calculés à l'aide de loi d'Arrhenius ;
 - les schémas analytiques : certaines espèces sont calculées comme une combinaison linéaire d'autres espèces, déterminées à l'aide de méthodes AEQS ;
 - les schémas globaux ou empiriques : moins d'une dizaine d'espèces et une à quatre réactions. Ces schémas très simples sont ajustés afin de récupérer certaines propriétés de flamme.

Plus le schéma est réduit, plus sa plage de validité est limitée car certaines hypothèses effectuées (suppression d'espèces et réactions) ne couvrent pas l'ensemble des domaines de pression, température et richesse. Ils doivent donc être maniés avec précaution.

L'amélioration des outils menant à ces schémas et des algorithmes de calcul, ainsi que l'augmentation des ressources informatiques permettent aujourd'hui de réaliser des calculs 3D avec des schémas de type squelettique dans des configurations industrielles.

Réduction de type mathématique et chimie tabulée

Une autre grande approche de réduction de la chimie complexe consiste à stocker la chimie d'un schéma détaillé dans une bibliothèque en fonction d'un nombre réduit de paramètres. Seuls ces paramètres sont transportés dans le solveur fluide. La composition du mélange, la température ainsi que les termes sources sont lus dans la bibliothèque aussi appelée table chimique.

Le principe de la tabulation repose sur la méthode ILDM, proposée par Maas et Pope [146] et basée sur l'analyse des différents temps caractéristiques de la chimie. Cette analyse a permis de mettre en évidence une variété attractive de faible dimension (ou ILDM pour *Intrinsic Low-Dimensional Manifold*). Seule la connaissance de cet attracteur est nécessaire pour connaître l'évolution du système.

Deux modèles principaux ont été construits à partir de la méthode ILDM et l'hypothèse de flammelle. Il s'agit du modèle FPI (*Flamelet Prolongation of ILDM*) de Giquel [80] et du modèle FGM (*Flamelet Generated Manifold*) de Van Oijen [171]. Le concept principal de ces modèles repose sur la prolongation de la méthode ILDM avec des calculs de flammes laminaires 1D prémélangées qui utilisent des cinétiques détaillées. Ces modèles font l'hypothèse d'une analogie entre le front de flamme local et une flamme laminaire. Les réponses de flamme sont projetées dans un espace réduit : elles sont tabulées en fonction de quelques paramètres. Par exemple, les paramètres d'entrée de la table peuvent être la fraction de mélange (similaire à la richesse locale du mélange) et la variable de progrès (représentant l'avancement de la réaction).

3.3.3 Variables caractéristiques liées à la flamme

Des variables permettant de caractériser une flamme sont introduits dans cette section. Les indices F et O correspondront respectivement au carburant et à l'oxydant du mélange considéré, st à l'état stœchiométrique et 0 aux conditions d'injection initiales.

Richesse et fraction de mélange

Le rapport stœchiométrique massique s se définit tel que [179] :

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st} = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F}, \quad (3.75)$$

où Y et ν sont respectivement la fraction massique locale et le coefficient molaire stœchiométrique.

La richesse d'une flamme ϕ caractérise la quantité de carburant présente dans le mélange par rapport à la quantité de carburant nécessaire à une combustion stœchiométrique. Ce nombre adimensionnel se calcule comme :

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} = \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right) / \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st} . \quad (3.76)$$

Ainsi, une richesse égale à un mène à une composition stœchiométrique du mélange. Pour une richesse inférieure à l'unité, on est dans un régime dit pauvre. A l'inverse, pour une richesse supérieure à un, on est dans un régime riche.

La fraction de mélange Z est fortement liée à la richesse car elle fournit aussi une indication sur la composition du mélange. Mais à la différence de la richesse, la fraction de mélange est bornée entre un dans le carburant pur et zéro dans l'oxydant pur. Pour une chimie à une étape (une seule réaction), avec l'hypothèse de nombre de Lewis unitaire, elle s'écrit :

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} . \quad (3.77)$$

Avec cette définition, toutes les espèces diffusent à la même vitesse et cette fraction de mélange est un scalaire passif, c'est-à-dire que l'équation de transport de ce scalaire ne contient pas de terme source.

Dans un contexte multi-espèces, c'est-à-dire avec plusieurs espèces transportées et diffusant à des vitesses différentes, la définition du scalaire Z répond à d'autres hypothèses. Cette fraction de mélange peut ne plus être un scalaire passif et il est nécessaire de calculer un terme correctif [164].

Une autre méthode pour définir une richesse ou une fraction de mélange passive dans un contexte multi-espèces est d'utiliser la conservation des atomes. En effet, lors du processus de combustion, les fractions massiques des espèces présentes au sein du mélange évoluent temporellement. Cependant, la masse des éléments atomiques est conservée. On peut alors définir ces variables en se basant sur la conservation des atomes. Cette méthode est particulièrement bien adaptée à la combustion d'un hydrocarbure avec un comburant oxygéné (air ou oxygène pur). Ainsi, on utilise les fractions massiques de carbone (Z_C), d'hydrogène (Z_H) et d'oxygène (Z_O) qui sont à la base d'un hydrocarbure C_mH_n . On définit la fraction massique Z_j de l'atome j :

$$Z_j = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{a_{jk} w_j}{W_k} Y_k , \quad (3.78)$$

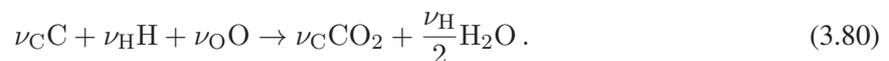
avec a_{jk} le nombre d'atome de l'élément j dans une espèce k , w_j la masse molaire de l'atome j et W_k celle de l'espèce k .

La fraction de mélange définie par Bilger [13] peut alors être obtenue :

$$Z = \frac{Z_C/(mW_C) + Z_H/(nW_H) + 2(Y_{O_2,2} - Z_O)/(\nu_O W_{O_2})}{Z_{C,0}/(mW_C) + Z_{H,0}/(nW_H) + 2Y_{O_2,2}/(\nu_O W_{O_2})} , \quad (3.79)$$

où $Y_{O_2,2}$ correspond à la fraction massique d'oxygène contenue dans le jet d'oxydant et n et m la composition atomique en carbone et hydrogène d'un hydrocarbure C_mH_n . Cette définition présente l'avantage de pouvoir être utilisée pour différents types de modélisation de la chimie dans lesquels la diffusion différentielle est prise en considération. Ce scalaire n'est pas passif et varie au travers du front de flamme.

La richesse du mélange peut aussi être définie grâce aux fractions massiques des atomes. Une réaction à la stœchiométrie avec les réactifs écrits sous forme d'atomes s'écrit :



On peut déduire de cette réaction :

$$\nu_O = \left(2\nu_C + \frac{\nu_H}{2} \right) \times \phi. \quad (3.81)$$

La richesse basée sur la conservation atomique s'écrit donc :

$$\phi = \frac{2 \frac{Z_C}{W_C} + \frac{1}{2} \frac{Z_H}{W_H}}{\frac{Z_O}{W_O}}. \quad (3.82)$$

Variable de progrès

La variable de progrès c est une variable, adimensionnée et normalisée entre zéro et un, caractérisant l'avancement de la réaction. Il est indispensable qu'elle évolue de manière monotone, afin qu'une seule valeur de la variable de progrès corresponde à un unique état thermochimique. Une définition de la variable de progrès basée sur la température n'est donc pas adaptée lorsque des pertes thermiques sont présentes. On lui préférera une définition basée sur les fractions massiques d'espèces présentes dans le mélange tel que :

$$c = \frac{Y_c}{Y_{c,eq}}, \quad (3.83)$$

avec Y_c une somme pondérée de fraction massique et $Y_{c,eq}$ cette même somme mais à l'état d'équilibre chimique. La variable de progrès vaut est nul dans les gaz frais et vaut un dans les gaz brûlés, lorsque l'équilibre chimique est atteint. Il existe plusieurs définitions de Y_c dans la littérature [80, 214, 140, 68]. On choisira dans ces travaux une définition classique, basée sur les produits de combustion CO_2 , CO et H_2O :

$$c = \frac{Y_c}{Y_{c,eq}} = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}}{Y_{CO_2,eq} + Y_{CO,eq} + Y_{H_2O,eq}}. \quad (3.84)$$

Il est aussi possible de définir une variable de progrès grâce à la conservation des atomes [181], qui sera notée c_{atom} dans la suite de ce texte, :

$$c_{atom} = 1 - \frac{Y_F}{Z_C + Z_H}. \quad (3.85)$$

Cette définition n'est valable que pour des carburants hydrocarbonés non oxygénés, évoluant dans un milieu oxygéné non dilué par des espèces hydrogénées ou carbonées. Elle représente plutôt une consommation locale du carburant qu'un avancement de réaction car c_{atom} vaut zéro dans les gaz frais ($Z_C + Z_H = Y_F$) et un dès que le carburant a disparu du mélange ($Y_F = 0$). En effet, la disparition du carburant ($c_{atom} = 1$) intervient avant d'atteindre l'état d'équilibre chimique ($c = 1$). De plus, dans des mélanges riches, du carburant peut rester dans les gaz brûlés et c_{atom} pourrait ne pas atteindre l'unité.

Vitesse de flamme

Une autre caractéristique essentielle de la combustion prémélangée est la vitesse de flamme. La flamme est considérée comme une interface entre les gaz frais et brûlés, définie par exemple en prenant une iso-température. La vitesse de déplacement de cet interface constitue la vitesse de flamme. Cependant, la définition précise de la vitesse de flamme entre les cas laminaire et turbulent ou dans des milieux homogène ou hétérogène peut être ambiguë [179].

Dans cette thèse, la vitesse de flamme ne sera utilisée que dans un contexte mono-dimensionnel, pour des flammes laminaire non étirées se propageant librement (Fig. 3.2). On note cette vitesse s_L^0 .

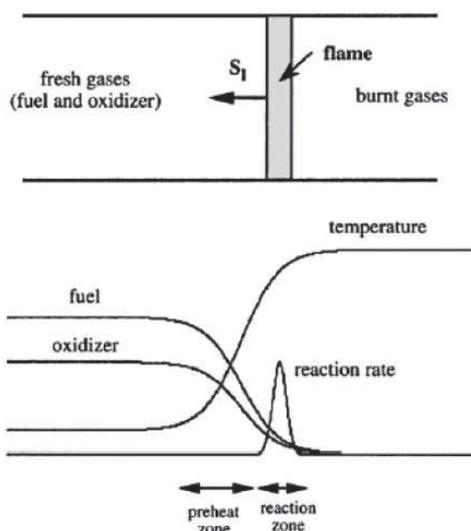


FIGURE 3.2: Schéma de la structure d'une flamme de prémélange laminaire.

Au cours de ces travaux, la notion de vitesse de consommation a été utilisée. Elle représente la vitesse à laquelle les réactifs sont brûlés et est calculée comme l'intégrale du terme source $\dot{\omega}_F$ au travers de la flamme :

$$s_L^0 = -\frac{1}{\rho_1(Y_{F,1} - Y_{F,\infty})} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx, \quad (3.86)$$

où x est la direction du domaine, ρ_1 et $Y_{F,1}$ étant respectivement la masse volumique et la fraction massique de carburant dans les gaz frais et $Y_{F,\infty}$ la fraction massique de carburant dans les gaz brûlés.

3.4 Extension des équations au formalisme LES

3.4.1 Introduction à la turbulence

La majorité des écoulements rencontrés dans les procédés industriels (turbines à gaz, moteurs à combustion interne, fours...) ou même dans la nature est qualifié d'instationnaire et fortement turbulent, c'est-à-dire présentant un caractère très tourbillonnaire. Chassaing [33] décrit la turbulence comme « un mode naturel de mouvement de fluides visqueux où des mécanismes internes d'échanges énergétiques assurent, au sein même de l'écoulement, la création et le maintien de toute une hiérarchie de mouvements chaotiques répartis continûment sur une large gamme d'échelles macroscopiques ». Un écoulement turbulent se traduit par une apparence très désordonnée, un comportement difficile à prévoir et une large gamme d'échelles spatiales et temporelles.

A l'inverse, on appelle laminaire le caractère d'un écoulement régulier, où toutes les trajectoires du fluide sont parallèles.

Pour déterminer si un écoulement est de type turbulent ou laminaire, on utilise le nombre de Reynolds. C'est un nombre sans dimension et calculé comme le rapport des forces inertielles, destabilisatrices de l'écoulement et génératrices de nouvelles échelles de la turbulence, sur les forces visqueuses, permettant la dissipation de la quantité de mouvement et la laminarisation de l'écoulement :

$$Re = \frac{uL}{\nu}, \quad (3.87)$$

où u et L représentent respectivement une vitesse et une taille caractéristique de l'écoulement ν la viscosité cinématique du fluide.

Un nombre de Reynolds petit caractérise un écoulement laminaire et un nombre de Reynolds élevé un écoulement turbulent. La transition d'un régime d'écoulement à l'autre se fait aux alentours d'un nombre appelé nombre de Reynolds critique, dépendant de la géométrie du domaine dans lequel le fluide évolue (par exemple 3000 pour une conduite cylindrique, 5×10^5 pour un écoulement sur une plaque plane).

La multitude de tourbillons créés par la turbulence peuvent se définir par leur taille mais aussi par leur niveau énergétique. En effet, un transfert d'énergie s'opère des plus grandes structures de l'écoulement, les plus énergétiques, vers les plus petites. Ce principe de cascade énergétique, introduit par Richardson [191] et Kolmogorov [127], peut être illustré par le diagramme schématisé et le spectre d'énergie cinétique turbulente (Fig. 3.3).

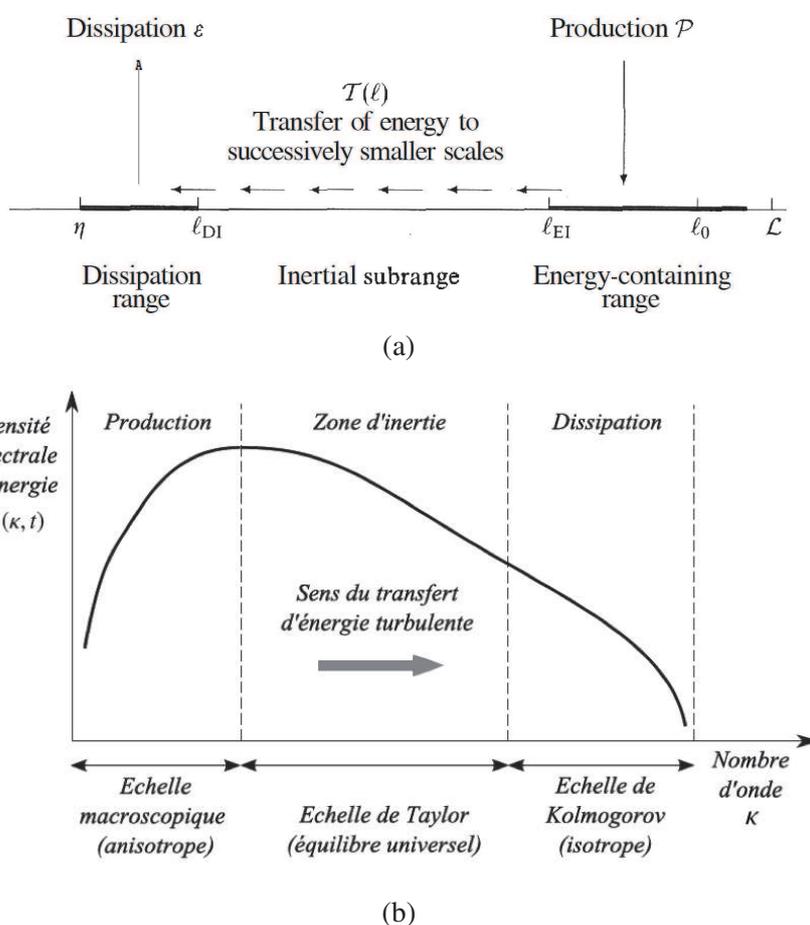


FIGURE 3.3: (a) : Diagramme schématisé de la cascade énergétique à nombre de Reynolds élevé, tiré de [184]. (b) : Spectre d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ en fonction du nombre d'onde k (proportionnel à l'inverse de la longueur des tourbillons), tiré de [155].

Trois différentes zones du spectre d'énergie cinétique turbulente peuvent être identifiées [184] :

- **Zone intégrale** : elle contient les structures les plus grosses et énergétiques, de faible fréquence, associées à l'échelle intégrale l_t définie comme l'échelle macroscopique de l'écoulement liée aux grandes structures anisotropes. L'énergie cinétique turbulente caractérisant cette région est

définie comme

$$\text{TKE} = \frac{1}{2} \mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}', \quad (3.88)$$

où u' est la vitesse caractéristique des fluctuations (variation de la vitesse u autour de sa moyenne \bar{u}).

Les longueurs et vitesses des structures de la zone intégrale sont comparables aux quantités utilisées pour définir le nombre de Reynolds de l'écoulement et ne sont pas affectées par les effets visqueux. Un nombre de Reynolds caractéristique de l'échelle intégrale peut être défini, appelé nombre de Reynolds turbulent, selon :

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}. \quad (3.89)$$

- **Zone inertielle** : les grands tourbillons deviennent instables et se cassent en de plus petits via le processus de cascade. L'énergie est transférée des grandes structures aux plus petites, sans dissipation, en suivant une loi en $k^{-5/3}$. L'échelle de Taylor λ désigne l'échelle la plus dissipative.
- **Zone de dissipation visqueuse** : elle est caractérisée par les plus hautes fréquences de l'écoulement. Elle contient les plus petites structures turbulentes, caractérisées par l'échelle de Kolmogorov dont la longueur et la vitesse sont définies selon [211],

$$\eta_K = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad \text{et} \quad u_K = (\nu \epsilon)^{1/4}, \quad (3.90)$$

avec ϵ le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente qui convertit cette même énergie en chaleur du fait de la viscosité cinématique ν du mélange.

Cette échelle est purement dissipative. Un nombre de Reynolds caractéristique de l'échelle de Kolmogorov apparaît :

$$Re_K = \frac{u'_K \eta_K}{\nu} \approx 1. \quad (3.91)$$

Le rapport entre échelle intégrale l_t et échelle de Kolmogorov η_K conduit à :

$$\frac{l_t}{\eta_K} = \mathcal{O} \left(Re_t^{3/4} \right). \quad (3.92)$$

Ce rapport montre la très grande étendue des échelles de la turbulence, qui augmente avec le nombre de Reynolds turbulent Re_t (augmentation de la taille du domaine ou des fluctuations de vitesse par exemple).

3.4.2 Simulation d'écoulements turbulents : approches DNS / LES / RANS

L'ensemble des équations bilans décrites jusqu'à maintenant permet la résolution instantanée de l'aérothermochimie sur toutes les échelles spatiales et temporelles de l'écoulement. Cette approche est appelée **DNS** pour *Direct Numerical Simulation*. Cependant, l'étendue des échelles peut devenir très grande et ce type d'approche devient extrêmement coûteuse. Avec les ressources informatiques actuelles, une telle approche demeure encore hors d'atteinte pour des configurations industrielles. Elle est limitée à des codes de recherche et sur des géométries simples et de petite taille.

Ces dernières décennies, plusieurs approches numériques ont été développées, permettant une résolution plus ou moins précise des équations de Navier-Stokes (Fig. 3.4 (a)). La plus ancienne et la moins coûteuse permet un suivi des valeurs moyennes de l'écoulement : c'est la méthode **RANS** pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes*. Cette approche a été utilisée dans de nombreuses études académiques et industrielles. Néanmoins, tous les effets dus aux fluctuations de l'écoulement doivent être modélisés, ce qui

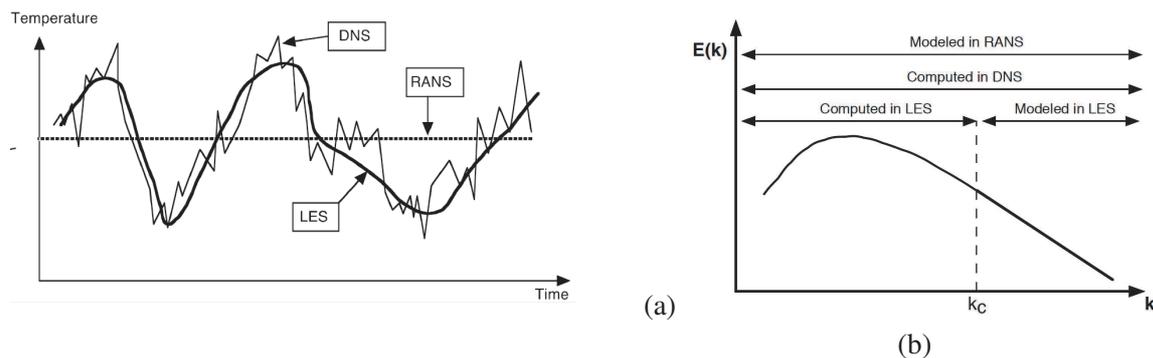


FIGURE 3.4: Comparaison des méthodes DNS, LES et RANS : résolution temporelle d'une variable comme la température (a) et résolution du spectre d'énergie turbulente (b)

limite la précision effective. En outre, l'accès est restreint aux valeurs moyennes. L'approche **LES** pour *Large-Eddy Simulation* consiste en la résolution instationnaire des grandes échelles de l'écoulement et la modélisation des plus petites. Elle nécessite encore des modèles spécifiques mais ces derniers peuvent être basés sur le reste de l'écoulement qui est explicitement calculé. L'écriture de ces modèles suppose que l'échelle de coupure entre échelles résolues et modélisées se situe dans la gamme des échelles inertielles (Fig. 3.4 (b)). Cette approche est justifiée par l'idée que les plus petites structures de l'écoulement présentent des caractéristiques plus universelles (isotropie, temps de vie court...) comparé aux grandes structures qui sont directement impactées par la géométrie et les conditions aux limites. Des critères existent quant à la bonne résolution et la validité de l'approche LES [184, 217]. Cet aspect, sujet primordial de la LES, sera abordé dans la section 4.4.

3.4.3 Etablissement des équations filtrées de la LES

La séparation entre les échelles résolues et modélisées s'obtient par une opération de filtrage des équations résolues en DNS. Ce filtrage est un filtre passe-bas pour les échelles de la turbulence. Il s'obtient par un produit de convolution dans l'espace physique. Un scalaire $\phi(\mathbf{x}, t)$ devient, une fois filtré :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\mathbf{y}, t) \mathcal{G}_{\Delta}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d\mathbf{y}, \quad (3.93)$$

où $\bar{\phi}$ est la quantité filtrée et \mathcal{G}_{Δ} est le filtre associé à l'échelle Δ . Ce dernier doit respecter les conditions de normalisation et commutativité (temporelle et spatiale) [179] :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{G}_{\Delta}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1, \quad (3.94)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} = \overline{\frac{\partial \phi}{\partial t}} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_i} = \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_i}}. \quad (3.95)$$

On peut décomposer la variable ϕ en une partie évoluant aux échelles supérieures à Δ , notée $\bar{\phi}$, et une partie évoluant aux échelles inférieures à Δ , notée ϕ' :

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t). \quad (3.96)$$

Lorsque la masse volumique ρ est variable, on introduit généralement la notion de filtre de Favre qui correspond à une pondération par la masse volumique :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}}. \quad (3.97)$$

En appliquant ce filtrage au système (3.22)-(3.20)-(3.21)-(3.24), on obtient les équations bilans instantanées filtrées :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.98)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j)] - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i}, \quad (3.99)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k)] - \frac{\partial}{\partial x_i} (-\bar{\rho} \widetilde{V}_{k,i} \widetilde{Y}_k) + \bar{\omega}_k, \quad (3.100)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{h}_s}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{h}_s - \widetilde{u}_i \widetilde{h}_s)] + \frac{D\bar{P}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} (-\bar{\rho} \widetilde{V}_h \widetilde{h}_s) + \bar{\omega}_T. \quad (3.101)$$

Des termes non fermés apparaissent dans ces équations :

- **Tenseur des contraintes de sous-maille** $\tau'_{ij} = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j)$: il nécessite l'utilisation d'un modèle de turbulence pour reproduire les transferts d'énergie entre les échelles résolues et non résolues. Dans les travaux de cette thèse, l'approche classique de Boussinesq [20] est utilisée : les flux turbulents sont modélisés via une expression similaire à la définition laminaire (3.32) et l'utilisation d'une viscosité turbulente $\mu_t = \bar{\rho} \nu_t$:

$$\tau'_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_t \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.102)$$

Différents modèles basés sur cette approche sont discutés en 3.4.4.

- **Flux de sous-maille d'espèces** $\mathcal{F}'_{k,i} = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k)$ **et d'enthalpie** $\mathcal{Q}'_i = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{h}_s - \widetilde{u}_i \widetilde{h}_s)$: ils sont modélisés de manière analogues au tenseur des contraintes de sous-maille [157]. Pour le flux d'enthalpie, on utilise un nombre de Prandtl turbulent Pr_t :

$$\mathcal{Q}'_i = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \widetilde{h}_s}{\partial x_i}. \quad (3.103)$$

Pour le flux d'espèces, on utilise un nombre de Schmidt turbulent Sc_t :

$$\mathcal{F}'_{k,i} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i}. \quad (3.104)$$

Ces nombres de Schmidt et Prandtl turbulents peuvent être fixés constants dans le domaine ou variables en espace et en temps (formulation dynamique).

- **Flux diffusifs laminaires filtrés d'espèces et d'enthalpie** : il peuvent être négligés car faibles devant les flux turbulents, pour de haut niveaux de turbulence. Dans les travaux de cette thèse, ces flux sont modélisés en supposant une distribution de sous-maille sous forme de Dirac :

$$\overline{\rho V_{k,i} Y_k} = -\bar{\rho} D_k(\widetilde{Y}_k, \widetilde{T}) \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad \text{et} \quad \overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} = \lambda(\widetilde{Y}_k, \widetilde{T}) \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i}. \quad (3.105)$$

- **Taux de réaction chimique filtré** $\bar{\omega}_k$: la modélisation de ce taux de réaction est un point central de la modélisation de la combustion turbulente. Il est discuté dans la section 3.4.5.

3.4.4 Modélisation de sous-maille pour la turbulence

Bien que différentes approches existent (similarité d'échelle [10] par exemple), seule celle de Boussinesq [20] a été utilisée au cours de ces travaux. C'est une approche phénoménologique postulant que les

effets des plus petites échelles non résolues sont similaires à l'ajout d'une viscosité additionnelle. Tout l'enjeu réside dans le calcul de cette viscosité turbulente. Différents modèles ont été utilisés au cours de cette thèse et sont présentés ici.

Modèle de Smagorinsky

Le modèle classique de Smagorinsky [205] est basé sur l'hypothèse d'équilibre entre la production et la dissipation d'énergie cinétique au niveau de l'échelle de filtrage. La turbulence est ici considérée uniquement comme un phénomène dissipatif.

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 |\tilde{S}| = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad (3.106)$$

avec C_S la constante de Smagorinsky, Δ la taille de filtre et \tilde{S} le tenseur des déformations filtré :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.107)$$

Le choix de la constante C_S est dépendant de la configuration d'étude ; une plage de variation [0.1 – 0.2] est généralement rencontrée. Ce modèle est connu pour son comportement parfois trop dissipatif, sa difficulté dans la prédiction correcte de la transition à la turbulence et surtout son traitement incorrect des régions en proche paroi.

Modèle de Smagorinsky dynamique

Germano [77] et Lilly [135] proposent une amélioration du modèle de Smagorinsky. Dans cette approche, C_S est déterminée via une procédure dynamique et locale : le comportement de sous-maille est déduit des plus petites échelles résolues, ce qui requiert un filtrage, noté $\widehat{(\cdot)}$, du champ de vitesse résolu à une taille de filtre Δ' supérieure à Δ . Le tenseur de sous-maille $\tau'_{ij} = \bar{\rho} (\widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i} \widehat{u_j})$ et le tenseur de sous-maille basé sur la vitesse filtrée deux fois $\tau''_{ij} = \bar{\rho} (\widehat{\widehat{u_i u_j}} - \widehat{\widehat{u_i}} \widehat{\widehat{u_j}})$ peuvent également s'écrire à partir du modèle de Smagorinsky de la manière suivante :

$$\tau'_{ij} = 2\bar{\rho} (C_S \Delta)^2 |\tilde{S}| \cdot \tilde{S}_{ij}, \quad (3.108)$$

$$\tau''_{ij} = 2\widehat{\rho} (C_S \Delta')^2 |\widehat{S}| \cdot \widehat{S}_{ij}. \quad (3.109)$$

L'identité de Germano permet de relier les tenseurs aux deux niveaux de filtrage par un terme qui dépend du champ résolu et qui peut être calculé explicitement :

$$L_{ij} = \tau'_{ij} - \tau''_{ij} = \rho (\widehat{\widehat{u_i u_j}} - \widehat{\widehat{u_i}} \widehat{\widehat{u_j}}). \quad (3.110)$$

En combinant les équations (3.108), (3.109) et (3.110), la constante de Smagorinsky peut être calculée à partir des champs de vitesse filtrés à deux échelles. Le modèle de Smagorinsky dynamique convient pour une large gamme d'applications, mais il est plus coûteux et complexe à mettre en œuvre, puisqu'il requiert notamment l'utilisation d'un opérateur de filtrage explicite. De plus, l'évaluation de la constante de Smagorinsky peut mener à des valeurs localement négatives. Une telle constante négative induit une viscosité turbulente négative, traduisant un phénomène de *backscatter* [25], c'est-à-dire un transfert d'énergie des petites structures aux grandes échelles. Cela peut poser des problèmes numériques en terme de stabilité. Un traitement spécifique doit être appliqué pour éviter ce phénomène.

Modèle WALE

Le modèle WALE (pour *Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity*) [167] se propose d'obtenir un profil de viscosité turbulente réaliste en proche paroi et de prédire une transition à la turbulence avec précision. La viscosité turbulente est calculée suivant la relation suivante :

$$\nu_t = (C_w^2 \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (3.111)$$

où la constante C_w vaut 0.5 et le tenseur s_{ij}^d s'écrit

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{h}_{ij} + \tilde{h}_{ji}) - \frac{1}{3} \tilde{h}_{kk} \delta_{ij} \quad \text{avec} \quad \tilde{h}_{ij} = \tilde{g}_{ik} \tilde{g}_{kj} \quad \text{et} \quad \tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}. \quad (3.112)$$

Par rapport à la formulation classique de Smagorinsky, ce modèle présente les avantages suivants :

- l'opérateur spatial prend en compte les taux d'étirement et de rotation. Ainsi, toutes les structures tourbillonnaires participant à la dissipation de l'énergie cinétique sont détectées par le modèle,
- la viscosité turbulente décroît naturellement vers zéro en proche paroi,
- le modèle impose $\nu_t = 0$ dans les écoulements cisailés, ainsi la transition vers la turbulence peut être reproduite en laissant croître les modes linéairement instables.

Approche ILES

Il est important de noter, qu'en principe, il est interdit d'utiliser, avec l'approche LES, une viscosité artificielle du même ordre de grandeur ou supérieure à la viscosité turbulente, ainsi que des schémas numériques introduisant une trop grande diffusion numérique. Néanmoins, le concept ILES se base sur l'hypothèse selon laquelle les modèles de sous-maille ont uniquement une action dissipative qui peut être reproduite par les schémas numériques utilisés pour la discrétisation (approche ILES), ou par les schémas numériques avec un terme de dissipation artificielle supplémentaire (approche MILES).

En effet, des schémas numériques convectifs et en particulier les schémas décentrés de type *upwind* ou d'ordre peu élevé apportent une viscosité numérique non négligeable dans le calcul LES. De même, si une viscosité artificielle telle que celle de Jameson [106] est employée, elle introduit des termes de dissipation du second et quatrième ordre. Cette contribution du quatrième ordre opère comme un modèle de sous-maille [194] et amortit les hautes fréquences, caractéristiques des petites échelles.

Pour la modélisation de la turbulence, cette approche consiste à ne pas utiliser de modèle spécifique pour la turbulence. C'est pourquoi elle est aussi appelée "NO-MODEL". Bien que cette méthode soit particulièrement attractive en terme de simplicité et temps de calcul, il est délicat de l'utiliser car il n'y a aucune réelle maîtrise sur la dissipation introduite.

3.4.5 Modèles de combustion turbulente

Comme expliqué en 3.4.3, l'expression du terme source filtré $\bar{\omega}_k$ est une problématique clé de la simulation LES, car traitant de l'interaction entre la turbulence et la flamme. Différentes techniques servant à modéliser la combustion turbulente peuvent être classées en trois catégories [216] :

- **Approche algébrique** : le taux de réaction est contrôlé par le mélange turbulent, décrit en terme de dissipation scalaire [21]. Les petites échelles du taux de dissipation des espèces contrôlant le mélange des réactifs, elles jouent un rôle dominant pour la modélisation de la combustion. Cette approche n'est possible que lorsque le temps caractéristique de la turbulence est très élevé par rapport au temps caractéristique de la chimie ;

- **Approche statistique** : les champs scalaires sont collectés et analysés en chaque point puis décrits à l'aide de fonction densité de probabilité (PDF), comme le modèle PCM-FPI [218, 57] ;
- **Approche géométrique** : le front de flamme est considéré comme une surface géométrique mobile dans l'espace physique. De nombreux modèles appartiennent à cette approche comme les modèles de type *G-equation* [177], à densité de surface de flamme [16] ou encore l'approche de flamme épaissie.

C'est ce dernier modèle, le modèle de flamme épaissie, qui a été utilisé au cours de cette thèse. Il est détaillé dans la section suivante.

3.5 Le modèle d'épaississement de flamme : TFLES

3.5.1 Principe général

Introduit dans les années 70 par Butler [24] et O'Rourke [172], l'idée générale du modèle TFLES est d'obtenir un épaississement artificiel de la flamme. L'objectif est de résoudre suffisamment la structure de flamme avec le maillage de calcul (i.e. avoir assez de points dans la flamme) tout en conservant certaines propriétés essentielles. Initialement dérivé pour les flammes prémélangées, le modèle TFLES a été étendu depuis aux flammes de diffusion.

D'après Williams [229] et Kuo [130], on peut écrire la vitesse s_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 en fonction du taux de réaction $\dot{\omega}$ et du coefficient de diffusion thermique D_{th} :

$$s_L^0 \propto \sqrt{D_{th} \dot{\omega}} \quad \text{et} \quad \delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{s_L^0} \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{\dot{\omega}}}. \quad (3.113)$$

Colin [42] propose d'épaissir la flamme d'un facteur \mathcal{F} en effectuant la transformation suivante :

$$D_{th}^{\mathcal{F}} = D_{th} \cdot \mathcal{F} \quad \text{et} \quad \dot{\omega}^{\mathcal{F}} = \frac{\dot{\omega}}{\mathcal{F}}, \quad (3.114)$$

ainsi, la flamme se retrouve épaissie du facteur d'épaississement \mathcal{F} alors que la vitesse laminaire de flamme reste inchangée :

$$s_L^0 \propto \sqrt{D_{th} \dot{\omega}} \rightarrow s_L^{\mathcal{F}} \propto \sqrt{D_{th} \dot{\omega}}, \quad (3.115)$$

$$\delta_L^0 \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{\dot{\omega}}} \rightarrow \delta_L^{\mathcal{F}} \propto \mathcal{F} \sqrt{\frac{D_{th}}{\dot{\omega}}}. \quad (3.116)$$

La Fig. 3.5 compare une flamme laminaire 1D parfaitement résolue et une flamme épaissie. On constate que la pente du profil de température est plus douce pour la flamme épaissie et le profil de terme source d'énergie est plus aplati. Cependant, l'aire sous les courbes rouges doit être égale pour assurer une vitesse de flamme identique. La flamme épaissie peut être résolue sur un maillage plus grossier que la flamme DNS, tout en conservant la même vitesse de flamme.

Dans un contexte TFLES, l'équation de transport d'un scalaire réactif ϕ quelconque devient alors :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\phi} = \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathcal{F} D \nabla \tilde{\phi}) + \frac{\dot{\omega}_\phi}{\mathcal{F}}. \quad (3.117)$$

On peut retrouver cette équation en partant de l'équation de transport classique et en effectuant un changement de coordonnées correspondant à la dilatation de l'espace et du temps suivante [198] :

$$\partial t \rightarrow \mathcal{F} \partial t, \quad (3.118)$$

$$\partial x \rightarrow \mathcal{F} \partial x. \quad (3.119)$$

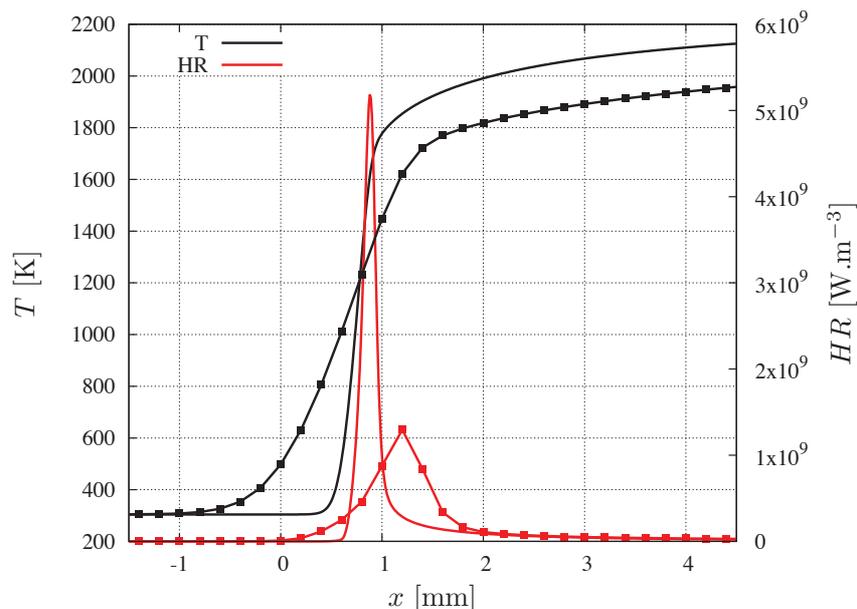


FIGURE 3.5: Comparaison de la température (T) et du taux de dégagement de chaleur (HR) entre une flamme laminaire 1D non-épaissie (en trait continu) et épaissie avec un facteur $\mathcal{F} = 4$ (ligne avec les points).

3.5.2 Conditions sur l'épaississement \mathcal{F}

L'objectif principal du modèle TFLES est de décrire correctement les termes sources d'espèces. Le facteur \mathcal{F} doit être choisi de telle sorte que suffisamment de points soient présents dans l'épaisseur de flamme. Il dépend de la taille de maille et de l'épaisseur locale du front de flamme (ici approchée par l'épaisseur de la flammelette 1D δ_L^0 aux conditions thermo-chimiques des gaz frais prises localement $\phi(x, t)$). Pour un nombre de points n désiré dans l'épaisseur de flamme, il vient que :

$$n = \frac{\delta_L^0}{\Delta_{DNS}} = \frac{\mathcal{F} \delta_L^0}{\Delta_{LES}} \quad \text{donc} \quad \mathcal{F} = \frac{\Delta_{LES}}{\Delta_{DNS}} = \frac{n \Delta_{LES}}{\delta_L^0}, \quad (3.120)$$

où Δ_{DNS} est la taille de maille d'une grille DNS sur laquelle les profils non-épaissis seraient bien résolus et Δ_{LES} celle du maillage LES avec lequel on souhaite utiliser le modèle TFLES.

On en déduit le facteur d'épaississement \mathcal{F} :

$$\mathcal{F} = \frac{n \Delta_{LES}}{\delta_L^0(\phi(x, t))}. \quad (3.121)$$

3.5.3 Interaction flamme-turbulence

La modification de l'épaisseur de flamme modifie l'interaction entre la flamme et la turbulence. Il a été montré par Poinot [180] et Meneveau [154] que la capacité d'un tourbillon à plisser la flamme dépend de l'épaisseur de flamme δ_0 , qui croît avec \mathcal{F} . L'effet de la turbulence sur le plissement a été étudié en détail à partir de calcul DNS, par Angelberger *et al.* [7] et Colin *et al.* [42], et est illustré par la Fig. 3.6. Les nombres adimensionnels caractérisant l'interaction flamme-turbulence, tel que le nombre de Dämmhøler Da défini comme le rapport entre le temps de l'échelle intégrale et le temps chimique, se

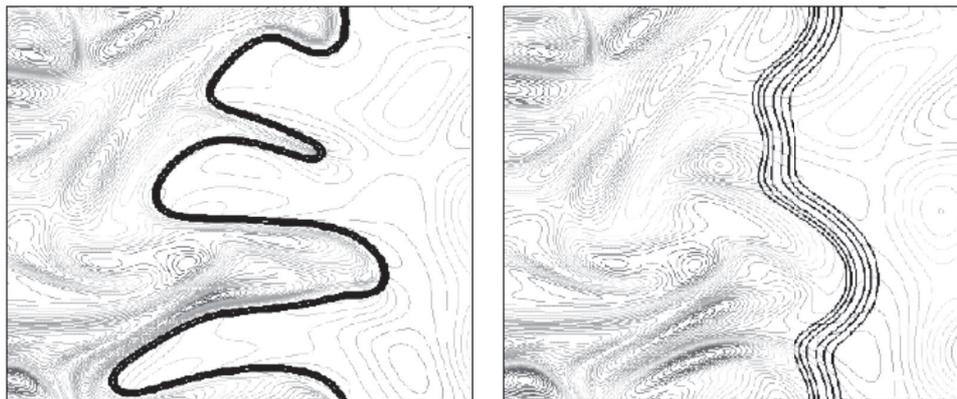


FIGURE 3.6: DNS de l'interaction flamme-turbulence : flamme non épaissie (gauche) et flamme épaissie d'un facteur $\mathcal{F} = 5$ (droite). La flamme artificiellement épaissie est clairement moins plissée par la turbulence du fait de la modification de l'interaction flamme-turbulence due au facteur d'épaississement. Figures tirées de [179].

retrouvent ainsi modifiés :

$$Da = \frac{t_t}{t_c} = \frac{l_t s_L^0}{u' \delta_L^0} \quad \text{donc} \quad Da^{\mathcal{F}} = \frac{Da}{\mathcal{F}}, \quad (3.122)$$

avec t_t le temps caractéristique de la turbulence, t_c celui de la chimie, l_t l'échelle intégrale et u' les fluctuations de sous-maille.

Pour prendre en compte cet effet, une fonction d'efficacité \mathcal{E} a été introduite afin d'augmenter la vitesse de flamme turbulente, compensant la perte de surface de flamme. Elle correspond au facteur de plissement de sous-maille, défini selon [42, 32] :

$$\mathcal{E} = \frac{s_T}{s_L^0} = \frac{A_T}{A_L}, \quad (3.123)$$

où s_0^T désigne la vitesse de flamme turbulente, A^L la surface de flamme laminaire et A^T la surface de flamme turbulente.

La fonction d'efficacité \mathcal{E} est introduite dans l'équation de transport d'un scalaire réactif quelconque ϕ :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\phi} = \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathcal{E} \mathcal{F} D \nabla \tilde{\phi}) + \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \dot{\omega}_\phi. \quad (3.124)$$

Différentes expressions de cette fonction d'efficacité sont proposées dans la littérature. Colin [42] introduit une fonction basée sur le rapport entre le facteur de plissement Ξ (i.e. la surface de flamme divisée par sa projection dans la direction de propagation) de la flamme originelle d'épaisseur δ_L^0 sur l'épaisseur de flamme épaissie $\delta_0^{\mathcal{F}}$:

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_0^{\mathcal{F}})} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}, \frac{u'}{s_L^0} \right) \frac{u'}{s_L^0}}{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta}{\delta_0^{\mathcal{F}}}, \frac{u'}{s_L^0} \right) \frac{u'}{s_L^0}}, \quad (3.125)$$

où α et Γ sont respectivement un paramètre et une fonction donnés par le modèle, et Δ est la taille du filtre LES.

Le modèle en loi de puissance proposé par Charlette [32] décrit la surface de flamme non-résolue en fonction d'échelles de coupure interne et externe représentant l'étendue des échelles de longueurs nécessitant une résolution de sous-maille. Dans le présent travail, nous utiliserons la correction de la fonction d'efficacité proposée par Wang *et al.* [221] :

$$\mathcal{E} = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta}{\delta_L^0} - 1, \Gamma \frac{u'}{s_L^0} \right] \right)^\gamma, \quad (3.126)$$

où γ est une constante du modèle. En pratique, la fluctuation de vitesse u' est approchée par u_{sgs} qui est la vitesse de sous-maille, estimée à partir du modèle de Smagorinsky simplifié :

$$u_{sgs} = \Delta \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}. \quad (3.127)$$

La mise en œuvre du modèle TFLES peut se résumer de la manière suivante :

Diffusivité :	D_{th}	→	$\mathcal{F}D_{th}$	→	$\mathcal{E}\mathcal{F}D_{th}$
Taux de réaction :	$\dot{\omega}$	→	$\dot{\omega}/\mathcal{F}$	→	$\mathcal{E}\dot{\omega}/\mathcal{F}$
Vitesse de flamme :	s_L	→	s_L	→	$s_T = \mathcal{E}s_L$
Épaisseur de flamme :	δ_L	→	$\mathcal{F}\delta_L$	→	$\delta_T = \mathcal{F}\delta_L$
			épaississement		plissement

3.5.4 Expression dynamique du modèle TFLES

Le modèle TFLES, avec la formulation précédente, n'est pas adapté à la description pertinente d'un mélange car il affecte fortement la diffusion. Dans un contexte de flamme parfaitement prémélangée, le modèle TFLES peut être utilisé avec un facteur d'épaississement \mathcal{F} constant et différent de un. Au contraire, pour d'autres régimes de fonctionnement ou en présence d'inhomogénéités de mélange, l'augmentation de la diffusion non désirée dans tout le domaine implique une modification du mélange. C'est pourquoi il est nécessaire d'utiliser un facteur d'épaississement dynamique, introduit par Légier *et al.* [132]. L'idée est d'appliquer le modèle uniquement dans la zone de flamme : le facteur \mathcal{F} doit être égal à l'unité en dehors de la zone de réaction et à sa valeur maximum dans la flamme, pour éviter que le modèle de mélange turbulent ne s'ajoute au modèle TFLES. Nous introduisons ici un capteur de flamme, scalaire local qui vaut zéro dans les zones non réactives et 1 dans la flamme. L'équation de transport filtrée est réécrite afin de mettre en évidence le capteur de flamme \mathcal{S} :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{E}\mathcal{F}J_i^{lam} + (1 - \mathcal{S})J_i^{sgs}) + \frac{\mathcal{E}\dot{\omega}_\phi}{\mathcal{F}}. \quad (3.128)$$

où J_i^{lam} est le flux diffusif laminaire et J_i^{sgs} le flux diffusif de sous-maille.

La relation entre le facteur d'épaississement \mathcal{F} et la fonction d'efficacité \mathcal{E} avec le capteur de flamme \mathcal{S} s'écrit :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{\max} - 1)\mathcal{S}, \quad (3.129)$$

$$\mathcal{E} = 1 + (\mathcal{E}_{\max} - 1)\mathcal{S}, \quad (3.130)$$

où \mathcal{F}_{\max} et \mathcal{E}_{\max} sont les valeurs issues des expressions 3.121 et 3.126 respectivement.

On peut trouver différentes formulations du capteur de flamme dans la littérature, notamment en fonction de l'approche de chimie utilisée. Kuenne [129] propose d'écrire un capteur de flamme basé sur la variable de progrès c selon :

$$S = 16[c(1 - c)]^2. \quad (3.131)$$

Cette formulation est intéressante car elle est indépendante de la cinétique chimique et ne présente pas de constantes dont la valeur est à déterminer par l'utilisateur. Cependant, la définition de la variable de progrès peut poser problème avec une approche multi-espèces de la chimie. Si on considère une variable de progrès définie par l'Eq. 3.83, le dénominateur $Y_{c,eq}$ dépend de la composition et de la température locale. En cas d'inhomogénéités de mélange, $Y_{c,eq}$ doit être calculé en chaque nœud et à chaque pas de temps, ce qui peut poser un problème de coût de calcul. Ce capteur est plus adapté dans une approche de chimie tabulée, car la variable de progrès est transportée et directement accessible par le solveur.

Légier [132] propose de calculer le capteur de flamme de la façon suivante :

$$S = \tanh\left(\beta \frac{\Omega}{\Omega_{\max}}\right) \quad \text{avec} \quad \Omega = Y_F^{\nu_F} Y_O^{\nu_O} \exp\left(-\Gamma \frac{T_a}{T}\right), \quad (3.132)$$

avec β , ν_F , ν_O , Γ et T_a des paramètres ajustables, T la température locale, Y_F , Y_O les fractions massiques de fuel et d'oxydant et Ω_{\max} la valeur maximale de Ω déterminée à l'aide de flamme laminaire 1D.

Cette définition est couramment utilisée dans une approche de chimie simple (1 ou 2 étapes). Elle est adaptée à des fronts de flamme raides et peu larges. Dans le cas d'une approche de chimie complexe, la détermination des paramètres T_a , ν_F et ν_O peut être délicate. En effet, toutes les réactions d'un schéma cinétique complexe ne s'activent pas dans la même zone de la flamme et le capteur de flamme ne couvrirait pas l'ensemble de la zone réactive. De plus, le paramètre Ω_{\max} doit être déterminé pour une richesse donnée, alors que des inhomogénéités de richesse peuvent apparaître dans certaines configurations 3D.

La détermination d'un capteur de flamme adapté à une approche de chimie complexe est un problème récent et reste ouvert [72, 19]. Cette problématique est l'objet de la section 6.1.2.2.

3.6 Résolution numérique dans YALES2

3.6.1 Difficultés de résolution des équations bilans

La nature même de la mécanique des fluides, et notamment de la combustion turbulente, en fait un problème multi-échelles, temporelles et spatiales. Les équations bilans de l'aérothermochimie mettent en relation les phénomènes physiques de convection, diffusion et réaction. Chacun de ces phénomènes dispose de temps caractéristique propre. On peut mettre en relation les temps caractéristiques de convection et diffusion de chaque équation de conservation grâce aux nombres adimensionnels suivant :

- Nombre de Reynolds $Re = UL/\nu$ pour l'équation de quantité de mouvement,
- Nombre de Péclet massique $Pe_M = UL/D = Re Sc$ pour l'équation de transport des espèces,
- Nombre de Péclet thermique $Pe_{th} = ULc_p\rho/\lambda = Re Pr$ pour l'équation de transport de l'énergie.

Le nombre de Reynolds a une grande influence. Plus il est grand, plus les temps caractéristiques convectifs et diffusifs sont différents. C'est notamment le cas dans les études sur la combustion turbulente. Cela rend coûteux la résolution numérique des équations bilan car celle-ci doit se faire en utilisant le pas de temps le plus faible dans un objectif de précision et de stabilité.

Concernant les échelles spatiales, la simulation numérique doit assurer que :

- le calcul est réalisé sur le domaine le plus grand possible afin de résoudre les échelles les plus grandes,
- le maillage est assez fin pour résoudre les plus petites échelles turbulentes, pour un calcul DNS, ou résoudre jusqu'à l'échelle de coupure pour un calcul LES,
- le maillage est suffisamment fin pour résoudre la structure interne de la flamme.

Ces contraintes impliquent donc une grande variété d'échelles spatiales, engendrant un besoin important en nombre d'éléments composant le maillage. Si l'on considère un domaine cubique de côté L , discrétisé par N points dans chaque direction de l'espace, la taille des cellules est alors égale à L/N dans chaque direction. Pour espérer raisonnablement résoudre toutes les échelles de la turbulence sur ce maillage, dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, le domaine doit être plus grand que l'échelle intégrale l_t , et la taille de la plus petite cellule Δx doit être de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov η_K , ce qui impose la relation :

$$N \approx \frac{l_t}{\eta_K}. \quad (3.133)$$

Le nombre de cellules dans le domaine doit satisfaire :

$$N^3 \approx Re_t^{9/4}. \quad (3.134)$$

Pour un nombre de Reynolds de 10000, le nombre d'éléments atteint 10^9 . Des nombres d'éléments aussi importants ont pour conséquence d'augmenter tellement les coûts de calcul qu'ils peuvent devenir rédhibitoires.

La chimie multi-espèces présente également la particularité d'introduire des systèmes d'équations différentielles dits raides. La sensibilité aux paramètres rend sa résolution difficile. Outre cette problématique inhérente à la physique du phénomène, le calcul des termes sources de la chimie $\dot{\omega}_k$ nécessite de nombreuses opérations mathématiques, notamment l'évaluation d'exponentielles, très coûteuses en temps de calcul (ou temps CPU). Plus le schéma cinétique associé à la chimie sera complet, plus le calcul de ces termes sources sera coûteux.

En plus de la prise en compte de la turbulence et de la combustion, certaines configurations peuvent nécessiter la résolution d'autres phénomènes physiques qui n'ont pas été traités au cours de cette thèse. On peut citer par exemple les écoulements diphasiques (injection de carburant liquide, dispersion de la phase liquide, atomisation, évaporation) ou l'interaction avec le solide (couplage thermique fluide-solide). La combustion turbulente est donc un problème multi-physiques et multi-échelles. Il convient d'adopter certaines stratégies spécifiques permettant sa résolution.

3.6.2 Stratégies adoptées et concepts généraux de YALES2

Présentation générale de YALES2

YALES2 est un code de calcul qui a pour objectif la résolution DNS et LES des écoulements réactifs diphasiques fondé sur la méthode des volumes finis. Ainsi, il résout les équations de Navier-Stokes en une, deux ou trois dimensions. Il est capable de gérer les maillages non-structurés composés de triangles, tétraèdres, prismes, pyramides, quadrilatères ou hexaèdres. Les grandeurs physiques (pression, vitesse, scalaires...) sont stockés aux nœuds du maillage. Des volumes de contrôle construits autour de chaque nœud sont utilisés pour l'intégration des équations de transport. Un exemple de volume de contrôle autour d'un nœud d'un maillage est donné sur la figure 3.7. Le code de calcul YALES2 est développé pour être capable de réaliser des calculs massivement parallèles, utilisant les capacités des supercalculateurs. Différentes stratégies ont donc été mises en place pour relever ce défi.

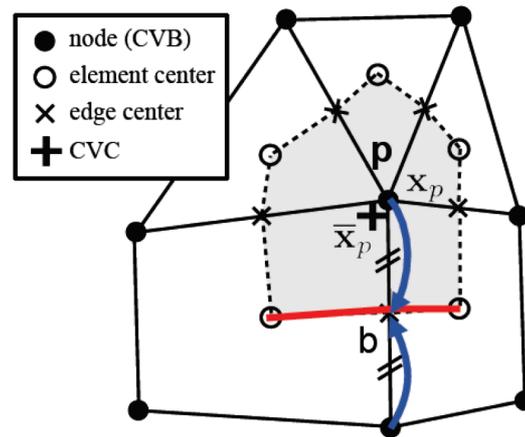


FIGURE 3.7: Volume de contrôle basé sur un nœud du maillage dans YALES2 : x_p représente le nœud du maillage, \bar{x}_p représente le barycentre du volume de contrôle.

Séparation d'opérateurs

Afin de s'affranchir de la contrainte multi-échelle temporelle, le solveur YALES2 utilise la méthode de séparation d'opérateurs, *operator splitting* en anglais. Cette méthode consiste en la résolution séparée de chaque opérateur (convection, diffusion et réaction) avec son propre pas de temps caractéristique.

L'intérêt d'une telle méthode réside dans le choix du pas de temps d'une itération, pris comme le plus grand temps caractéristique entre chaque phénomène. En règle générale, il s'agit du pas de temps convectif. Les phénomènes de diffusion et de réaction réalisent plusieurs sous-étapes à l'intérieur de cette itération fluide afin de respecter leur condition de stabilité. Cependant, le séparateur d'opérateur est susceptible de générer des erreurs numériques importante, dites "erreurs de splitting". Ces erreurs sont d'autant plus importantes que les rapports de temps caractéristiques sont grands.

Intégration raide de la chimie

Le calcul des termes sources de la chimie est un réel défi pour la simulation numérique des fluides réactifs, du fait de la multitude de temps caractéristiques non corrélés avec les échelles de temps caractéristiques du fluide. Le pas de temps chimique minimal est de l'ordre de 10^{-9} s, voire de l'ordre de 10^{-12} s pour une chimie hydrocarbonée, dans des conditions normales de température et pression. Il est ainsi plusieurs ordres de grandeurs inférieur au pas de temps convectif, habituellement de 10^{-5} à 10^{-7} s. L'utilisation d'un schéma explicite pour l'intégration des termes sources requiert obligatoirement un pas de temps de cet ordre de grandeur afin de garantir la précision et la stabilité numérique.

Afin de s'affranchir de cette limitation, et profiter de la séparation d'opérateurs, la chimie est résolue indépendamment des autres phénomènes physiques grâce à des bibliothèques d'intégration dites "*stiff*" : bibliothèques capables de résoudre des systèmes d'équations différentielles ordinaires (ODE) avec des méthodes implicites multi-pas, dédiées à l'intégration temporelle des problèmes raides. Celle utilisée dans ces travaux est CVODE. Elle permet de résoudre le système chimique avec un ordre et un pas de temps variable, et contrôle de l'erreur.

En pratique, dans YALES2, les termes sources des espèces et de l'énergie sont considérés comme constants pendant une itération. Cela est permis grâce à la séparation d'opérateurs. La résolution de la

chimie implique le système suivant :

$$\frac{dY_k}{dt} = \dot{\omega}_k. \quad (3.135)$$

Si l'on considère le terme source $\dot{\omega}_k$ constant sur l'itération $[t; t + \Delta t]$, on obtient le terme source $\dot{\Omega}_k$ intégré temporellement :

$$\dot{\Omega}_k = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \dot{\omega}_k dt = \frac{Y_k(t + \Delta t) - Y_k(t)}{\Delta t}. \quad (3.136)$$

Le terme source d'enthalpie est déduit de ces termes sources :

$$\dot{\Omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\Omega}_k. \quad (3.137)$$

Les équations de transport des espèces et de l'enthalpie sensible sont donc modifiées :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\Omega}_k, \quad (3.138)$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h_s}{\partial x_i} = \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial \mathcal{Q}_i}{\partial x_i} + \dot{\Omega}_T. \quad (3.139)$$

Les termes sources d'espèces sont obtenus grâce à la résolution d'un réacteur homogène à pression P et enthalpie H constante dont le système est :

$$\begin{cases} \frac{dM_k}{dt} = V \dot{\omega}_k \\ \frac{dH}{dt} = 0 \\ \frac{dP}{dt} = 0 \end{cases} \quad (3.140)$$

où M_k est la masse de l'espèce k et V le volume de contrôle, calculé comme le rapport de la masse totale M par la masse volumique ρ : $V = M/\rho$. Il est à noter que le couplage de l'intégration raide de la chimie avec le modèle d'épaissement de flamme a été traité au cours de cette thèse et est l'objet de la section 6.1.2.1.

Autre point intéressant, la librairie externe d'intégration a besoin à chaque sous-itération de la matrice Jacobienne des termes sources $J = \partial \Omega / \partial \Phi$ avec $\Phi = (M_1, \dots, M_{N_{sp}}, H, P)$ et $\Omega = \partial \Phi / \partial t$. La librairie CVODE est capable d'évaluer de façon numérique cette matrice. Cependant, le calcul analytique de la matrice Jacobienne est implanté dans le code YALES2. Pour cela, le code calcule les dérivées partielles définis aux Eq. (3.69)-(3.70) puis effectue un changement de variable pour passer des concentrations et température au vecteur Φ . Cette opération complexe n'est pas détaillée ici. L'utilisation du calcul analytique de la matrice Jacobienne permet de réduire de 50 % le temps de calcul dédié à la résolution de la chimie avec certains schémas.

Un autre problème de performance de calcul apparaît : la quantité de travail (ou d'opérations mathématiques) n'est pas la même d'un nœud du maillage à un autre. En effet, comme la librairie CVODE utilise une méthode de pas de temps adaptatif, la résolution du réacteur homogène est plus ou moins rapide. En pratique, la résolution est plus longue aux nœuds contenant la flamme et est beaucoup plus rapide en dehors. Cela est illustré par la Fig. 3.8 montrant le temps de calcul CPU en fonction du maillage pour une flamme de bec Bunsen. La différence de temps de calcul de la chimie entre nœuds peut atteindre un rapport 10, cette valeur dépendant du schéma utilisé. Cela induit à un déséquilibre de la charge de calcul entre processeurs. Les performances du parallélisme sont détériorées fortement : tous les processeurs

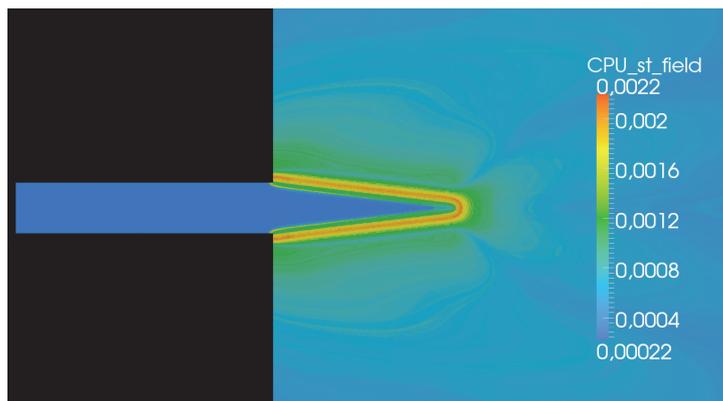


FIGURE 3.8: Champs de temps calcul CPU de la chimie sur une flamme de bec bunsen sans répartition de la charge de calcul, avec un schéma cinétique contenant 14 espèces et 38 réactions. Le coût de la chimie est beaucoup plus important dans la flamme qu'en dehors.

doivent attendre que le processeur le plus lent ait fini de calculer ses termes sources avant de passer à la prochaine étape du calcul.

Afin de remédier à ce problème, il convient de mieux répartir la charge de calcul entre processeurs. A cette fin, nous avons développé un algorithme de répartition de charge dédié pour la chimie, aussi appelé *scheduler* dynamique. Ce travail est détaillé dans l'Annexe A.

Double décomposition de domaine et parallélisme

L'augmentation perpétuelle des ressources de calcul encourage le développement de la CFD car elle permet d'améliorer la fidélité des simulations en augmentant la résolution du maillage, le temps physique simulé, ou le nombre de phénomènes physiques pris en compte. Par conséquence, ces calculs doivent gérer des maillages composés de plusieurs millions voire milliards d'éléments sur des machines parallèles utilisant des milliers de processeurs. Ceci est un défi important car les outils traditionnels doivent être revus dans cet objectif. Cette problématique, partagée par d'autres domaines scientifiques, est souvent nommée "problème du *Big Data*", qui associe à la fois les problèmes d'analyse, partage, stockage, transfert et visualisation.

Pour gérer cette quantité de données en cours de calcul, la méthode la plus courante en simulation numérique des fluides est la décomposition de domaine : chaque processeur est assigné à une partie différente du domaine de calcul. L'interdépendance de ces sous-domaines est prise en compte à l'aide de communications entre les processeurs qui échangent des informations à l'interface de chaque groupe de cellules, grâce à des instructions MPI (Message Passing Interface). La décomposition du maillage en sous-domaines doit assurer une répartition de la charge de travail sur les processeurs la plus équilibrée possible. Dans un contexte purement eulérien, la manière la plus évidente d'y arriver consiste à découper le maillage en sous-domaines contenant la même quantité de travail (par exemple nombre d'éléments ou nombre de paires de nœuds identiques suivant le problème à résoudre). Si cette décomposition est triviale pour un maillage structuré, elle l'est beaucoup moins pour un maillage non structuré. Dans YALES2, cette opération est faite à l'aide d'une librairie externe : METIS [116] ou SCOTCH [36].

Une particularité du code YALES2 est la double décomposition de domaine [159]. En effet, chaque sous-domaine obtenu à l'issue du premier niveau de découpage du maillage est lui-même décomposé en plusieurs groupes de cellules. Comme le montre la Fig. 3.9, les éléments sont découpés entre processeurs

(frontière noire) puis en plus petits paquets d'éléments sur chaque processeur (frontière grise). La taille de ces groupes de cellules est telle que les données qu'ils contiennent est adaptée à la capacité de la mémoire cache des processeurs. Cette double décomposition de domaine est par ailleurs mise à profit pour optimiser les performances du solveur de Poisson. Ces groupes de cellules fournissent un maillage grossier, utilisé par les solveurs linéaires bi-niveaux tels que le PCG avec déflation [149, 148]. Le solveur fait intervenir deux types de communications : i) des communications externes correspondant au premier niveau de décomposition et gérées par des communications MPI ; ii) des communications internes, permettant les échanges entre les groupes de cellules au sein d'un même processeur, et qui ne sont pas concernées par les instructions MPI. La Fig. 3.10 montre le schéma de communication des données entre les groupes d'éléments, les communicateurs et les conditions aux limites.

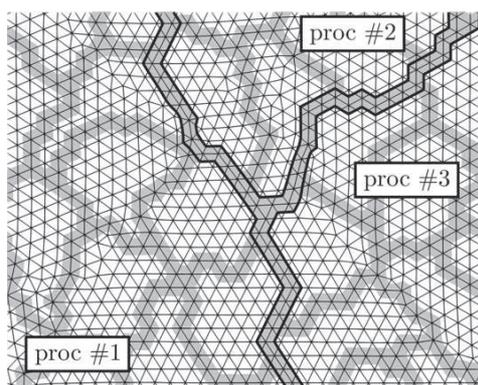


FIGURE 3.9: Représentation de la double décomposition de domaine sur un maillage composé de triangles.

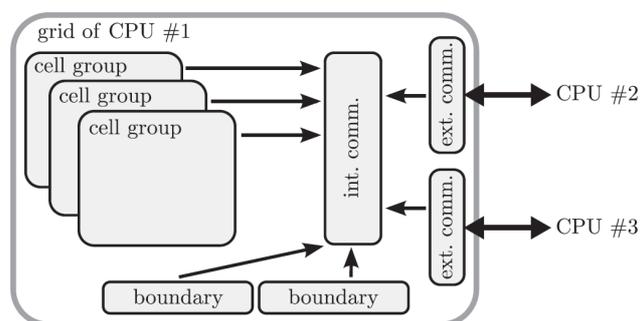


FIGURE 3.10: Schéma de communication entre communicateurs et entre processeurs.

Outils d'extraction et d'analyse de grandes quantités de données

En plus de gérer en cours de calcul la grande quantité de données induites par les maillages composés d'un grand nombre de cellules, il faut aussi être capable d'analyser les informations intéressantes à partir de ce flux de données. Concernant le post-traitement de simulations aux grandes échelles, quelques outils d'analyses sont disponibles dans YALES2. Nous en décrivons certains ci-après.

- Le prélèvement sélectif consiste en l'extraction de seulement une partie des données disponibles. On peut ainsi récupérer les informations sur un point, une ligne, un plan, une iso-surface, etc... Cette méthode permet de réduire considérablement la quantité de données à écrire et stocker sur disque.
- Un autre outil est la *Level-Set*. Les méthodes *Level-Set* sont des techniques numériques puissantes créées pour fournir une représentation implicite et dynamique de surfaces [199]. Elles peuvent être appliquées à de nombreux domaines de la mécanique des fluides (écoulement de spray par exemple), l'animation assistée par ordinateur ou le traitement d'images.
- La visualisation de grandes structures de l'écoulement peut être réalisée en utilisant la technique de *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) [12] ou encore la *Dynamic Mode Decomposition* (DMD) [193]. L'objectif de ces méthodes est l'extraction de grandes structures cohérentes à partir d'un ensemble de données, afin d'en tirer une décomposition modale.
- Une autre méthode pour l'extraction de grandes structures est l'utilisation de filtres passe-bas. Afin d'amortir correctement les plus petites structures sans modifier les plus grandes, ce filtre doit

avoir une bonne sélectivité. Les filtres d'ordres élevés, qui présentent cette caractéristique, sont de bons candidats. Les filtres d'ordre élevé implantés dans YALES2 sont basés sur ceux développés par Raymond *et al.* [189]. Leur formulation implicite est particulièrement intéressante car elle permet d'obtenir des filtres d'ordre élevé à partir de schémas de différences finies d'ordre faible sur support compact. L'utilisation de ce filtre a permis l'extraction du *Precessing Vortex Core* (PVC), structure cohérente caractéristique de l'écoulement swirlé (Fig. 3.11) [90].

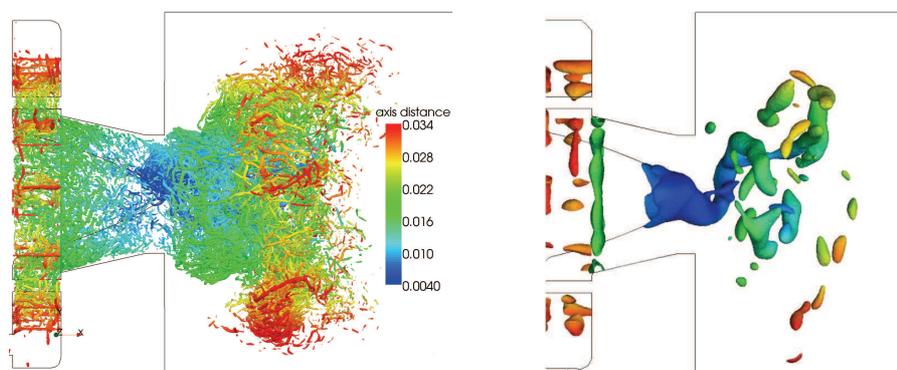


FIGURE 3.11: Comparaison d'une même iso-surface de critère Q non-filtré (gauche) et filtré à l'aide de filtres d'ordres élevés (droite), obtenue sur un maillage de 878 millions d'éléments. Figures tirées de [90].

Approche à faible nombre de Mach

En fonction de l'application étudiée, la masse volumique ne peut pas toujours être considérée comme constante en espace. En effet plusieurs effets sont responsables des variations de masse volumique dans l'écoulement comme les variations de pression (effet de compressibilité), variations de température (effet de dilatation ou contraction) ou les variations de composition (mélange de fluides de masses volumiques différentes). Il convient de résoudre tout le système d'équations de l'aérothermochimie compressible 3.2. Cependant, cette approche impose des pas de temps très faibles, conditionnés par le CFL acoustique, et conduit à des temps de calcul importants.

Le nombre de Mach est un nombre adimensionnel défini comme le rapport de la vitesse de l'écoulement u sur celle du son c dans ce même milieu. Lorsque le nombre de Mach est inférieur à 0.3, le régime d'écoulement est qualifié "d'écoulement à faible nombre de Mach" ("*Low Mach Number*" en anglais). Il est rencontré dans de très nombreuses applications industrielles ainsi que dans les configurations étudiées lors de cette thèse. Klainerman et Majda [125] ont montré que l'écoulement compressible converge vers un écoulement incompressible quand le nombre de Mach tend vers zéro. Un nombre de Mach très petit devant l'unité implique une homogénéisation rapide de la pression dans le domaine. Dans ce cas, les ondes acoustiques se propagent beaucoup plus rapidement que les ondes entropiques et les fluctuations de pression ont un effet négligeable sur les propriétés thermodynamiques. La pression thermodynamique peut être considérée comme constante en espace mais peut varier en temps. En conséquence, la variation de la masse volumique ρ n'est plus soumise qu'aux effets de dilatation dus aux changements de température et au mélange de fluides de masses volumiques différentes, les effets liés à la compressibilité étant négligés. On peut considérer que l'hypothèse de fluide incompressible est pertinente. Cette hypothèse permet une simplification des équations de Navier-Stokes et un traitement numérique différent pour leur résolution. Cette simplification autorise des pas de temps plus grands qu'en formulation compressible car on s'affranchit de la contrainte acoustique.

Majda et Sethian [147] proposent d'écrire une formulation intermédiaire des équations de bilan de l'aérothermochimie, entre la formulation incompressible à masse volumique constante et la formulation compressible décrite dans la section 3.2. Il est nécessaire d'écrire le développement asymptotique de chaque variable adimensionnelle $\varphi^* = \varphi/\varphi_r$ en puissances du nombre de Mach :

$$\varphi^* = \varphi_0^* + M_r \varphi_1^* + M_r^2 \varphi_2^* + \mathcal{O}(M_r^3), \quad (3.141)$$

où φ correspond aux variables du système (la vitesse u , la pression p , la masse volumique ρ , l'enthalpie sensible h_s), l'indice r indique la valeur de référence.

Ces développements sont injectés dans les équations 3.22-3.20 adimensionnées. La pression peut alors être décomposée en deux termes : la pression thermodynamique P_0 supposée constante en espace et la pression dynamique P_2 variable en espace et en temps. Dans un système ouvert, la pression thermodynamique du système P_0 est aussi considérée constante en temps. L'équation d'état s'écrit :

$$P_0 = \frac{\rho_0 T_0}{\gamma}. \quad (3.142)$$

Schémas numériques et solveurs

Plusieurs schémas numériques sont disponibles pour l'avancement en temps explicite : Runge-Kutta du troisième et quatrième ordre. Un schéma plus récent proposé par Kraushaar [128] appelé TFV4A, qui combine les méthodes Runge-Kutta et Lax-Wendroff, est également disponible. L'intégration spatiale est effectuée avec un schéma d'ordre deux ou quatre. Plus de détails sur la discrétisation spatiale dans le code sont disponibles dans la thèse de Vantieghem [215].

YALES2 dispose de nombreux solveurs se proposant de résoudre différents phénomènes physiques. Au cours de cette thèse, uniquement deux solveurs seront utilisés. Ils se proposent de résoudre les équations de Navier-Stokes pour les écoulements à faible nombre de Mach :

- **Le solveur incompressible (ICS)**, dont le formalisme suppose que la densité est constante, ce qui limite l'utilisation de ce solveur à des simulations isothermes, non réactives ;
- **Le solveur incompressible à densité variable (VDS)**, qui suppose que les variations de pression, densité et température dues aux ondes acoustiques sont négligées. Les variations de température modifient la densité par l'intermédiaire d'une loi d'état (typiquement la loi des gaz parfaits ou l'approche chimie tabulée).

3.6.3 Solveur incompressible à densité constante (ICS)

3.6.3.1 Système d'équations résolu

Les équations de Navier-Stokes, peuvent être formulées dans le cadre des écoulements incompressibles, qui supposent que la densité est constante en temps et en espace. Ces équations, résolues par le solveur incompressible de YALES2, s'écrivent classiquement :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.143)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (3.144)$$

Ce solveur a été utilisé pour l'étude aérodynamique de l'écoulement isotherme à l'intérieur du brûleur.

3.6.3.2 Méthode de résolution

L'avancement en temps est basé sur la méthode de pas fractionnés proposée par Chorin [38] puis modifiés par Kim et Moin [121]. La vitesse est résolue à chaque pas de temps (indices $n, n+1$, etc) alors que les scalaires, la densité et la pression sont résolus sur des pas de temps décalés (indices $n+1/2, n+3/2$, etc). Cette méthode de projection, souvent utilisée pour la simulation d'écoulements incompressibles repose sur la décomposition d'Helmholtz-Hodge, qui énonce qu'un champ vectoriel peut se décomposer en une partie irrotationnelle ($\nabla \times \mathbf{u} = 0$) et une partie solénoïdale ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$). Cette décomposition, appliquée au champ de vitesse, s'écrit :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^i + \mathbf{u}^s, \quad (3.145)$$

où \mathbf{u}^s est la composante solénoïdale du champ de vitesse, vérifiant $\nabla \cdot \mathbf{u}^s = 0$ et \mathbf{u}^i est la composante irrotationnelle du champ de vitesse qui vérifie $\nabla \times \mathbf{u}^i = 0$. La partie irrotationnelle dérive d'un potentiel scalaire et peut s'écrire $\mathbf{u}^i = \nabla \phi$. L'application de l'opérateur divergence à cette équation donne directement :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{u}^i = \nabla^2 \phi. \quad (3.146)$$

Cette décomposition permet de résoudre l'équation de quantité de mouvement en 2 étapes :

1. Etape de prédiction

Une première estimation \mathbf{u}^* de la vitesse au temps $n+1$ est obtenue en avançant la quantité de mouvement sans le terme de gradient de pression, qui ne contribue qu'à la partie irrotationnelle du champ de vitesse :

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \mathbf{u}^n) + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n. \quad (3.147)$$

2. Etape de correction

La vitesse est ensuite corrigée en réintégrant le gradient de pression :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1/2}. \quad (3.148)$$

Le calcul de \mathbf{u}^{n+1} nécessite de connaître $P^{n+1/2}$, qui est déterminé en résolvant l'équation de Poisson pour la pression, obtenue en appliquant l'opérateur divergence à l'équation 3.148, et en réintégrant la contrainte de divergence nulle pour \mathbf{u}^{n+1} :

$$\nabla^2 P^{n+1/2} = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.149)$$

En pratique dans YALES2 l'implémentation diffère un peu de la méthode proposée par Chorin :

1. Etape de prédiction

L'étape de prédiction est faite en tenant compte du terme de pression au temps $n-1/2$, qui est généralement assez proche de $P^{n+1/2}$. Ce terme conduit à une meilleure estimation de \mathbf{u}^* , ce qui permet de réduire les erreurs liées au fractionnement de l'avancement temporel.

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \mathbf{u}^n) - \frac{1}{\rho} \nabla P^{n-1/2} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n. \quad (3.150)$$

2. Etape de correction

L'étape de correction de la vitesse s'écrit alors :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1/2} + \frac{1}{\rho} \nabla P^{n-1/2}. \quad (3.151)$$

L'équation de Poisson permettant de calculer $P^{n+1/2}$ devient :

$$\nabla^2 (P^{n+1/2} - P^{n-1/2}) = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.152)$$

Cette étape est le point central de la méthode. Elle fait intervenir une équation de Poisson sur la pression. Sa résolution nécessite l'utilisation d'un solveur linéaire dont les performances sont capitales pour le calcul parallèle. C'est le propos de la section 3.6.5.

3.6.4 Solveur incompressible dilatable (VDS)

3.6.4.1 Système d'équations résolu

En ne gardant que l'ordre zéro, les équations de l'aérothermochimie sous l'approche faible nombre de Mach apparaissent :

- **Equation de continuité**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.153)$$

- **Equation de conservation de la quantité de mouvement**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = -\frac{\partial P_2}{\partial x_j} + \frac{\tau_{ij}}{\partial x_i}, \quad (3.154)$$

- **Equation de conservation des espèces**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i Y_k = \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k, \quad (3.155)$$

- **Equation de conservation de l'enthalpie sensible**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h_s + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i h_s = \frac{\partial P_0}{\partial t} + \frac{\partial Q_i}{\partial x_i} + \dot{\omega}_T. \quad (3.156)$$

La température est déduite de l'enthalpie sensible h_s et des fractions massiques d'espèces Y_k . Cependant, cette opération est délicate car elle implique la résolution numérique d'un polynôme de degré 5, qui ne peut être qu'approximative. YALES2 résout ce polynôme à l'aide de l'algorithme de Newton-Raphson, méthode itérative efficace pour trouver numériquement une approximation précise d'un zéro d'une fonction donnée.

3.6.4.2 Méthode de résolution

La méthode décrite précédemment pour l'avancement en temps des équations incompressibles est étendue au cas à densité variable. L'avancement en temps est structuré de la manière suivante :

1. Prédiction de la densité

Dans un premier temps, un prédicteur sur la densité, ρ^* , est déterminé par l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\rho^* - \rho^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^n. \quad (3.157)$$

2. Prédiction des scalaires

L'avancement des scalaires, notamment de l'enthalpie sensible h_s^* et des espèces Y_k^* , est effectué à partir du prédicteur de densité. Pour un scalaire ϕ quelconque, il vient :

$$\frac{\rho^* \phi^* - \rho^{n+1/2} \phi^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^n \phi^{n+1/2}) + \mathcal{D}(\phi^{n+1/2}) + \mathcal{R}(\phi^{n+1/2}), \quad (3.158)$$

où \mathcal{D} et \mathcal{R} désignent respectivement les termes de diffusion et réaction.

3a. Calcul de la température

La température T^* est déduite des scalaires prédits :

$$T^* = f(Y_k^*, h_s^*). \quad (3.159)$$

3b. Correction de la densité

La densité est évaluée à partir des scalaires prédits et d'une loi d'état : $\rho^{EOS} = f(\phi^*)$. Dans le cas d'une chimie multi-espèces et avec l'équation des gaz parfaits, on obtient :

$$\rho^{EOS} = \frac{P_0}{RT^*} \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k^*}{W_k} \right)^{-1}. \quad (3.160)$$

La densité au temps $n + 3/2$ est ensuite calculée à partir de la valeur prédite ρ^* et de la valeur issue de l'équation d'état ρ^{EOS} via un coefficient de relaxation α :

$$\rho^{n+3/2} = \alpha \rho^{EOS} + (1 - \alpha) \rho^*. \quad (3.161)$$

Quand $\alpha = 0$, la nouvelle densité ne prend pas en compte la loi d'état. Inversement, si $\alpha = 1$, $\rho^{n+3/2}$ ne prend pas en compte la densité prédite ρ^* . Par défaut, le coefficient de relaxation α est fixé à 0.7 afin de prendre en compte les deux effets.

La densité au temps $n + 1$ est estimée de la manière suivante :

$$\rho^{n+1} = \frac{1}{2} (\rho^{n+1/2} + \rho^{n+3/2}). \quad (3.162)$$

4. Prédiction de la vitesse

Une fois la densité ρ^{n+1} connue, une procédure semblable à celle du formalisme incompressible peut être mise en œuvre. La vitesse est avancée sans tenir compte de l'évolution de la pression :

$$\frac{(\rho \mathbf{u})^* - (\rho \mathbf{u})^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^n \mathbf{u}^n) - \nabla P_2^{n-1/2} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n. \quad (3.163)$$

5. Correction de la vitesse

Comme précédemment, la correction de la vitesse se fait en réintégrant le terme de pression :

$$\frac{(\rho \mathbf{u})^{n+1} - (\rho \mathbf{u})^*}{\Delta t} = -\nabla (P_2^{n+1/2} - P_2^{n-1/2}). \quad (3.164)$$

L'équation de Poisson permettant de calculer $P_2^{n+1/2}$ est obtenue en prenant la divergence de l'Eq. 3.164, et en intégrant la condition imposée par l'équation de continuité pour \mathbf{u}^{n+1} :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^{n+1} = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^{n+1} = - \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t}. \quad (3.165)$$

Dans ce cas, l'équation de Poisson s'écrit :

$$\nabla \cdot \left(\nabla (P_2^{n+1/2} - P_2^{n-1/2}) \right) = \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t^2} + \frac{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^*}{\Delta t}. \quad (3.166)$$

6. Correction des scalaires

Enfin, l'avancement des scalaires est corrigé pour tenir compte de la correction sur la vitesse. Pour un scalaire ϕ , il vient :

$$\frac{(\rho \phi)^{n+3/2} - (\rho \phi)^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^{n+1} \phi^{n+1/2}) + \mathcal{D}(\phi^{n+1/2}) + \mathcal{R}(\phi^{n+1/2}). \quad (3.167)$$

3.6.5 Résolution de l'équation de Poisson

Les deux solveurs incompressibles font intervenir une équation de Poisson sur la pression, c'est à dire une équation de la forme :

$$\nabla \cdot (\alpha \nabla P_2) = RHS. \quad (3.168)$$

Il s'agit d'un système d'équations linéaires dont l'inconnue est le vecteur des valeurs de la pression sur les nœuds du domaine discrétisé. Sa résolution requiert de faire appel à un solveur de systèmes linéaires. La résolution de ce système peut représenter une part très importante du temps de calcul nécessaire à la simulation de chaque pas de temps. En effet, les solveurs utilisés pour cette résolution sont obligatoirement des solveurs itératifs, et le nombre d'itérations nécessaire à l'obtention d'une estimation suffisamment précise de la solution peut être élevé selon l'algorithme utilisé et des caractéristiques de la matrice de l'opérateur laplacien discret. De plus, des communications interprocesseurs sont nécessaires à chaque itération du solveur linéaire, et ces communications peuvent représenter une proportion très importante du temps total de la simulation, pouvant aller jusqu'à 80 % si aucune attention particulière n'est apportée à l'implémentation de la méthode [149]. L'optimisation de la méthode de résolution l'équation de Poisson est un point clé pour la simulation des écoulements incompressibles. Cette problématique a fait l'objet de la thèse de Malandain [148]. Plusieurs algorithmes sont disponibles dans YALES2 pour inverser le système linéaire : PCG (*Preconditioned Conjugate Gradient*) [220] et *Deflated* PCG [166], mais également le schéma BICGSTAB [220].

Chapitre 4

Etude de l'écoulement non-réactif dans le brûleur centimétrique

Ce chapitre porte sur l'écoulement non-réactif dans le brûleur centimétrique du CORIA. La phénoménologie de l'écoulement, l'apparition de l'écoulement turbulent, le mélange et la distribution en temps de séjour y sont décrits. Une analyse de sensibilité aux paramètres numériques tels que l'influence du maillage et du modèle de turbulence est également effectuée. Dans un objectif de réduction des coûts de calcul, une stratégie d'adaptation de maillage automatique et parallèle est proposée afin d'assurer une bonne fidélité des résultats. Différents critères d'adaptation pour des écoulements non-réactifs sont définis. L'adaptation de maillage est appliquée au brûleur du CORIA. L'étude sur l'adaptation de maillage a fait l'objet d'un article scientifique soumis à l'International Journal for Numerical Methods in Fluids.

Sommaire

4.1	Introduction	85
4.1.1	Objectifs	85
4.1.2	Description du cas de calcul	85
4.2	Analyse phénoménologie	86
4.2.1	Caractéristique tourbillonnaire de l'écoulement	86
4.2.2	Etude de la turbulence	89
4.2.3	Analyse du mélange	91
4.2.4	Distribution en temps de séjour	94
4.3	Influence des paramètres numériques	97
4.3.1	Convergence en maillage	97
4.3.2	Etudes des modèles de turbulence de sous-maille	100
4.4	Adaptation de maillage en parallèle	104
4.4.1	Critères d'adaptation	105
4.4.2	Evaluation des critères	107
4.4.3	Méthodologie d'adaptation en parallèle sur configuration complexe	111
4.4.4	Application sur le brûleur centimétrique	118
4.4.5	Perspectives	125
4.5	Conclusions	126

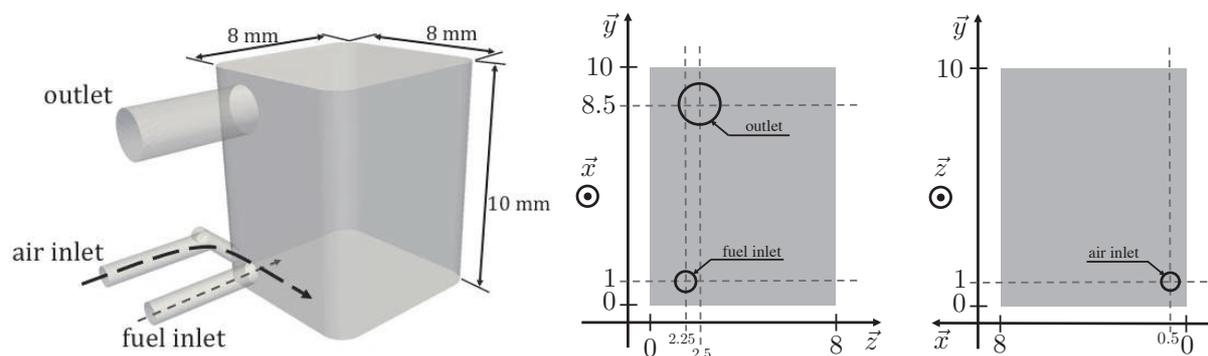


FIGURE 4.1: Représentation 3D du volume fluide et plans $y - z$ et $x - y$ avec emplacements des entrées et sortie.

4.1 Introduction

4.1.1 Objectifs

Avant de s'intéresser à l'étude de l'écoulement réactif à l'intérieur du brûleur centimétrique MESO-CORIA, il convient d'investiguer d'abord l'écoulement aérodynamique au sein de la chambre. Cette étude doit permettre de caractériser l'écoulement tourbillonnaire, analyser les mécanismes de mélange et de distribution des temps de séjour. Les paramètres numériques influents seront également identifiés afin de favoriser l'étude de l'écoulement réactif.

4.1.2 Description du cas de calcul

Géométrie

La configuration étudiée est le brûleur MESO-CORIA, décrit en section 2.6.1. Il s'agit d'une chambre de combustion parallélépipédique de $8 \times 8 \times 10 \text{ mm}^3$. Les arêtes du cube selon la direction axiale étant arrondies (Fig. 2.21), le volume fluide est légèrement inférieur à 640 mm^3 . Ce brûleur est une configuration non-prémélangée : les réactifs sont introduits dans le domaine via deux entrées séparées perpendiculaires :

- une entrée pour l'air de diamètre 0.8 mm,
- une entrée pour le carburant de diamètre 1 mm.

La sortie du brûleur, à l'opposée des injections, est un tube de diamètre 2 mm.

La géométrie a été créée par l'atelier du CORIA, sous le logiciel CATIA, pour les besoins de l'expérience de Liu [137]. Les deux tubes d'injection ont la même orientation (suivant la direction \vec{x}) mais l'air rentre suivant la direction \vec{z} dans la chambre. C'est pourquoi le tube d'entrée d'air présente un coude. Cette géométrie a été épurée puis utilisée pour réaliser les maillages avec le logiciel commercial GAMBIT.

Paramètres numériques

L'écoulement aérodynamique du brûleur a été étudié par simulation numérique à l'aide du solveur incompressible à densité constante (ICS) de YALES2.

Le point de fonctionnement étudié correspond aux conditions opératoires d'un des calculs non-réactifs de la thèse de Sjostrand [203]. Le fluide est assimilé à de l'air à la température 300 K. La masse volumique est $\rho = 1.177 \text{ kg.m}^{-3}$ et la viscosité cinématique $\nu = 1.517 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. Le fluide entre

dans la chambre par l'injection d'air avec une vitesse moyenne de 37.0 m.s^{-1} et par l'injection de carburant à 1.2 m.s^{-1} . Des profils de vitesse paraboliques sont imposés sur ces deux entrées :

$$u(r) = u_{max} \left[1 - \left(\frac{r}{r_{max}} \right)^2 \right], \quad (4.1)$$

avec $u_{max} = 2.0 u_{mean}$.

Le nombre de Reynolds basé sur la vitesse maximum et le diamètre du tube d'injection d'air approche $Re = u_{max} D_{air} / \nu \approx 2000$, indiquant que l'écoulement est faiblement turbulent, comme attendu sur ce brûleur whirlé asymétrique. Le temps de séjour moyen dans la géométrie étudiée, calculé comme rapport entre le volume du domaine et le débit volumique, est d'environ 33 ms.

Les parois sont considérées comme non-glissantes : chaque composante du vecteur vitesse à la première maille à la paroi est nulle.

4.2 Analyse phénoménologie

Un calcul de référence a été effectué avec un maillage très fin afin d'étudier la phénoménologie de l'écoulement. Ce maillage, de 273 millions d'éléments, a une taille de maille homogène de $\Delta x = 25 \mu\text{m}$. Le modèle de sous-maille pour la turbulence Smagorinsky dynamique est activé. Cependant, il sera montré plus loin que ce modèle n'a aucun effet sur l'écoulement et on peut considérer ce calcul comme une DNS.

La phénoménologie de l'écoulement est d'abord étudiée à travers des visualisations 3D et des coupes 2D du domaines. Ces coupes 2D correspondent à des plans normaux à l'axe du brûleur. Quatre plans sont utilisées : l'un situé dans l'injection du fluide (A : $y = 1 \text{ mm}$), un autre dans la sortie (D : $y = 8.5 \text{ mm}$) et deux placés entre ces deux premiers (B : $y = 3.5 \text{ mm}$ et C : $y = 6 \text{ mm}$). Ces quatre plans sont séparés de 2.5 mm (voir Fig. 4.2).

4.2.1 Caractéristique tourbillonnaire de l'écoulement

La Fig. 4.3 montre les champs de vitesse instantanées sur les plans A, B, C et D. L'écoulement présente plusieurs caractéristiques notables. Les vitesses dans le tube d'entrée d'air sont importantes, jusqu'à 70 m/s après le coude du tube d'injection. Le fluide sortant de ce tube génère un jet qui pénètre dans un écoulement plus calme et qui longe la paroi contenant l'injection de carburant. Dès son entrée dans la chambre, le jet se déstabilise rapidement pour laisser apparaître des structures cohérentes. Le jet impacte ensuite la paroi située à l'opposée du tube et commence à s'enrouler comme on peut s'y attendre au sein de l'écoulement whirlé. Cet écoulement tourbillonnaire est notamment visible sur la Fig. 4.4 montrant le même comportement que la figure précédente mais avec une valeur maximum de vitesse de 15 m.s^{-1} . Notons que les valeurs de vitesse sont les plus importantes près des parois alors que le centre du domaine présente des valeurs faibles voire nulles.

L'écoulement a la caractéristique d'être fortement inhomogène : des zones de faibles vitesses côtoient des zones de vitesses nettement plus élevées. Les champs de vitesses moyennes présentés sur la Fig. 4.5 démontrent que les caractéristiques observées sur les champs instationnaires se retrouvent en moyenne dans le temps. Une zone en arc de cercle, avec une vitesse de l'ordre de 15 m.s^{-1} , est visible sur les plans A, B et C. Elle est représentative de l'écoulement tourbillonnaire recherché. La vitesse dans le tube de sortie augmente, 20 m.s^{-1} en moyenne, du fait de la restriction de la zone de passage.

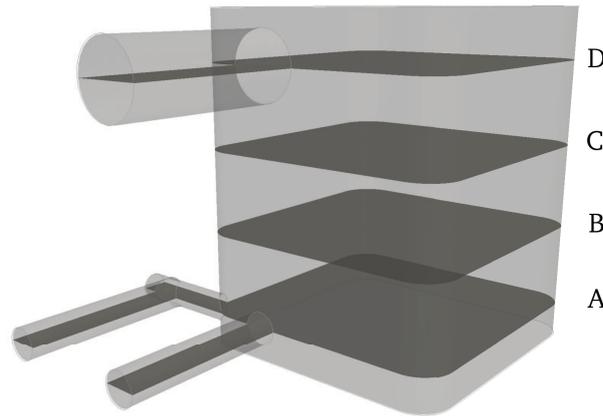


FIGURE 4.2: Visualisation des plans A ($y = 1$ mm), B ($y = 3.5$ mm), C ($y = 6$ mm) et D ($y = 8.5$ mm).

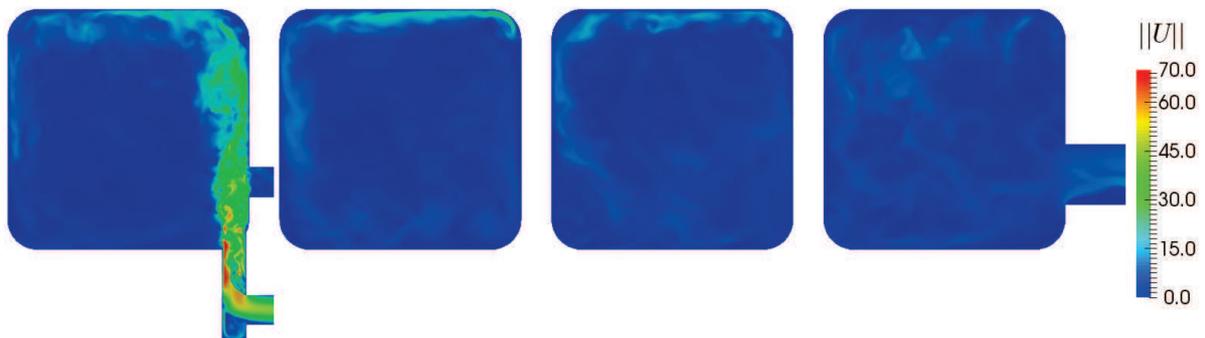


FIGURE 4.3: Champs de vitesse instantanée sur les plans A, B, C et D.

La Fig. 4.6 montre les lignes de courant de vitesse moyenne dans le domaine 3D. L'écoulement cyclonique est très nettement observable. Une trajectoire moyenne apparaît : après l'entrée dans la chambre, le fluide effectue un demi-tour en se dirigeant vers la sortie puis retourne vers le jet après un autre demi-tour. De là, le fluide semble refaire un tour autour de l'axe central de l'écoulement avant de rejoindre la sortie. Ainsi, le fluide effectue environ deux tours en moyenne autour de l'axe de rotation central avant de sortir.

Des lignes de courant 2D dans les plans A, B, C et D sont présentées en Fig. 4.7. Elles montrent la

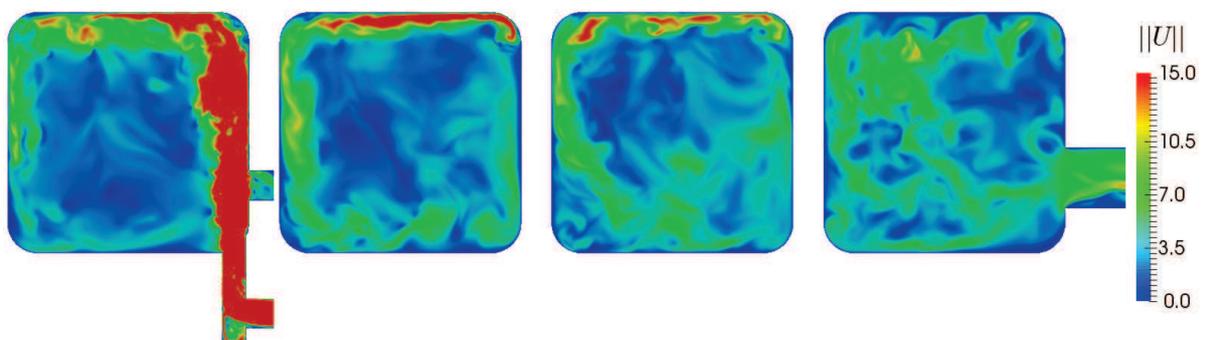


FIGURE 4.4: Champs de vitesse instantanée sur les plans A, B, C et D avec légende saturée à $15 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



FIGURE 4.5: Champs de vitesse moyenne sur les plans A, B, C et D.

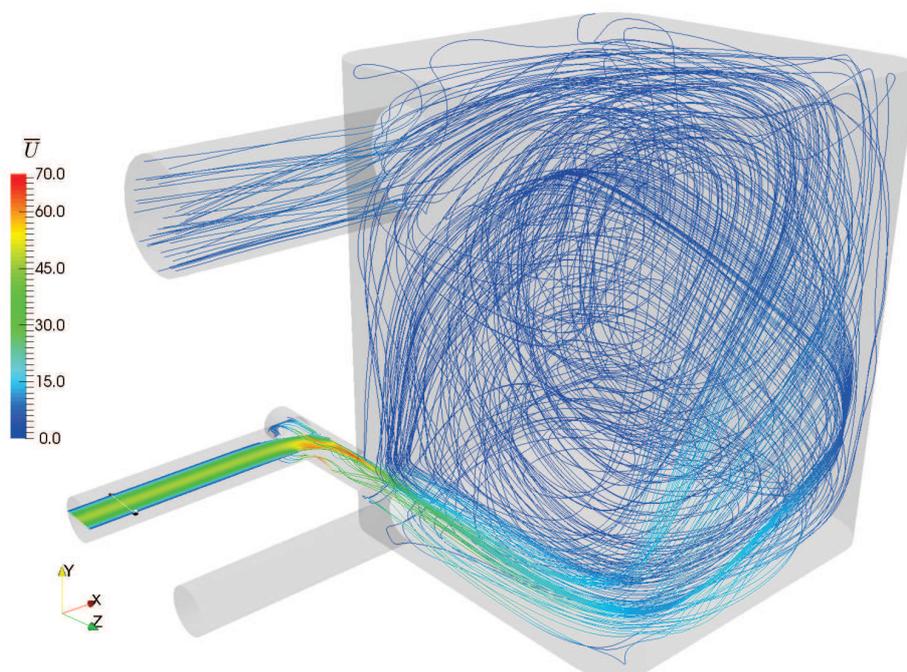


FIGURE 4.6: Lignes de courant 3D dans la chambre de combustion, coloriées par la vitesse moyenne.

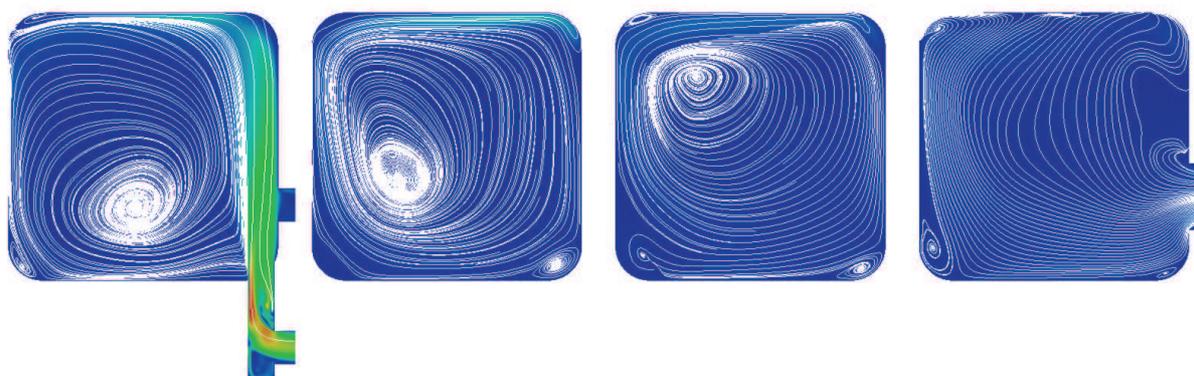


FIGURE 4.7: Lignes de courant (en blanc) sur les plans A, B, C, D coloriés par la vitesse moyenne.



FIGURE 4.8: Champs de vitesse RMS sur les plans A, B, C et D.

présence d'un grand tourbillon au centre de la chambre de combustion, typique de l'écoulement whirlé. Cette recirculation centrale, observable à froid, aide à la stabilisation de l'écoulement réactif. Par ailleurs, de plus petites recirculations apparaissent dans les coins du domaine. Elles sont liées à la forme de la géométrie. Ces recirculations sont similaires aux recirculations de coin apparaissant dans les écoulements dans les cavités entraînées (*driven cavity*) [17, 200]. Dans notre cas, bien qu'elle ne soit pas parfaitement cubique, la chambre ne permet pas à l'écoulement d'être complètement "cylindrique".

4.2.2 Etude de la turbulence

En plus de sa caractéristique whirlée, l'écoulement présente une forte instationarité. Les champs de vitesse instantanée (Fig. 4.3 et 4.4) montrent de grandes variabilités spatiales, comparé à l'écoulement moyen (Fig. 4.5). On s'intéresse alors aux vitesses RMS (*Root Mean Square*) calculées comme la racine carrée de l'écart quadratique moyen du champ de vitesse. Pour un scalaire ϕ quelconque, la valeur RMS s'exprime comme :

$$\phi_{RMS} = \sqrt{\langle \phi'^2 \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle \phi \rangle)^2 f(x) dx}, \quad (4.2)$$

où $\langle \phi \rangle$ est la moyenne temporelle de ϕ et $f(x)$ la fonction densité de probabilité de ϕ . Sur les plans A, B, C et D de la Fig. 4.8, l'écoulement présente des vitesses RMS élevées, de l'ordre de 20 m.s^{-1} , juste après le coude de l'injection d'air ainsi qu'au pied du jet, dans la zone de cisaillement. Dans le reste du jet, la vitesse RMS est d'environ 10 m.s^{-1} alors que des vitesses de 5 m.s^{-1} sont observables en proche paroi sur les plans A, B et C. Sur ces mêmes plans, le centre de l'écoulement semble plus calme et varie peu par rapport à l'écoulement moyen. Dans le plan D, les vitesses RMS sont assez homogènes, entre 3 et 6 m.s^{-1} .

On peut observer les structures cohérentes de l'écoulement en déterminant la valeur locale du critère-Q [104] :

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}), \quad (4.3)$$

avec $\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j u_i - \partial_i u_j)$ et $S_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j)$. Différentes zones de production de turbulence sont identifiées via l'iso-contour de critère-Q de la Fig. 4.9 :

- dans le tube d'injection d'air, lorsque le fluide est dévié par le coude avant d'entrer dans la chambre,
- dans la zone de cisaillement du jet,

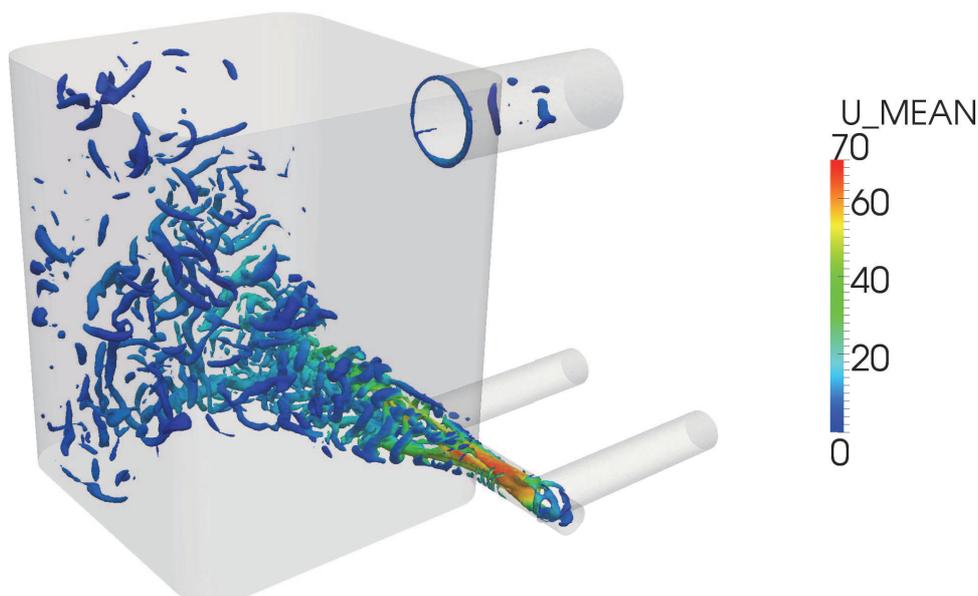


FIGURE 4.9: Iso-contour du critère-Q à $Q = 8 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$, colorié par la vitesse instatannée.

- à l'impact du jet sur la paroi opposée.

La figure 4.9 illustre l'inhomogénéité de la turbulence au sein de la chambre. Les structures turbulentes sont créées à l'injection puis dissipées en aval. En dehors de la zone du jet et de sa zone d'impact sur la paroi opposée, les structures turbulentes sont de beaucoup plus faible intensité.

Afin d'analyser plus précisément la turbulence dans le domaine, les grandeurs caractéristiques de la turbulence ont été calculées. Ainsi, les fluctuations de vitesse \mathbf{u}' , la dissipation de l'énergie cinétique turbulence ϵ , les échelles intégrales l_t et de Kolmogorov η_K et le Reynolds turbulent Re_t sont déterminés à l'aide des formules suivantes :

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle, \quad (4.4)$$

$$\epsilon = 2\nu s_{ij}s_{ij} \quad \text{avec} \quad s_{ij} = \partial_j \mathbf{u}'_i + \partial_i \mathbf{u}'_j, \quad (4.5)$$

$$l_t = \frac{\mathbf{u}'^3}{\epsilon}, \quad (4.6)$$

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (4.7)$$

$$Re_t = \frac{\mathbf{u}' l_t}{\nu}. \quad (4.8)$$

La figure 4.10 montre la distribution du rapport de la taille de filtre sur l'échelle de Kolmogorov $\Delta x / \eta_K$ dans tout le domaine. On remarque que le rapport $\Delta x / \eta_K$ est globalement compris entre 0.1 et 4. La résolution moyenne du maillage, $25 \mu\text{m}$ (en rouge sur le graphique), est du même ordre de grandeur que les plus petites échelles de la turbulence. Dans 83 % du domaine, la taille de maille est inférieure à l'échelle de Kolmogorov. Seulement 3.8 % des éléments ont une taille deux fois supérieure à la plus petite échelle de la turbulence. Cette analyse confirme que l'échelle de résolution Δx vérifie $\Delta x \approx 2\eta_K$ défini par Moin et Mahesh [156]. Le maillage est suffisamment résolu pour capter toutes les échelles de la turbulence. L'utilisation de schémas numériques d'ordre 4 non dissipatifs garantit avec ce maillage une résolution de tout le spectre des échelles turbulentes.

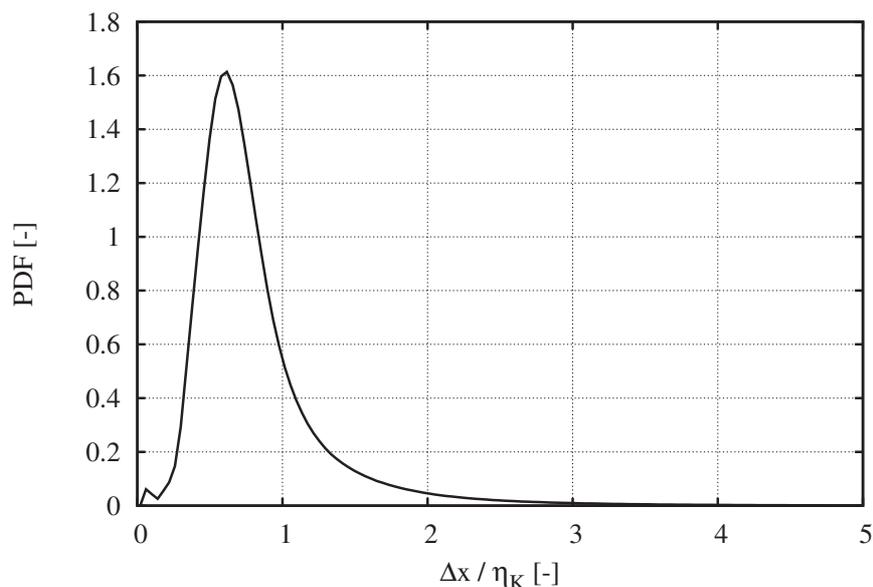


FIGURE 4.10: Fonction densité de probabilité du rapport de la taille de maille Δx locale sur l'échelle de Kolmogorov η_K .

Le Reynolds turbulent Re_t a une valeur moyenne d'environ 500 dans le domaine. Cette valeur est comprise dans l'intervalle usuel pour des chambres de combustion macroscopiques classiques (entre 100 et 2000) [179].

4.2.3 Analyse du mélange

Afin de modéliser le mélange entre l'air et le carburant, une équation de transport d'un scalaire passif (non-réactif) est ajoutée au système d'équations résolu par le solveur. L'équation de transport de ce scalaire Z s'écrit :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}Z) = \nabla \cdot (D_Z \nabla Z), \quad (4.9)$$

avec le coefficient de diffusion D_Z du scalaire Z pouvant s'écrire $D_Z = \nu / Sc_Z$. Le nombre de Schmidt Sc_Z est pris ici égal à 1.

Le scalaire Z représente la fraction de mélange entre l'air pur ($Z = 0$, imposé à la condition d'entrée "air") et le carburant pur ($Z = 1$, à la condition d'entrée "fuel"). La Fig. 4.11 montre les champs de scalaire Z instantané, moyen et RMS sur les plans A, B, C et D. Le champ de scalaire Z sur le plan d'injection A montre de fortes discontinuités entre le jet à $Z = 0$ (en bleu) et l'injection à $Z = 1$ (en rouge). Le jet, déstabilisé dès son entrée dans la chambre, vient entraîner des poches de fluide à $Z = 1$. Le mélange s'effectue bien dans la zone d'injection et au début de la recirculation centrale. Des inhomogénéités peuvent apparaître dans les plans B et C mais la valeur globale de la fraction de mélange $Z = 0.0486$ est atteinte presque dans tout le domaine. Les valeurs de Z dans le plan A et moyennées temporellement (Fig. 4.11 milieu gauche) montrent comment le jet plaque l'injection $Z = 1$ contre la paroi. L'entrée du fluide à $Z = 1$ dans la chambre est complètement conditionnée à la forte dynamique du jet à $Z = 0$. Le champ RMS de Z montre de fortes variations dans la zone d'interaction du jet et du tube de "carburant". Les valeurs les plus importantes sont obtenues à l'intérieur du tube. Cela indique que le jet rentre dans le tube à $Z = 1$ par intermittence, perturbant ce dernier mais favorise le mélange.

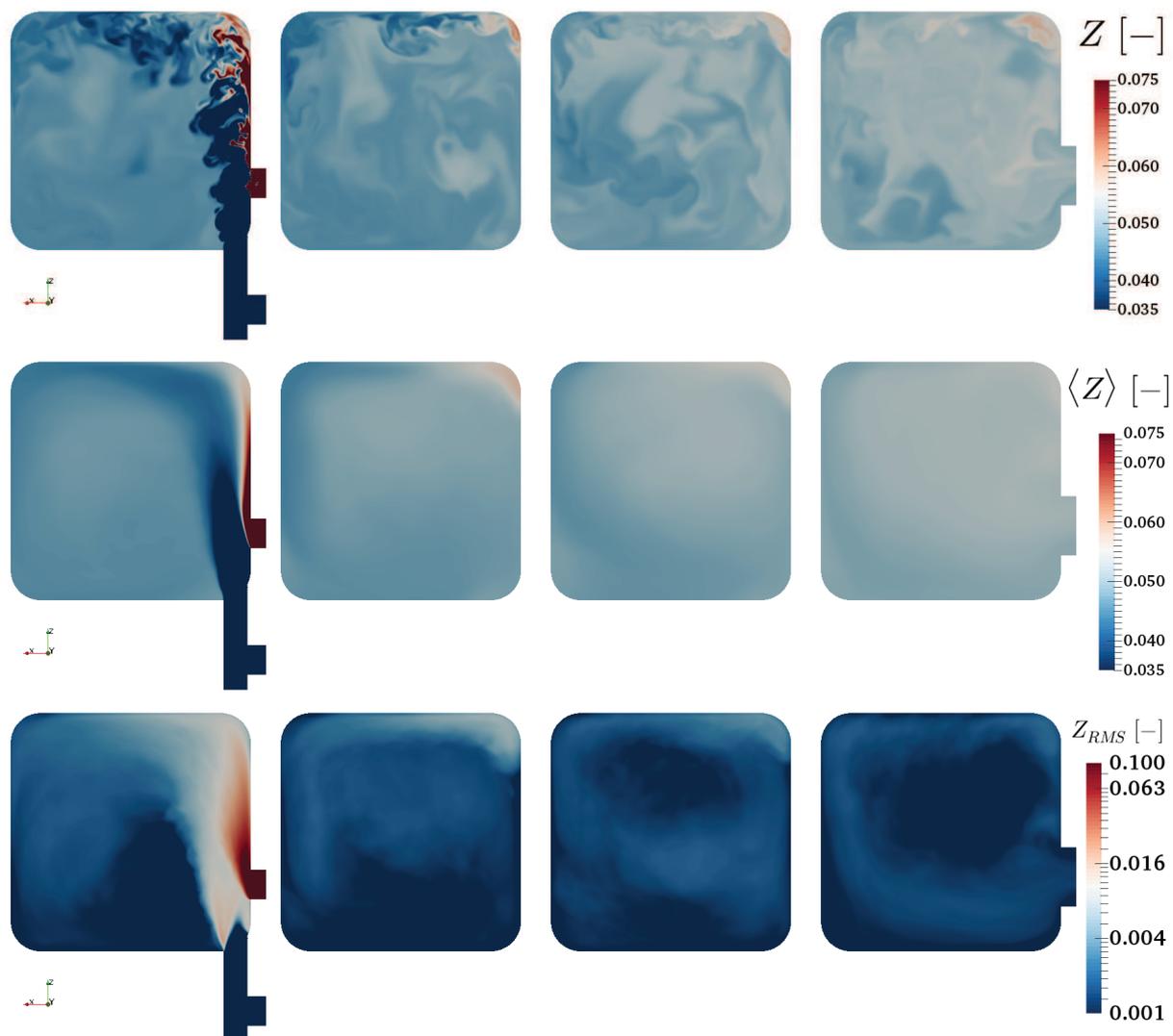


FIGURE 4.11: Champs du scalaire Z instantané (haut), moyen (milieu) et RMS (bas, échelle logarithmique) sur les plans A, B, C et D (de gauche à droite).

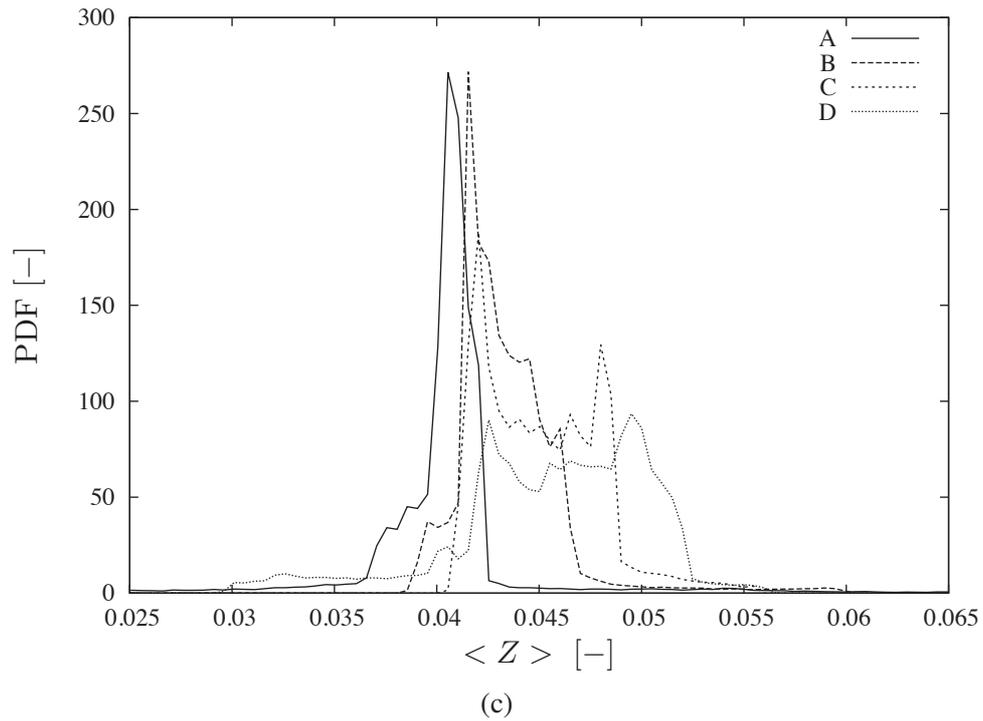
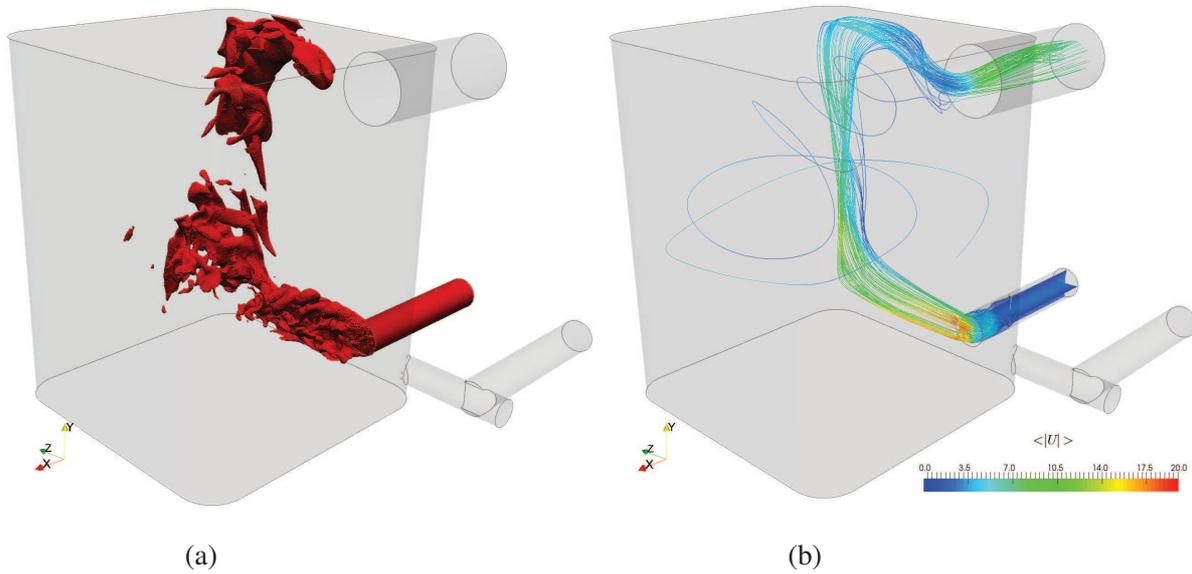


FIGURE 4.12: (a) : Iso-contour $Z = 0.055$ dans le domaine 3D. (b) : Lignes de courant passant par l'injection $Z = 1$ coloriées par la vitesse moyenne. (c) : PDF de la fraction de mélange Z moyenne sur les plans A, B, C et D.

Afin de visualiser les zones riches en fraction de mélange Z , un iso-contour à $Z = 0.055$ (représentant la stœchiométrie dans un mélange méthane/air), soit légèrement supérieur à la valeur moyenne, a été tracée à partir d'une solution instantanée 3D (Fig. 4.12 (a)). Dans la zone de jet, on remarque des poches arrachées à la zone riche en Z située entre le jet (à $Z = 0$) et la paroi. Ces poches forment ensuite des zones riches qui se regroupent le long de l'arrête arrondie du brûleur avant de rejoindre la sortie. Ce chemin préférentiel des zones riches en Z est confirmé par les lignes de courant passant par l'injection de $Z = 1$, tracées sur la Fig. 4.12 (b). Après injection dans la chambre, ces lignes suivent effectivement la paroi puis l'arrête arrondie du domaine et rejoignent la sortie. Dans la perspective d'un écoulement réactif, cette mauvaise dynamique de mélange peut avoir un impact important sur les performances de la combustion : la combustion peut être incomplète et produire de grandes quantités d'imbrûlés.

La distribution de la variable de mélange moyenne $\langle Z \rangle$ est tracée sur la Fig. 4.12 (c), pour les plans A, B, C et D. La PDF dans le plan A montre un pic centré en 0.04. En avançant dans la direction axiale, on remarque que la distribution s'élargit en même temps qu'elle se déplace vers des valeurs plus grandes de Z . Cet effet est dû au mélange par diffusion des poches riches en Z avec les zones plus pauvres, permettant cet étalement de la PDF. La distribution sur le plan D est centrée autour de la valeur moyenne $Z = 0.0486$ mais présente des variations de l'ordre de 10%. Cela prouve que le mélange n'est pas parfait, même vers la fin de l'écoulement.

4.2.4 Distribution en temps de séjour

Comme précédemment indiqué, l'écoulement tourbillonnaire doit mener à une dynamique particulière : des vitesses rapides proches paroi et un cœur central calme. De plus, en raison du faible volume de la chambre, le temps de séjour du fluide est court. Cela peut poser des problèmes dans le cas d'un écoulement réactif où la combustion pourrait ne pas être complète. C'est pourquoi il est intéressant d'analyser le temps de séjour dans notre chambre centimétrique. Pour étudier la distribution en temps de séjour, deux méthodes ont été utilisées : un scalaire Eulérien et des particules Lagrangiennes de type traceurs.

En simulation numérique, il est possible de dériver une équation de transport d'un scalaire représentant un indicateur du temps de résidence [79, 14, 63] :

$$\frac{\partial \tau_{res}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \tau_{res}) = \nabla \cdot (D_{\tau_{res}} \nabla \tau_{res}) + 1, \quad (4.10)$$

avec $D_{\tau_{res}} = \nu / Sc_{\tau_{res}} = \nu$. Ce scalaire τ_{res} est une quantité Eulérienne, homogène à un temps, représentatif du temps qu'une particule fluide a passé dans le domaine depuis qu'elle est entrée. Il constitue un indicateur du temps de séjour des particules fluides mais il n'est pas une évaluation précise car l'équation ne dérive pas de la théorie cinétique des gaz. Le scalaire est imposé à $\tau_{res} = 0$ sur les conditions aux limites d'entrée.

La Fig. 4.13 montre ce scalaire, moyenné en temps, sur les plans A, B, C et D. La zone d'injection présente de toute évidence les valeurs les plus faibles : 0 ms dans les tubes d'injection et autour de 15ms dans la zone de jet. Les valeurs de τ_{res} en proche paroi sont comprises entre 20 et 30 ms. Aussi, ces valeurs sont inférieures à celles trouvées au centre du domaine (au-dessus de 30 ms). Cette observation est cohérente avec la topologie de l'écoulement whirlé qui veut que la zone de recirculation centrale soit stagnante comparée aux zones extérieures. Cette différence de temps de résidence doit alors permettre de maintenir le cœur de gaz chaud dans l'écoulement réactif. Sur la Fig. 4.13, des temps de résidence plus faibles sont observés dans les coins de la géométrie, le long des arêtes arrondies dans la direction y . Cette observation appuie l'analyse sur le chemin préférentiel du fluide injecté par l'entrée de carburant.

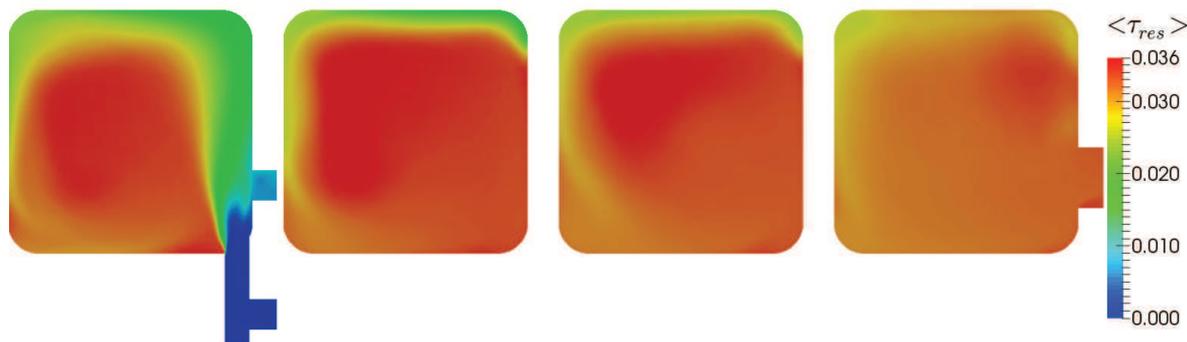


FIGURE 4.13: Champs du scalaire τ_{res} moyen sur les plans A, B, C et D (de gauche à droite), en secondes.

En plus de ce scalaire Eulérien, des particules dites Lagrangiennes ont été utilisées : les équations de la mécanique du point sont résolues pour chaque particule représentée individuellement et ponctuellement. La trajectoire de chaque particule est ensuite suivie dans la simulation. Afin d'étudier la distribution en temps de séjour de l'écoulement, des particules Lagrangiennes de type traceurs ont été utilisées dont l'équation cinématique pour une particule est :

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_f(\mathbf{x}_p), \quad (4.11)$$

avec \mathbf{x}_p est la position de la particule et \mathbf{u}_f la vitesse du fluide à la position de la particule. Ces particules traceurs ont la vitesse de la phase gazeuse à chaque instant et ont un temps caractéristique identique à celui du gaz. Le temps de séjour des particules correspond au temps depuis lequel elles ont été injectées.

Dans la configuration du brûleur centimétrique, des particules traceurs sont injectées à partir des deux entrées du domaine. Dix particules sont injectées par itération sur chacune des entrées pendant 170 ms afin d'atteindre une répartition homogène puis l'injection est stoppée. La Fig. 4.14 montre la localisation des particules dans le domaine à ce même instant, où le nombre de particules est maximum (près de 900 000 particules) : chaque point correspond à une particule. On constate bien que chaque particule a la vitesse locale du fluide comme attendu. De plus des particules sont présentes dans chaque partie du domaine, et le nombre de particules augmente avec le temps. Cela montre que des particules sont piégées dans des zones mortes ou dans des recirculations. Le temps de résidence de ces particules devient alors élevé : plus de 160 ms comme montré par la Fig. 4.14 (b). Le *scatter plot* de la Fig. 4.15 montre le temps de résidence des particules en fonction de la direction y (du plan d'injection vers le plan de sortie) à un instant donné. On constate une grande répartition du temps de séjour quelque soit la localisation de la particule. Certaines sortent du domaine après seulement 2 ms alors que d'autres sont toujours proches de la région d'injection après 100 ms. Ce constat convient aussi bien pour des particules injectées via l'entrée d'air que via l'entrée de carburant. Sur la Fig. 4.15 (b), on peut remarquer quelques lignes dominantes entre 0.5 et 1.5 mm : ce sont des particules injectées par l'entrée carburant mais trop proches des parois du tube d'injection. Leur vitesse est inférieure à celle des particules injectées plus au centre.

A partir de l'arrêt d'injection de particules, le calcul est prolongé pendant près de 200 ms et le temps de séjour des particules est collecté à la sortie du domaine. La distribution de temps de séjour est donnée par la Fig. 4.16. La forme des distributions des particules est similaire entre les deux types d'injection : la plupart des particules sortent très vite du domaine (pic entre 5 et 10 ms) puis la queue de distribution décroît doucement. Certaines particules ne sont toujours pas sorties du domaine après 200 ms. Ces par-

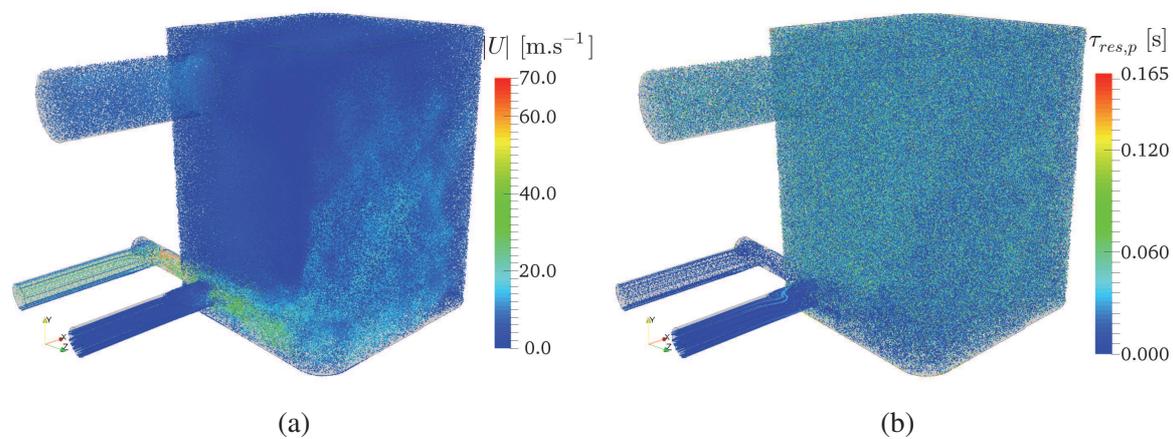


FIGURE 4.14: Visualisation de la vitesse (a) et du temps de séjour (b) des particules traceurs dans le domaine après 170 ms d'injection.

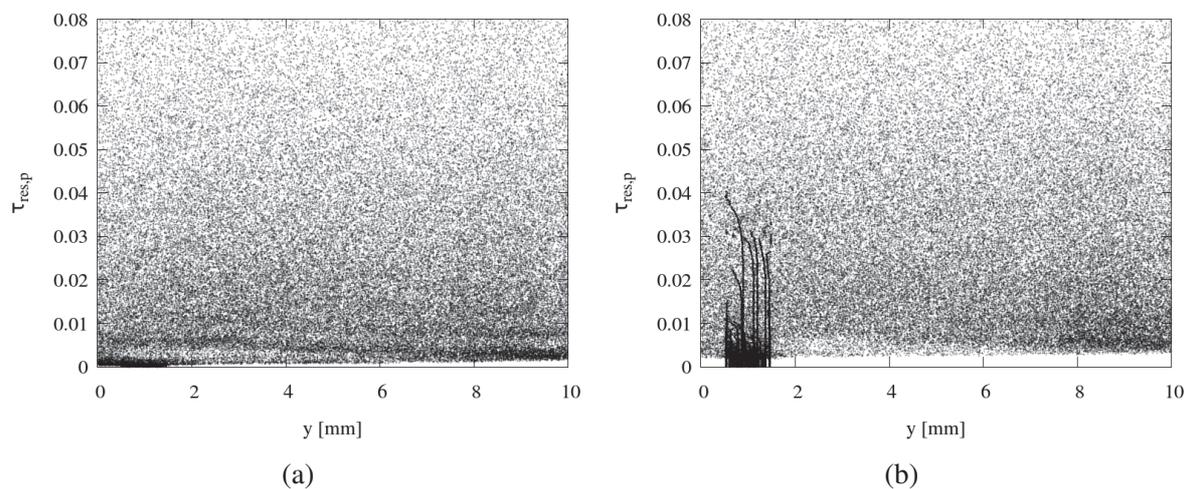


FIGURE 4.15: *Scatter plot* du temps de résidence des particules en fonction de la direction y pour chaque entrée d'injection : entrée "air" (a) et entrée "carburant" (b).

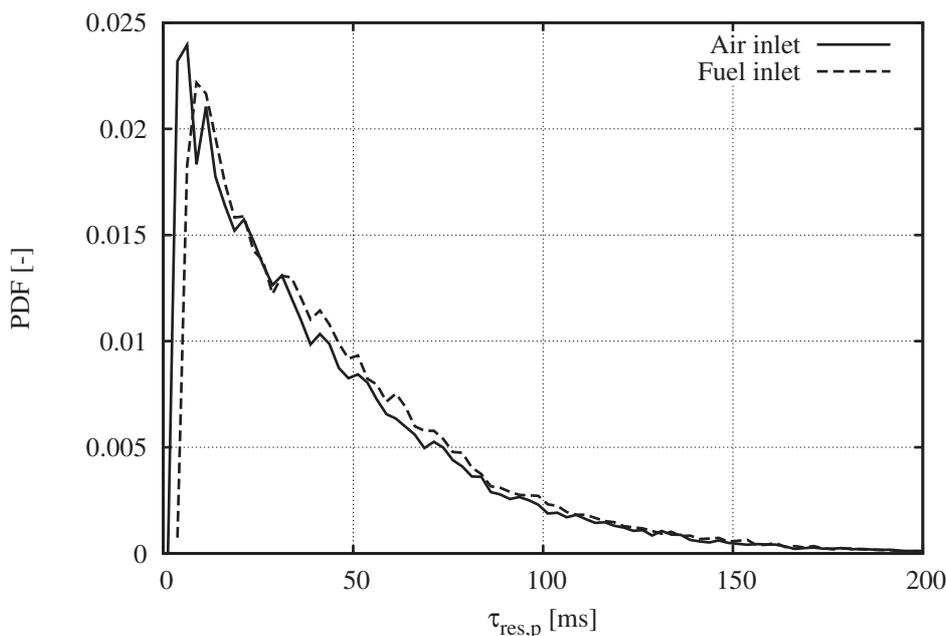


FIGURE 4.16: Distribution du temps de résidence des particules injectées par l'entrée d'air et l'entrée de carburant.

ticules au temps de résidence long sont ainsi piégées dans les zones de recirculation ou les zones mortes de l'écoulement.

En résumé, l'écoulement tourbillonnaire permet de maximiser le temps de séjour et favoriser la zone centrale calme nécessaire à la stabilisation de la flamme dans le cas de l'écoulement réactif. Cette étude en distribution en temps de séjour valide le choix de ce type d'écoulement pour l'étude de la combustion dans des chambres centimétriques.

4.3 Influence des paramètres numériques

4.3.1 Convergence en maillage

Afin de déterminer le maillage permettant le meilleur rapport précision-coût de calcul, une étude en convergence de maillage a été effectuée sur la configuration de l'écoulement non-réactif.

Un maillage de départ, baptisé M1, avec une taille de maille homogène $\Delta x = 100 \mu\text{m}$ de 4.3 millions de tétraèdres a d'abord été créé. Ensuite, deux niveaux de raffinement de maillage automatiques sont appliqués à M1. A chaque niveau de raffinement, chaque cellule est divisée en huit sous-cellules et la taille de maille par deux. Ainsi, les maillages M2 et MREF, comportant respectivement 34.2 et 273 millions d'éléments, ont été obtenus (Tab. 4.1). Ce dernier maillage étant le plus résolu, il est considéré comme le calcul de référence. Les comparaisons entre les maillages sont faites dans le plan d'injection (plan A de la Fig. 4.2) car ce plan contient les vitesses et gradients de vitesse les plus importants du fait de l'interaction des deux jets entrants dans le domaine.

La Fig. 4.17 compare les champs de vitesse dans le plan d'injection entre les trois maillages. La dynamique du jet d'air n'est pas correctement prise en compte avec le maillage le plus grossier M1 : l'ouverture du jet est beaucoup plus large et la vitesse moyenne y est plus élevée, comparé aux résultats

Maillages	M1	M2	MREF
Taille de maille moyenne Δx [μm]	100	50	25
Nombre d'éléments [$\times 10^6$]	4.3	34.2	273.8
Nombre de nœuds [$\times 10^6$]	0.76	6.17	47.99

TABLE 4.1: Caractéristiques des maillages 3D.

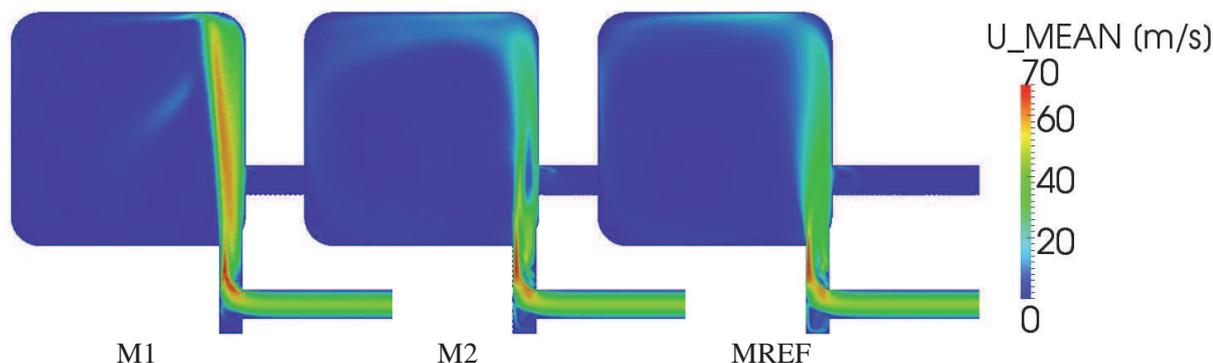


FIGURE 4.17: Champs de vitesse moyenne dans le plan A pour les maillages M1, M2 et MREF.

des maillages M2 et MREF. Le champ de vitesse moyenne obtenu avec M2 est plus proche de celui de MREF, avec un jet plus étroit et l'apparition de la recirculation liée à l'écoulement whirlé. Cependant, une zone calme apparaît à l'intersection entre les deux jets d'entrée. Cet effet peut être lié à un comportement incorrect du modèle de turbulence dans cette zone d'interaction de jets. Afin de préciser l'origine de cet artefact numérique, nous avons poussé plus avant l'étude de l'influence du modèle de turbulence dans la section suivante 4.3.2.

Sur la Fig. 4.18, le scalaire Z représente le mélange entre l'air ($Z = 0$ en noir) et le carburant ($Z = 1$ en blanc) pour les trois maillages considérés. Sur le maillage de référence MREF, le mélange s'effectue rapidement entre les deux jets du fait de la turbulence induite qui produit un mélange homogène autour de la valeur moyenne $Z = 0.0486$ dans tout le reste du domaine. Avec le maillage M1, l'interaction entre les deux jets est incorrectement résolue, ce qui a un fort impact sur le mélange. Celui-ci ne se fait plus par turbulence, mais plutôt par diffusion moléculaire (ou numérique). Ainsi un champ de Z hétérogène est obtenu avec des valeurs oscillant entre 0.0 et 0.1. Le résultat obtenu avec le maillage M2 est beaucoup plus proche de MREF mais présente encore quelques différences similaires au champ de vitesse.

La contribution du modèle de sous-maille "Smagorinsky dynamique" est évaluée par le rapport de viscosité turbulente sur viscosité moléculaire μ_t/μ . D'après la Fig. 4.19, ce rapport est inférieur à 0.2 sur le maillage M3. Dans cette situation, le modèle de turbulence agit tellement peu qu'il n'affecte pas l'écoulement et pourrait être désactivé. En revanche, le maillage M1 présente un rapport de viscosités qui peut atteindre 80 dans la couche de cisaillement du jet d'air et à l'impact du jet sur la paroi. Dans le reste du domaine, le rapport de viscosités montre que l'apport du modèle ne peut être négligé. En revanche, sur le maillage M2, la contribution du modèle de sous-maille n'est importante que dans le jet et au niveau de l'impact sur la paroi opposée.

Un indicateur de la résolution à la paroi consiste à évaluer la distance à la paroi adimensionnée y^+ et à la comparer à la taille de maille utilisée. Cette distance se calcule comme $y^+ = y \frac{u_\tau}{\nu}$, avec $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho} = \sqrt{\mu \frac{\partial u_x}{\partial y}/\rho}$ et τ_w étant respectivement la vitesse de frottement et la contrainte pariétale de cisaillement. La Fig. 4.20 représente la distribution de y^+ sur l'ensemble des points composants

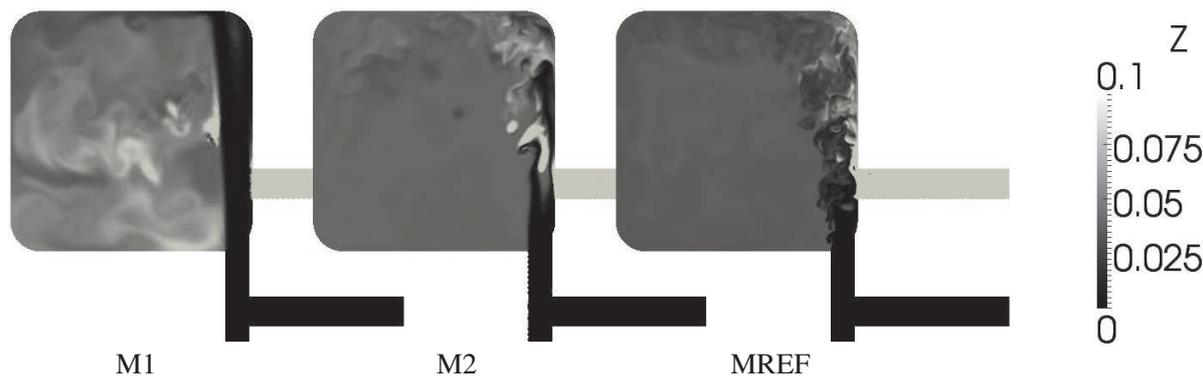


FIGURE 4.18: Champs de fraction de mélange obtenus avec les maillages M1, M2 et MREF. Noir : air. Blanc : carburant.

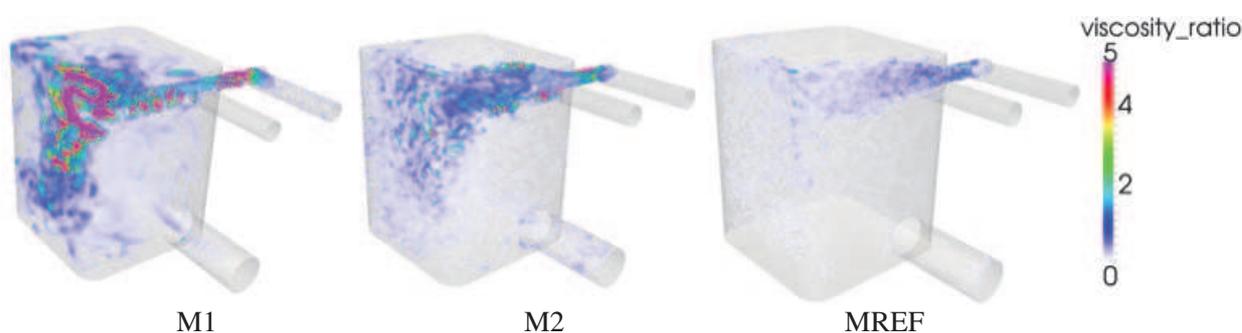


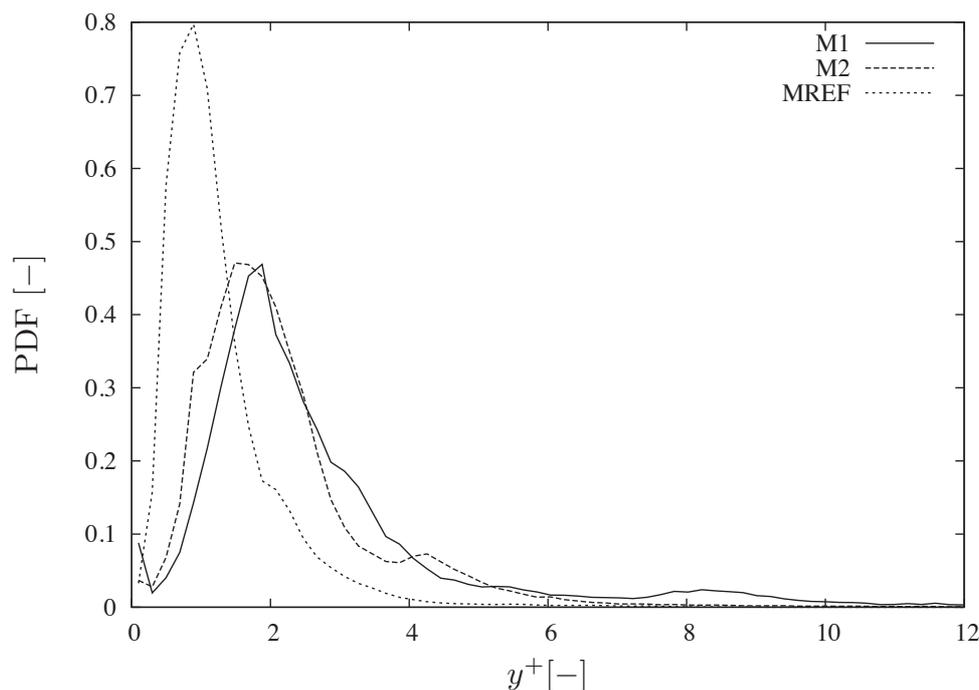
FIGURE 4.19: Rendu volumique du rapport de viscosité μ_t/μ sur les maillages M1, M2 et M3.

la surface du domaine. La valeur pic de y^+ diminue en augmentant la résolution du maillage, ce qui correspond à une meilleure description des gradients de vitesse à la paroi. Le passage du maillage M1 à M2 améliore faiblement la distribution tandis que le maillage MREF apporte de bien meilleurs résultats. La valeur maximale de y^+ pour le maillage M1 est de l'ordre de 10, environ 6 pour M2 et 4 pour MREF, et se situe dans le tube d'injection d'air, juste après le coude. Les valeurs moyennes de distance à la paroi adimensionnées y^+ sont 2.8, 2.2 et 1.3 pour les maillages M1, M2 et MREF respectivement. Globalement, ces valeurs sont donc assez proches de 1.0. Les calculs peuvent être considérés comme résolus en proche paroi (ce qui correspond en anglais à des calculs *Wall-resolved LES*). Aucun modèle de loi de paroi n'a alors été utilisé sur ces maillages. Par ailleurs, cette résolution à la paroi est important pour capter correctement les transferts thermiques dans le cas des écoulements réactifs.

Les performances du code de calcul YALES2 ont été investiguées pour chacun des maillages. Le Tab. 4.2 résume les performances obtenues sur le calculateur Antares du CRIHAN avec un nombre d'éléments par processeur différent pour chaque cas : ce n'est donc pas une étude en *weak scaling*. Cependant, les résultats indiquent un rapport d'environ 16 sur le temps CPU de calcul entre M1 et M2. Cette valeur est le résultat attendu car il correspond à deux effets :

- le nombre d'éléments entre deux niveaux de raffinement est multiplié par huit,
- le pas de temps est divisé par deux entre deux niveaux de raffinement car la taille de maille la plus petite est deux fois plus petite (le pas de temps est basé sur le nombre adimensionnel $CFL = U\Delta t/\Delta x$ car la diffusion n'est pas limitante).

Le passage du maillage M2 à MREF se traduit par une légère dégradation des performances avec un facteur supérieur à 16. Cette dégradation peut s'expliquer par l'augmentation du nombre de communications

FIGURE 4.20: Fonction Densité de Probabilité de la distance à la paroi adimensionnée y^+ .

Maillages	M1	M2	MREF
Temps physique simulé $t_{physique}$ [ms]	100.0	50.0	5.0
Nombre de processeurs N_{procs}	256	512	1024
Temps de calcul t_{calcul} [h]	5.43	22.78	20.96
Temps CPU pour 1ms [h/ms]	13.9	233.3	4292.6
Temps CPU normalisé	1.0	16.8	308.8

TABLE 4.2: Performances de calcul avec les différents maillages sur la machine Antares du CRIHAN.

entre processeurs nécessaires pour le solveur de Poisson¹.

4.3.2 Etudes des modèles de turbulence de sous-maille

La configuration du brûleur centimétrique étudié n'est que faiblement turbulente. L'impact du modèle de sous-maille peut dans certaines situations conduire à des comportements non pertinents. L'influence du modèle de turbulence a été étudiée en testant plusieurs modèles sur les maillages M1 et M2. Le résultat obtenu avec le maillage MREF est toujours considéré comme le calcul DNS de référence. Les modèles Smagorinsky Dynamique (SMD), WALE ainsi que l'approche NO-MODEL (pas de modèle de sous-maille) ont été comparés. Ces différentes modélisations de la turbulence de sous maille sont présentées dans la section 3.4.4.

Les figures 4.21 et 4.22 montrent les champs de vitesse moyenne obtenus avec les maillages M1 et M2, respectivement, pour les différents modèles de turbulence. Ces résultats sont à comparer avec la Fig. 4.17 (MREF). Sur le maillage M1, les modèles SMD et WALE donnent des résultats similaires mais

1. Il est important de noter que ces calculs ont été réalisés en début de thèse. Le code de calcul a largement évolué depuis et de nombreuses optimisations permettant de bien meilleures performances ont été ajoutées.

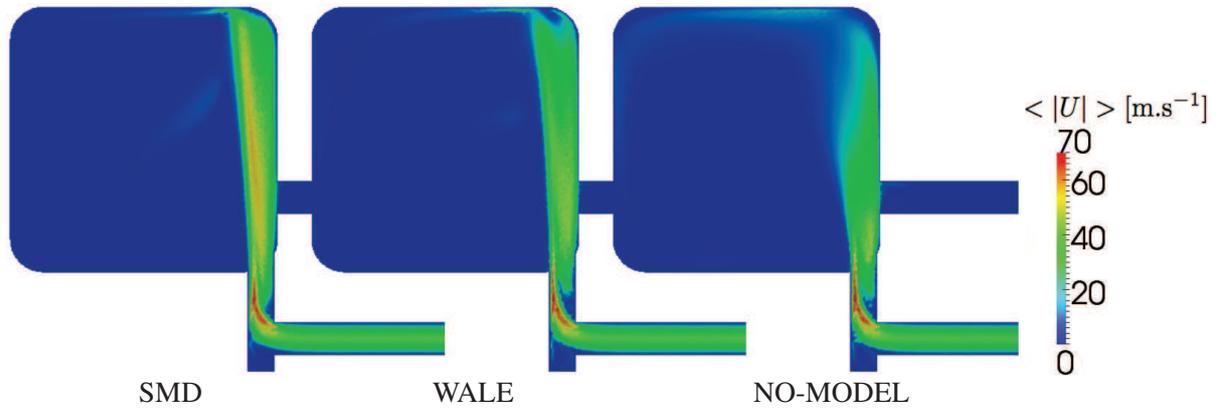


FIGURE 4.21: Champs de vitesse moyenne sur le maillage M1 avec le modèle de viscosité turbulente Smagorinsky Dynamique (a), WALE (b) et l'approche NO-MODEL (c).

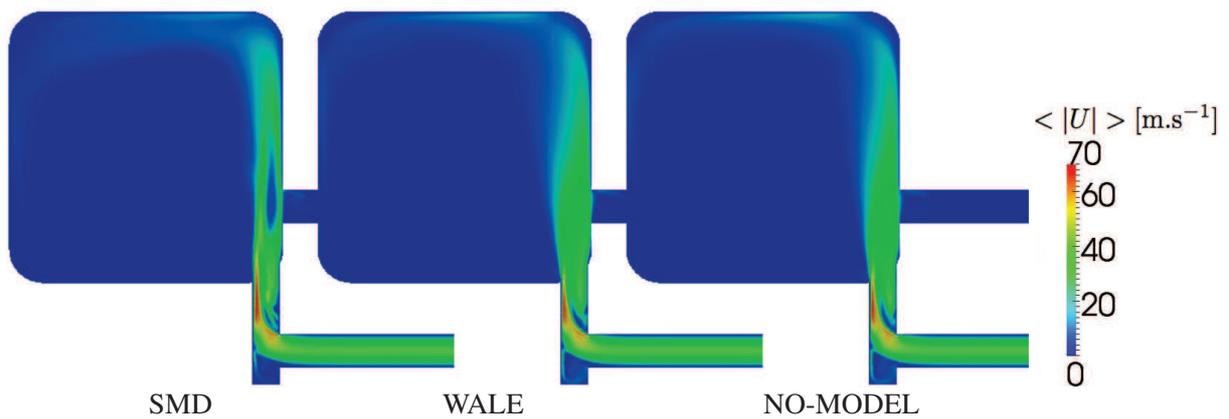


FIGURE 4.22: Champs de vitesse moyenne sur le maillage M2 avec le modèle de viscosité turbulente Smagorinsky Dynamique (a), WALE (b) et l'approche NO-MODEL (c).

Maillages	M1			M2		
	SMD	WALE	NO-MODEL	SMD	WALE	NO-MODEL
Modèles de sous-maille						
Erreur de norme L2 relative [%]	7.8	6.2	2.2	4.4	1.1	0.7

TABLE 4.3: Erreur de norme L2 relative sur la vitesse moyenne par rapport à la référence.

éloignés de la référence : ils modifient la dynamique de l'écoulement dans la zone de jet. L'approche NO-MODEL donne de bien meilleurs résultats avec un champ de vitesse proche du calcul DNS. Les résultats obtenus sur le maillage M2 sont différents. Il a déjà été observé que le modèle Smagorinsky Dynamique donne une zone à vitesse plus faible dans la zone d'intersection des deux jets d'entrée. En revanche, le modèle WALE et l'approche NO-MODEL donnent des résultats similaires, très semblables au calcul de référence.

Afin d'aller plus loin dans cette analyse, une comparaison de profils de vitesse moyenne et RMS le long d'une ligne placée dans le plan d'injection a été réalisée. Les profils de vitesse moyenne de la Fig. 4.23 confirment ce qui a été observé sur les champs précédents. Sur le maillage M1, l'approche sans modèle de sous-maille se montre supérieure aux modèles SMD et WALE. Sur le maillage M2, le modèle WALE et l'approche NO-MODEL sont les plus proches de la référence alors que le modèle SMD montre une zone de vitesse plus faible au milieu du jet. Afin de quantifier les différences, les erreurs relatives de norme L2 ont été calculées sur ces profils. Cette erreur, pour une variable quelconque ϕ , est définie selon

$$\mathcal{E}_{rel,L_2}(\phi) = \frac{\mathcal{E}_{L_2}}{\mathcal{N}_{L_2}(\phi_{exact})}, \quad (4.12)$$

avec $\mathcal{N}_{L_2}(\phi)$ la norme L2 de ϕ et $\mathcal{E}_{L_2}(\phi)$ l'erreur de norme L2 absolue :

$$\mathcal{N}_{L_2}(\phi) = \sqrt{\frac{1}{V_{total}} \sum_i V_i \phi_i^2}, \quad (4.13)$$

$$\mathcal{E}_{L_2}(\phi) = \sqrt{\frac{1}{V_{total}} \sum_i V_i (\phi_i^{exact} - \phi_i)^2}. \quad (4.14)$$

Dans ces expressions, V_i correspond au poids du nœud i et $V_{total} = \sum_i V_i$. La solution "exacte" correspond dans notre cas à la solution de référence, soit le cas DNS obtenu à l'aide du maillage MREF et la variable étudiée est la norme de vitesse moyenne. Les résultats sont rassemblés dans le Tab. 4.3. Ces résultats montrent encore une fois que le minimum d'erreur correspond au maillage M2 associé au modèle WALE ou à l'approche sans modèle avec une erreur ne dépassant pas 1.1 %. Par contre, le modèle SMD dépasse les 4 % d'erreur. Avec le maillage M1, l'approche NO-MODEL atteint les 2.2 % d'erreur tandis que les modèle de sous-maille dépassent les 6 % d'erreur.

Les profils de vitesse RMS (Fig. 4.23) montrent aussi de grandes différences suivant le maillage et le modèle de sous-maille utilisé. Sur le maillage M1, les modèles SMD et WALE ont des profils similaires mais très éloignés de la référence. L'approche sans modèle surestime sensiblement les vitesses RMS. Avec le maillage M2, les profils de vitesse RMS de la référence, du modèle WALE et de l'approche NO-MODEL sont très semblables. Ici encore, le modèle SMD est très éloigné de la référence.

L'ensemble de ces résultats montrent la nécessité d'avoir une résolution suffisante et un modèle de sous-maille adapté si l'on souhaite correctement décrire l'écoulement à l'intérieur de la chambre de combustion centimétrique. Les résultats ont montré la supériorité de l'approche NO-MODEL, c'est-à-dire sans l'utilisation de modèle de sous-maille. Cela indique que la diffusion numérique induite par le

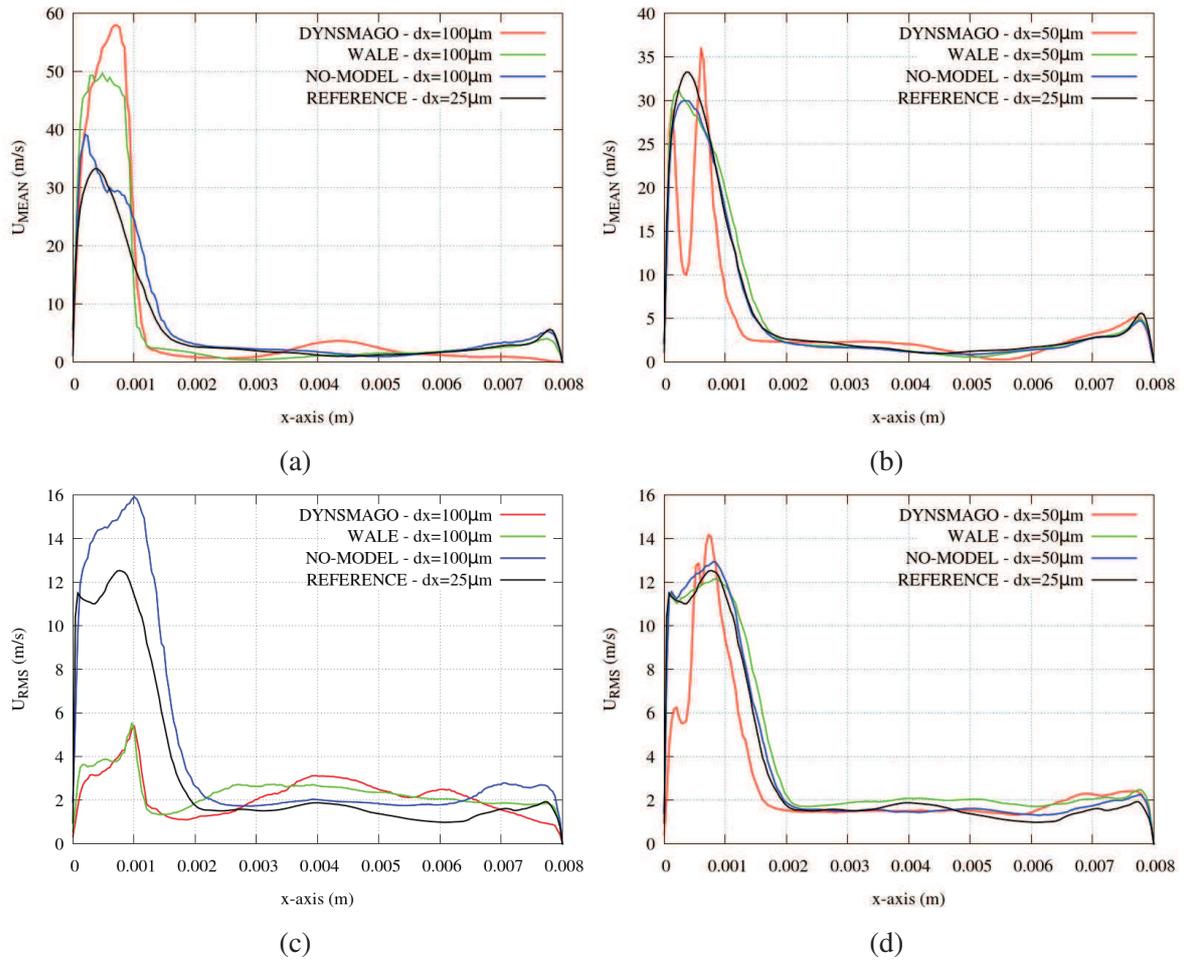


FIGURE 4.23: Profils de vitesse moyenne (haut) et RMS (bas) sur les maillages M1 (gauche) et M2 (droite) en fonction des modèles de turbulence et comparé à la référence MREF.

code est suffisante pour modéliser les plus petites échelles de la turbulence. Cette observation est aidée par le fait que la configuration n'est que faiblement turbulente. Le modèle WALE a montré de meilleurs résultats que le modèle de Smagorinsky dynamique. En effet, le modèle WALE traite mieux les parois et a une meilleure prédiction de la transition à la turbulence. De plus, le modèle impose une viscosité turbulente nulle dans les écoulements cisailés. Dans notre cas, la zone entre le jet et le reste du domaine présente est une couche de cisaillement et la bonne résolution de la base du jet semble primordiale.

4.4 Adaptation de maillage en parallèle

Les calculs LES se proposent de résoudre les grandes structures de la turbulence et de modéliser les plus petites. Cette approche est plus économique que la DNS car le maillage doit être conçu pour ne résoudre que les structures les plus grandes. Ainsi un maillage LES contient moins d'éléments qu'un maillage DNS.

Avec l'augmentation des ressources de calcul, la LES est de plus en plus utilisée sur des géométries complexes (à différencier des configurations académiques simples). L'étude de telles configurations implique l'utilisation de maillages non-structurés ou hybrides. Ce dernier doit être correctement défini pour réaliser un calcul LES valide. Comme montré dans la section précédente, la qualité du maillage influe fortement sur le résultat de calcul. De plus, la résolution locale du maillage sert de paramètre pour les modèles de sous-maille. La qualité globale du maillage s'avère ainsi un paramètre essentiel.

De nombreux travaux ont déjà étudié l'influence de la résolution du maillage sur la qualité d'une simulation LES [27, 234]. Différentes approches existent. Une première piste consiste à comparer la taille de maille à l'évaluation RANS de l'échelle intégrale [1] ou de l'échelle de Kolmogorov [76]. Peu coûteuse, cette approche peut être intéressante mais est limitée par la précision de la solution RANS. Une seconde stratégie consiste à baser la mesure de qualité sur une variation systématique de la grille [126, 73]. Dans ce contexte, Celik *et al.* [29, 28] proposent l'indice de qualité (noté LES_IQ) pour mesurer la qualité d'une simulation LES. Cette approche permet une mesure rigoureuse des erreurs numériques et même des erreurs de modélisation, si l'on considère une variation systématique des modèles. Cependant, elle reste chère car systématique et nécessite des maillages différents mais géométriquement similaires, ce qui est difficile à obtenir sur des configurations complexes, avec des grilles fortement non-uniformes. Une dernière stratégie, basée sur un seul calcul LES, apparaît comme un compromis intéressant. Plusieurs définitions ont été proposées. La plus simple d'entre elles consiste à calculer le rapport entre viscosité de sous-maille et la viscosité moléculaire [29]. L'inconvénient réside dans la valeur objectif à atteindre qui dépend de l'écoulement [27]. D'autres quantités peuvent être considérées comme le rapport entre la dissipation modélisée sur la dissipation totale (dissipation modélisée et moléculaire) [78] ou sur des corrélations en deux points [52]. Enfin, Pope [184] propose de considérer le rapport entre l'énergie cinétique turbulence modélisée et celle résolue, indiquant qu'un calcul LES bien résolu doit permettre de résoudre au moins 80 % de l'énergie cinétique turbulence.

Cependant, créer un maillage alliant à la fois qualité et nombre d'éléments le plus faible possible pour rester économique peut s'avérer difficile. Des études ont déjà montré la faisabilité de l'adaptation de maillages non-structurés dans des codes éléments finis [93, 4, 58, 86, 94, 102, 101]. Les maillages obtenus deviennent cependant fortement anisotropes. Pour un code volumes finis, comme l'est YALES2, le maillage doit rester suffisamment isotrope, afin de ne pas introduire d'erreurs de troncature trop importantes. Peu d'études ont été menées sur l'adaptation de maillage pour des calculs LES sur configurations complexes. Hertel *et al.* [99] ont développé une méthode basée sur des critères physiques (gradients de

vitesse, viscosité turbulente, énergie cinétique turbulente). L'adaptation a été menée sur une configuration relativement simple de colline périodique ("*periodic hill*") et seulement avec une méthode de bougé de points (*r-refinement method*). Les récents travaux de Falese [66, 67] se révèlent les plus complets. En effet, il a étudié l'écoulement aérodynamique dans un injecteur swirlé de chambre de combustion aéronautique via des simulations numériques LES sur maillages non-structurés. L'adaptation a été réalisée au moyen d'une librairie (MMG3D), appelée dans un programme externe au code de calcul LES et de façon séquentielle.

Dans cette section, une stratégie d'adaptation de maillage en parallèle, intégrée au code YALES2, est proposée afin d'améliorer la qualité et adapter un maillage en parallèle. L'objectif est ici de trouver un maillage optimal pour des calculs parallèles LES de géométries complexes. Tout d'abord, sont présentés deux critères mesurant la qualité de la solution LES basée sur un maillage initial. Une stratégie d'adaptation en parallèle de ce maillage initial, basée sur ces critères et la librairie d'adaptation MMG3D, est ensuite proposée puis appliquée sur le brûleur centimétrique MESO-CORIA.

4.4.1 Critères d'adaptation

Comme expliqué précédemment, l'approche LES résout les grandes structures de la turbulence alors que les plus petites sont modélisées. Les structures de la turbulence plus petites que la taille de maille sont prises en compte par le modèle de sous-maille. Ce dernier est dépendant de la taille de filtre, qui correspond à la taille de maille quand un filtrage implicite est utilisé. Quand le maillage permet de résoudre l'ensemble des échelles de la turbulence, l'influence du modèle de sous-maille devient négligeable et le calcul LES devient un calcul DNS. En d'autres termes, une dépendance au maillage ne peut plus être observée. Or, quand la LES est utilisée, la qualité du maillage a une incidence sur le résultat obtenu. Un champs LES résolu peut être décomposé, par décomposition de Reynolds, entre le champs moyen (le même que celui résolu avec une approche RANS) et le champs de turbulence résolu. La procédure d'adaptation de maillage se doit d'assurer une résolution correcte de l'ensemble du champ résolu. A partir de la décomposition de Reynolds, cela signifie que la procédure d'adaptation doit assurer à la fois une résolution précise du champs moyen, et résoudre explicitement les grandes échelles de la turbulence. Deux critères simples sont définis ci-après.

4.4.1.1 Critère sur les gradients moyens Q_{c_1}

Un premier critère peut être créé afin d'assurer une bonne résolution de la partie moyenne du champs résolu par LES. Ce critère est défini afin de minimiser l'erreur de discrétisation des gradients de l'écoulement moyen. Un exemple connu de cette contrainte est l'écoulement turbulent proche paroi, où un maillage fin doit être utilisé dans la direction normale à la paroi pour prédire précisément les forts gradients de vitesse dans cette direction. Ce critère n'est pas spécifique à la LES mais existe aussi avec l'approche RANS. Dans cette étude, le critère est défini à partir d'une estimation d'erreur déjà proposée dans des méthodologies d'adaptation de maillage [93, 4, 58].

A partir de cette estimation d'erreur, on peut montrer que l'erreur d'interpolation g^* d'une quantité g dans un espace discret avec une taille de maille Δ est limitée par une quantité, appelée Q_{c_1} , définie selon

$$Q_{c_1} = \Delta^2 \max_{i=1,2,3} \left\{ \left| \frac{\partial^2 g^*}{\partial x_i^2} \right| \right\}. \quad (4.15)$$

Dans cette équation, on considère la valeur maximale de la dérivée seconde dans chacune des trois directions de l'espace. Il faut noter que dans le cas où cette procédure est appliquée à un champ vectoriel

u à la place d'un champ scalaire, l'Eq. (4.15) est modifiée de la façon suivante :

$$Q_{c_1} = \Delta^2 \max_{i,j=1,2,3} \left\{ \left| \frac{\partial^2 u_j^*}{\partial x_i^2} \right| \right\}. \quad (4.16)$$

Dans ce cas, le maximum est recherché sur chaque direction de l'opérateur de dérivation mais aussi sur chaque composante du champ vectoriel.

On définira le premier critère comme la minimisation de Q_{c_1} et son homogénéisation pour mettre les points là où on a des erreurs, appliquée au champ moyen de vitesse dans le domaine de calcul. Une interprétation spécifique dans le contexte LES peut être donnée. En considérant la moyenne d'une composante de vitesse résolue LES $\langle \bar{u} \rangle$, ce critère signifie que le filtrage du champs résolu, $\overline{\langle \bar{u} \rangle}$ doit être proche de la moyenne du champ résolu $\langle \bar{u} \rangle$, car le champ moyen ne doit pas posséder de contribution de sous-maille. Un développement en série de Taylor de l'opérateur de filtrage [11] mène à l'expression

$$\overline{\langle \bar{u} \rangle} = \langle \bar{u} \rangle + \frac{\Delta^2}{24} \frac{\partial^2 \langle \bar{u} \rangle}{\partial x_i^2} + \mathcal{O}(\Delta^4), \quad (4.17)$$

ce qui conduit à la minimisation du terme en $\Delta^2 \partial^2 / \partial x_i^2$, défini comme premier critère Q_{c_1} .

4.4.1.2 Critère sur la turbulence Q_{c_2}

Un second critère peut être défini afin d'assurer une résolution explicite suffisante des échelles de la turbulence et garantir la validité de l'approche LES dans l'ensemble du domaine [29]. Pour être valide, les plus petites échelles résolues doivent être suffisamment éloignées des plus grandes échelles anisotropes. Ces plus petites échelles résolues doivent se trouver dans la zone inertielle, où un comportement universel du transfert d'énergie est attendu, autorisant une modélisation précise des échelles encore plus petites (voir section 3.4). En considérant une turbulence pleinement développée avec un spectre classique de Kolmogorov, on peut montrer que suffisamment d'échelles sont résolues si plus de 80% de l'énergie cinétique turbulente totale est explicitement résolue [184]. Le second critère Q_{c_2} peut alors être défini comme [165] :

$$Q_{c_2} = \frac{E_{sgs}}{E_{sgs} + E_R} \leq 0.2, \quad (4.18)$$

avec E_{sgs} l'énergie cinétique turbulente de sous-maille et $E_R = \frac{1}{2} \langle \bar{u}'_i \bar{u}'_i \rangle$ l'énergie cinétique turbulente résolue. L'énergie cinétique turbulente modélisée n'est pas explicitement connue dans un contexte LES, mais elle peut être évaluée à l'aide de la viscosité de sous-maille ν_t donnée par le modèle, selon

$$E_{sgs} = C \left(\frac{\nu_t}{\Delta} \right)^2, \quad (4.19)$$

avec la constante $C \approx 100$ [184, 237]. La viscosité turbulente est connue et varie selon la taille de filtre avec une loi en puissance 4/3 [133]. Cela permet de prédire une nouvelle taille de maille Δ_a à partir de la taille de maille initiale Δ_i en respectant le second critère Q_{c_2} :

$$\Delta_a = \Delta_i \left(\frac{0.2}{Q_{c_2,i}} \right)^{3/2}, \quad (4.20)$$

où $Q_{c_2,i}$ est la valeur du second critère sur le maillage initiale.

On peut noter ici que le critère Q_{c_1} est relatif alors que Q_{c_2} est absolu. Ce dernier impose un taille de maille locale afin de répondre à sa contrainte, ce que ne fait pas Q_{c_1} .

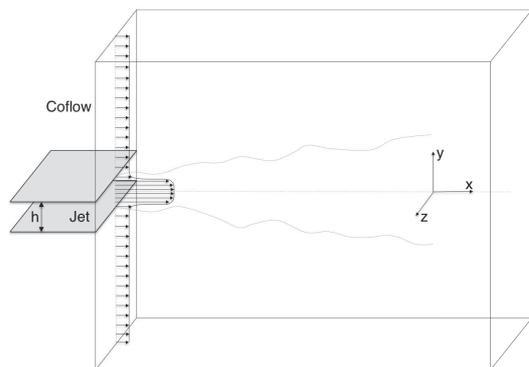


FIGURE 4.24: Schéma de la configuration jet plan turbulent.

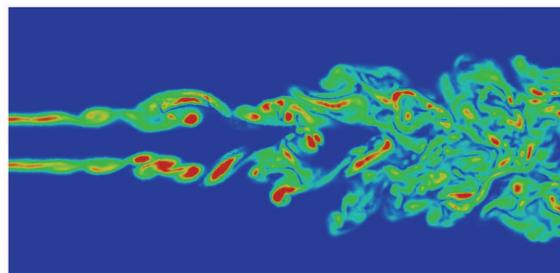


FIGURE 4.25: DNS du jet plan turbulent : coupe centrale colorée par la norme de la vorticité.

4.4.2 Evaluation des critères

4.4.2.1 Application à un cas 3D de jet plan turbulent

Les critères ont été calculés sur une configuration académique 3D simple : un jet plan turbulent, similaire à la configuration étudiée par Silva et Métais [50]. Cette application consiste en un jet entrant dans un écoulement co-courant (voir Fig. 4.24) avec une vitesse d'entrée approchée par un profil en tangente hyperbolique [212] :

$$U_x(x=0, y, z) = \frac{U_j + U_c}{2} + \frac{U_j - U_c}{2} \tanh\left(\frac{h}{4\theta} \left(1 - \frac{2|y|}{h}\right)\right), \quad (4.21)$$

où h est la hauteur du jet, $U_j = 1.091$ est la vitesse centrale du jet, $U_c = 0.091$ la vitesse du co-courant, et θ l'épaisseur de la quantité de mouvement fixée à $h/30$. Les vitesses moyennes dans les directions y et z sont imposées à zéro. La taille du domaine de calcul est de $12.4h \times 12h \times 2.9h$ dans les directions axiale, verticale et transverse. Les conditions aux limites sont imposées comme parois glissantes dans la direction y et périodiques dans la direction z . Dans ce type de jet, on observe des tourbillons de Kelvin-Helmholtz se former dans la région initiale du jet [90]. Ensuite, en fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement, ces structures cohérentes donnent naissance à une turbulence pleinement développée.

Dans cette étude, le nombre de Reynolds est imposé à $Re = \Delta U h / \nu = 3000$, avec $\Delta U = U_j - U_c$. Un calcul DNS a d'abord été réalisé afin d'obtenir une solution de référence. Le maillage est composé de 49.3 millions de tétraèdres avec une taille de maille globalement uniforme, $\Delta x = 0.04h$, comme dans Silva et Métais [50]. La Fig. 4.25 montre la dynamique du jet à travers la norme de la vorticité $|\vec{\omega}| = |\nabla \times \vec{u}|$. On peut identifier des instabilités de Kelvin-Helmholtz se développer au pied du jet. Ensuite, une seconde instabilité grandit, menant alors le jet à une turbulence développée. Cette configuration de jet plan turbulent se prête naturellement à l'évaluation des critères présentés précédemment car elle présente de forts gradients de vitesses ainsi qu'une zone de l'écoulement très turbulent.

Un premier calcul LES a été réalisé avec les mêmes paramètres numériques mais avec un maillage grossier composé de seulement 1.7 millions de tétraèdres, avec une taille de maillage allant de $0.04h$ à l'entrée du domaine jusqu'à $0.8h$ à la sortie. Le modèle Smagorinsky dynamique [77, 135] a été utilisé pour modéliser la turbulence de sous-maille. Les critères Q_{c1} et Q_{c2} sont calculés et les champs sur un plan de coupe central sont montrés Fig. 4.26. Au début de l'écoulement, les fortes valeurs de Q_{c1} montrent que la contrainte majeure sur le maillage est due à la couche de cisaillement entre le jet et le

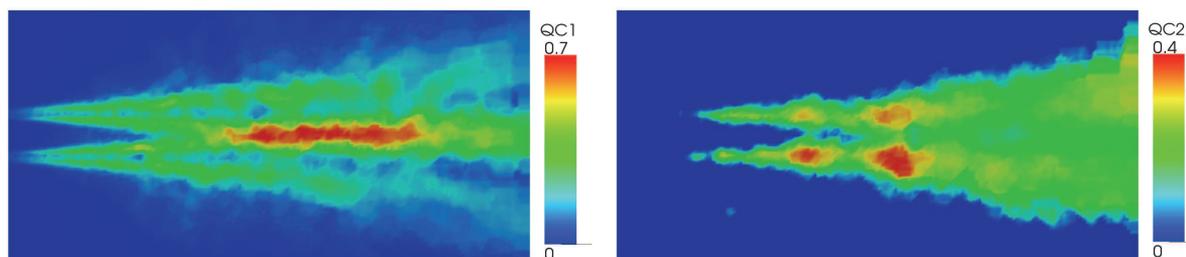


FIGURE 4.26: Plan central coloré par Q_{c1} (gauche) et Q_{c2} (droite) afin d'évaluer la qualité du maillage LES initial.

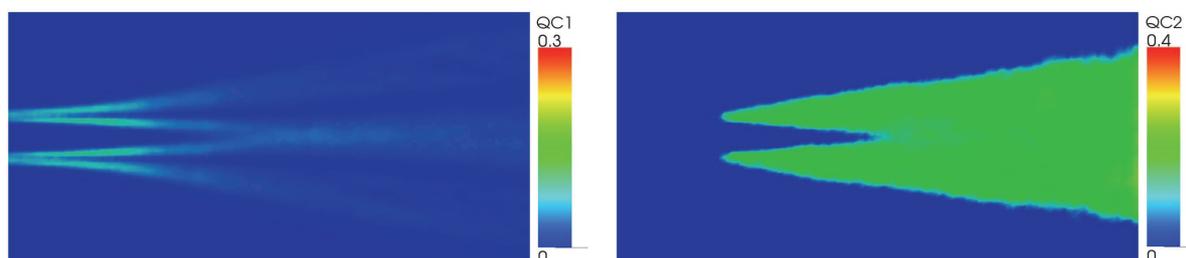


FIGURE 4.27: Coupe centrale colorée par Q_{c1} (gauche) et Q_{c2} (droite) avec le second maillage LES, adapté depuis le maillage LES initial.

co-courant, où les gradients de vitesse moyenne sont élevés. En aval de l'écoulement, les échelles de la turbulence se développent selon le scénario de transition classique dans une couche de cisaillement libre : Q_{c2} augmente d'abord dans cette couche de cisaillement puis ensuite dans tout le jet turbulent, après la fin du cœur potentiel.

Un second calcul LES est réalisé en utilisant un maillage adapté suivant les critères Q_{c1} et Q_{c2} , composé de 3.4 millions d'éléments. La taille de maille varie de $0.04h$ à $0.3h$. Ce nouveau maillage permet de minimiser Q_{c1} et respecter $Q_{c2} < 0.2$ comme montré par la Fig. 4.27. L'influence du maillage sur les statistiques de vitesse est montré par la Fig. 4.28. La Fig. 4.28 (a) compare les profils de vitesse axiale moyenne pris à différents plans suivant l'axe x . Le calcul LES initial montre quelques désaccords avec les résultats DNS dans la zone de cisaillement du fait d'une discrétisation insuffisante des gradients moyens de vitesse. Le second calcul LES corrige cet effet et donne un meilleur accord avec la DNS. Les différences entre les résultats DNS et le premier calcul LES sont plus prononcées sur les quantités RMS, représentées par la Fig. 4.28 (b)-(d). Ici, le manque de résolution des échelles de la turbulence sur le calcul LES est clairement observé. Le maillage LES adapté permet de mieux capter la turbulence de l'écoulement et mène à un meilleur accord à la DNS. Il est important de noter qu'un accord exact des RMS entre résultats DNS et LES ne peut être attendu, car une part du champ turbulent n'est pas résolu en LES.

Ce premier cas simple a permis de démontrer la pertinence de la stratégie d'adaptation de maillage basée sur des critères objectifs pour une configuration dont l'écoulement évolue vers un état pleinement turbulent.

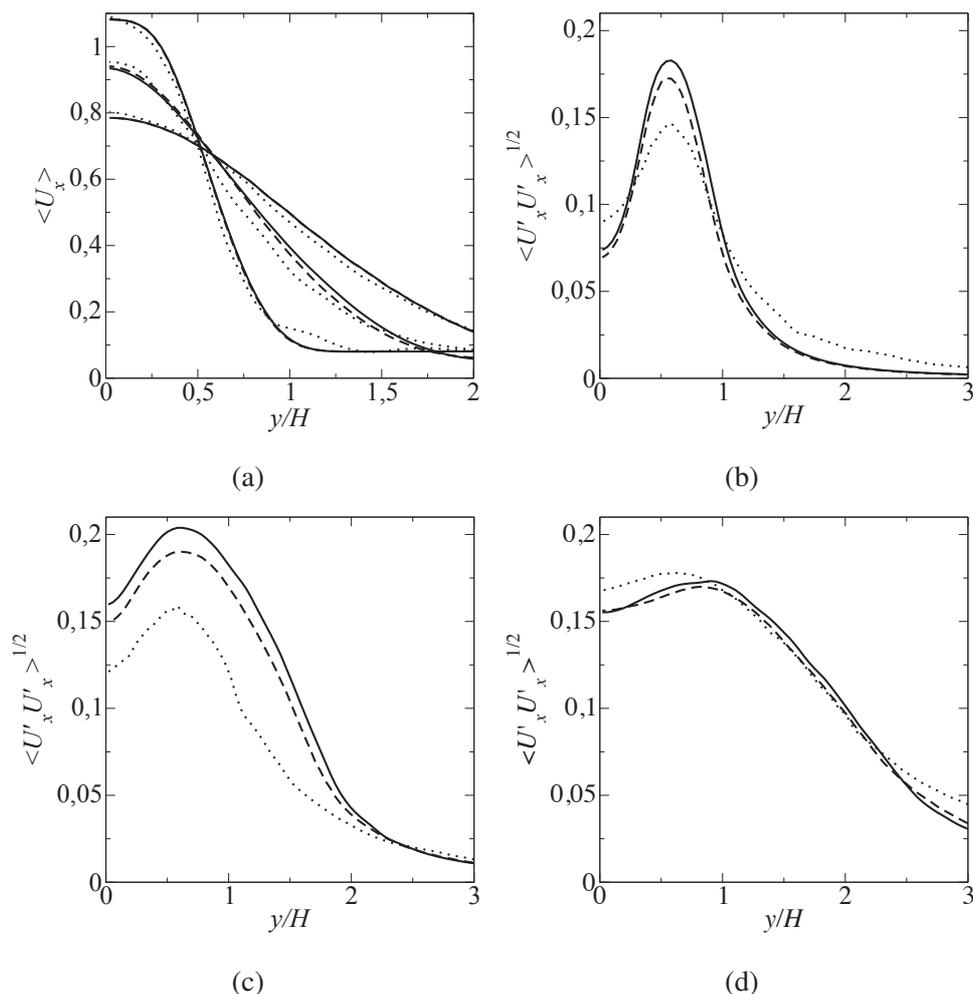


FIGURE 4.28: Comparaison des statistiques sur le jet plan turbulent : DNS (—), LES initiale (···) et seconde LES (— —). Profils de vitesse moyenne sur trois coupes : à $x/h = 4, 8$ et 12 (a) et profils de vitesse RMS à $x/h = 4$ (b), 8 (c) et 12 (d).

4.4.2.2 Application à un cas test 3D d'écoulement turbulent dans une conduite.

Ce second cas test traite d'un écoulement turbulent dans une conduite, avec paroi non-glissante. La configuration est similaire au calcul DNS de Wu et Moin [233] réalisé sur maillage structuré composé de 67.7 millions d'éléments. Une condition périodique est utilisée entre l'entrée et la sortie du domaine, avec un terme de forçage afin d'assurer un débit constant. Le nombre de Reynolds basé sur la vitesse moyenne de l'écoulement et le diamètre $2R$ de la conduite est 5300. Un calcul LES initial est réalisé avec une grille de 1.1 millions de tétraèdres dont la taille des arêtes augmente de $0.08R$ à la paroi jusqu'à $0.15R$ au centre de la conduite. Les profils radiaux des quantités Qc_1 et Qc_2 sont montrés sur la Fig. 4.29. La valeur de ces deux critères est importante à la paroi, montrant qu'un raffinement de maillage est nécessaire dans cette zone. C'est une caractéristique connue des écoulements confinés, où la première maille à la paroi doit avoir une taille approchant une distance à la paroi adimensionnée de l'ordre de 1 [184]. Pour ce premier calcul LES, cette distance y^+ vaut environ 10. Un maillage LES adapté a été construit à partir de cette analyse. Il est composé de 23 millions d'éléments, hexaédriques en proche-paroi puis tétraédriques au centre de la conduite. La taille de maille augmente de $0.008R$ à $0.12R$.

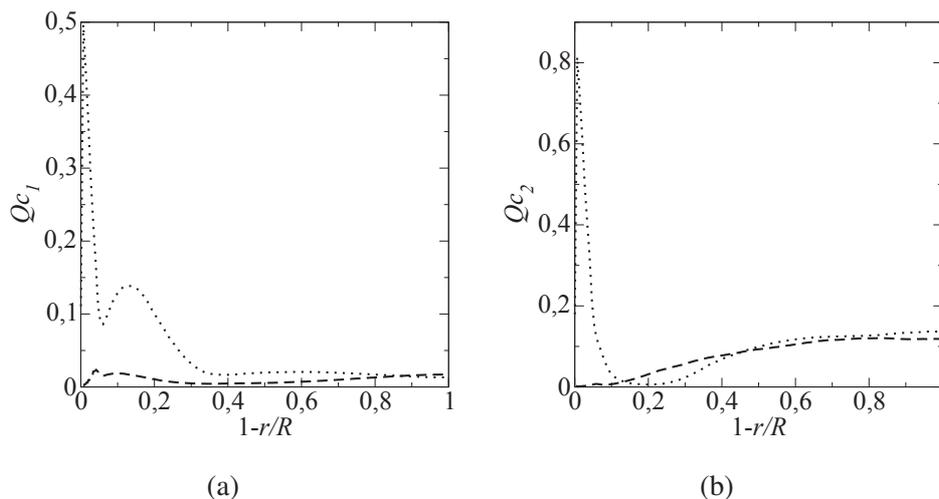


FIGURE 4.29: Profils des critères Q_{c1} (a) et Q_{c2} (b) sur le maillage LES initial (···) et pour le maillage LES adapté (—) sur le cas test d'écoulement turbulent dans une conduite.

Ce nouveau maillage LES permet de respecter les critères Q_{c1} et Q_{c2} , comme montré par la Fig. 4.29. La

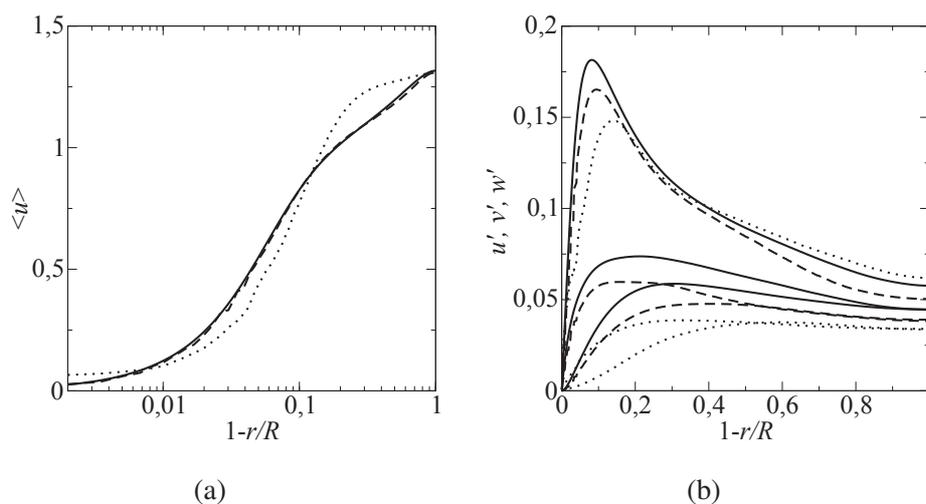


FIGURE 4.30: Profils de vitesse moyenne (a) et RMS (b) sur le cas test d'écoulement turbulent dans une conduite : DNS (—), LES initiale (···) et seconde LES (—).

Fig. 4.30 montre l'influence du maillage sur des quantités statistiques, comparées aux résultats DNS de Wu et Moin [233]. Comme attendu, le maillage LES initial est trop grossier pour permettre un bon accord avec la DNS. Cela est dû à une discrétisation insuffisante des gradients de vitesse moyenne en proche paroi. De plus les valeurs RMS sont fortement sous-estimées et les pics de fluctuations sont décalés vers le cœur de la conduite. Le calcul LES sur le maillage adapté améliore ce comportement. Un très bon accord est trouvé sur les profils de vitesse moyenne et les positions des pics de RMS sont mieux prédits. Comme déjà observé précédemment, la prédiction des RMS avec un calcul LES est obligatoirement sous-estimée en comparaison à un résultat DNS car la fluctuation de sous-maille n'est pas connue en LES.

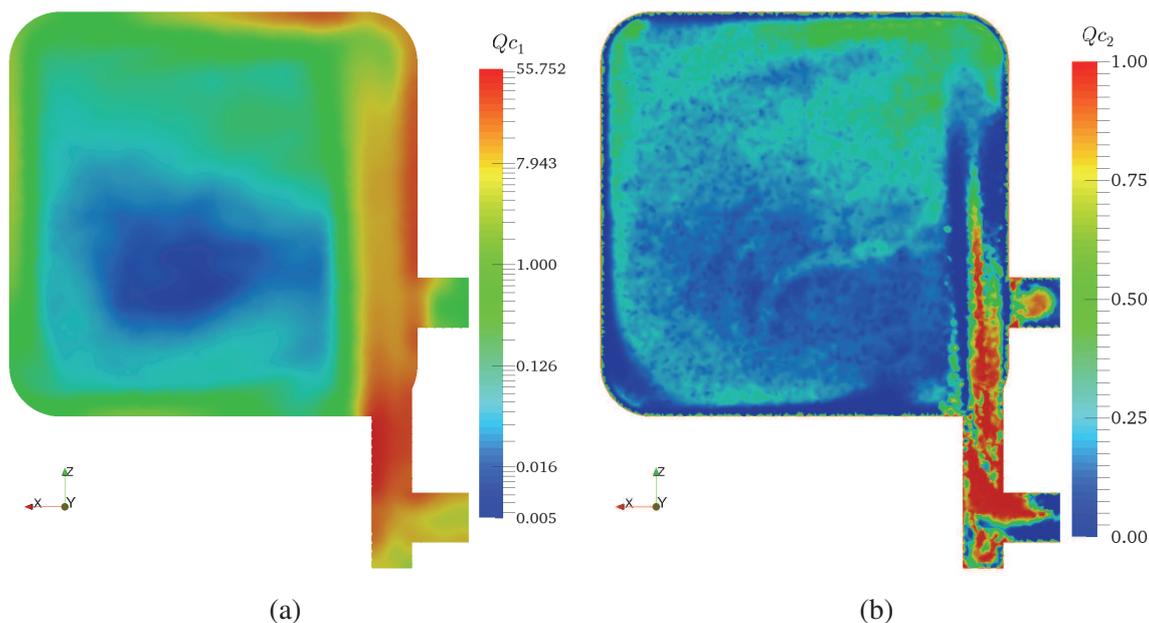


FIGURE 4.31: Critères Q_{c1} et Q_{c2} obtenus à partir des calculs sur maillage M1 de la configuration non-réactive MESO-CORIA.

4.4.2.3 Application des critères au brûleur centimétrique MESO-CORIA

Les critères ont ensuite été calculés sur la configuration du brûleur centimétrique MESO-CORIA. Les résultats statistiques issus du calcul avec le maillage M1, d'environ 4 millions d'éléments, ont été utilisés afin de calculer ces critères. La Fig. 4.31 montre les critères obtenus dans le plan d'injection. Le critère Q_{c1} montre une grande disparité dans la description des gradients de vitesse moyenne. La zone d'injection ainsi que la zone de jet manque de résolution pour les gradients, de même que la région en proche paroi. En revanche, la zone centrale plus calme montre une bien meilleure résolution. Le critère Q_{c2} indique que l'énergie cinétique turbulence est quasiment modélisée dans la zone de jet ($Q_{c2} = 1$). Dans la zone d'impact du jet, Q_{c2} vaut environ 0.5, ce qui reste élevé. Dans le reste du domaine, Q_{c2} est inférieur ou égal à 0.25, valeur proche de la recommandation de Pope [184] de 0.2.

Cette analyse montre la nécessité d'adapter le maillage M1 afin d'obtenir de meilleurs résultats sur les critères.

4.4.3 Méthodologie d'adaptation en parallèle sur configuration complexe

Avoir un maillage correct pour étudier de façon précise l'écoulement fluide est obligatoire. Dans le cas de configurations simples, il est aisé de construire une grille en plaçant une forte densité de maille dans les zones d'intérêt et une densité plus faible en dehors de ces zones. Cette construction peut se faire facilement, de façon non automatique, à l'aide de logiciels de maillage.

Sur des configurations complexes, ce travail peut aussi être effectué mais il nécessite beaucoup de temps et d'expérience. De plus, on ne connaît pas la solution a priori donc aucun critère n'assure une résolution suffisante pour capter correctement tous les phénomènes physiques. Pour éviter ces inconvénients, l'utilisateur peut augmenter a priori la densité de la grille. Cela provoque un nombre d'éléments plus important que nécessaire et le coût de calcul s'en trouve affecté.

On se propose ici de développer une méthodologie d'adaptation de maillage en parallèle. Différentes

stratégies d'adaptation en parallèle existent dans la littérature [26, 44, 39, 56] mais elles ne remplissent pas l'ensemble des contraintes désirées. L'objectif est ici de produire des maillages répondant à des critères de qualité et de quantité (nombre d'éléments total). Cette méthode doit être capable de gérer des maillages 3D sur géométries complexes et pouvant contenir plusieurs millions d'éléments. L'algorithme doit fonctionner en parallèle afin de diminuer le temps d'adaptation et être capable de fonctionner sur les supercalculateurs. Dans cet objectif, la librairie de remaillage MMG3D est utilisée.

4.4.3.1 Librairie d'adaptation MMG3D

MMG3D est un remaillieur tétraédrique entièrement automatique [55, 51]. Il est développé à l'INRIA par Cécile Dobrzynski et Pascal Frey depuis 2010. La version 4.0 (celle utilisée au cours de ces travaux) est distribuée sous licence GNU (*General Public License*) et est disponible sur https://gforge.inria.fr/frs/?group_id=4307². Entièrement codée en langage C, la version 4.0 comporte environ 55000 lignes de code source et doit être couplée à la librairie de partitionnement SCOTCH [36].

Partant d'un maillage composé de tétraèdres, cette librairie le modifie de façon itérative en respectant un tenseur de métrique. Ce tenseur prescrit une taille et une direction pour les arêtes du maillage, ce qui implique que le maillage résultant peut être anisotrope. Le code est basé sur des modifications locales du maillage. L'algorithme d'adaptation est décomposé en deux parties :

1. la longueur des arêtes est analysée par rapport à la métrique demandée : les plus longues sont coupées, les plus courtes supprimées, et une version anisotrope du noyau de Delaunay est implémentée pour insérer les points dans le maillage,
2. quand la densité de maillage est en accord avec la prescription, une phase d'optimisation effectue des opérations d'échanges d'arêtes (*edge swapping*) et de relocalisation de points.

De plus, MMG3D permet de traiter des problèmes de déplacement de corps : quand un déplacement est prescrit sur une partie de la frontière, le maillage final généré sera tel que les points de la surface auront bougé en accord avec ce déplacement. Cette fonctionnalité permet ainsi d'avoir un maillage avec un corps rigide se déplaçant dans le domaine. Cependant, celle-ci ne sera pas exploitée dans cette thèse.

4.4.3.2 Couplage parallèle avec YALES2

La version de MMG3D utilisée permet d'adapter un maillage donné à partir d'une métrique. Néanmoins, cette librairie est séquentielle et elle ne permet pas d'adapter les frontières du domaine. Une stratégie d'adaptation parallèle a été mise en place, couplée au solveur YALES2.

Afin d'illustrer la problématique posée par ce couplage, on se propose d'adapter sur quatre processeurs le maillage de la Fig. 4.32 (a) avec la métrique objectif de la Fig. 4.32 (b). L'adaptation effectuée par MMG3D donne le résultat proposé sur la Fig. 4.32 (c). La librairie MMG3D adapte le domaine partitionné sur chaque processeur mais ne touche pas aux nœuds des bords du domaine. Des cellules se retrouvent déformées à certains endroits du domaine, encadrés par les carrés noirs. Ces éléments sont situés aux interfaces entre processeur.

L'idée générale de l'adaptation en parallèle consiste en la répétition d'étapes d'adaptation (calcul séquentiel sur chaque processeur) en modifiant les frontières du domaine entre chaque itération. Ainsi, des nœuds se situant sur une frontière à une itération, se retrouvent au centre du domaine sur l'itération suivante. En quelques étapes, la métrique sera appliquée sur l'ensemble des nœuds du maillage. Par

2. Un dépôt Github est aussi mis à disposition pour le développement de la version 5.0 : <https://github.com/MmgTools/mmg>.

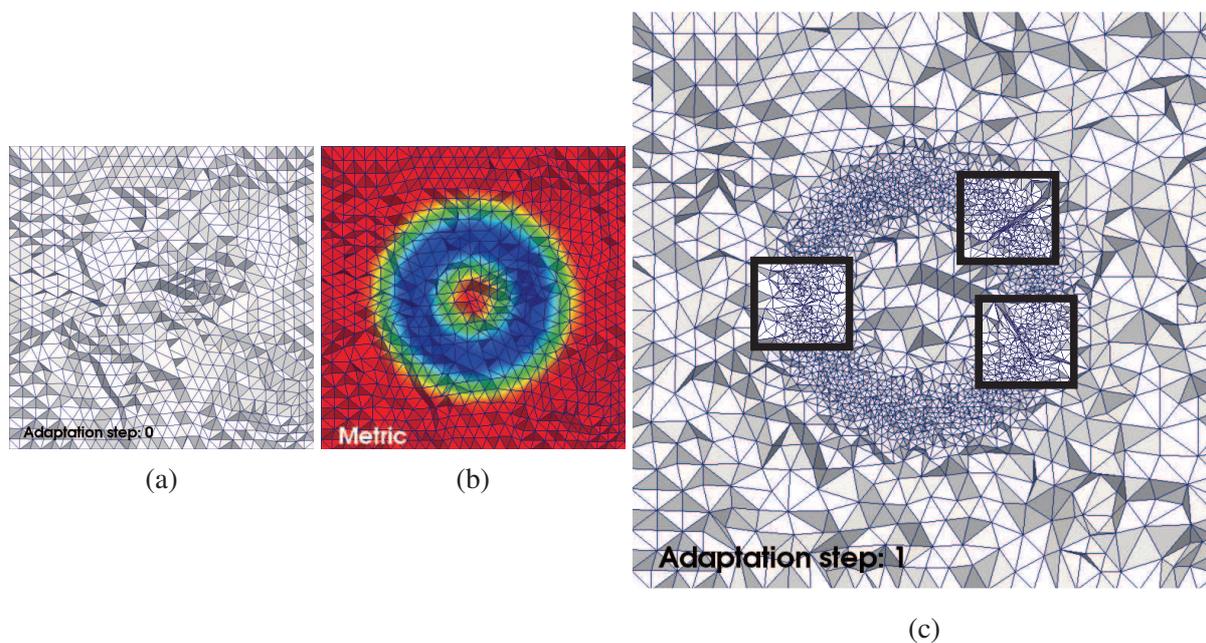


FIGURE 4.32: Exemple d'adaptation en parallèle d'un maillage avec un seul appel à la librairie d'adaptation : maillage initial, métrique imposée et maillage final (de gauche à droite).

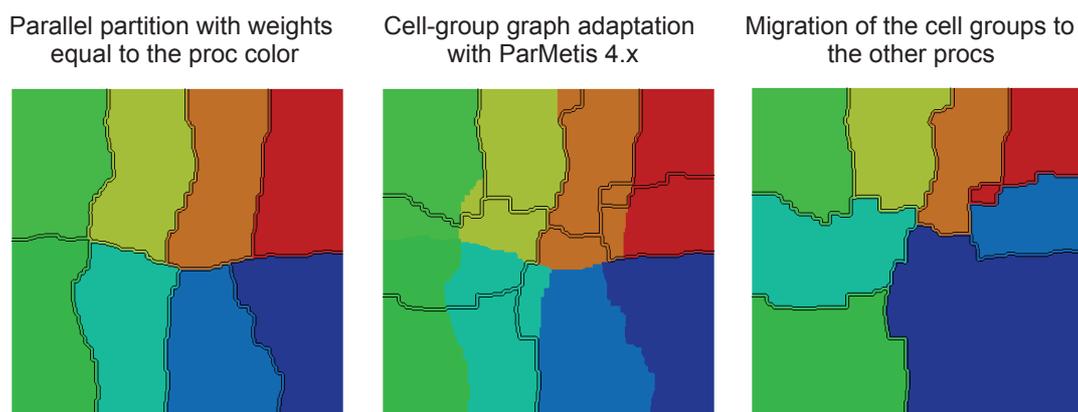


FIGURE 4.33: Répartition dynamique de charge avec la librairie ParMetis 4.

expérience, ce nombre d'étapes est d'environ trois pour que chaque nœud soit traité. Cette modification de la frontière nécessite l'échange d'éléments entre processeurs à la volée, autrement appelé répartition dynamique de charge (*parallel load balancing* en anglais).

Plutôt que d'envoyer de processeur à processeur des nœuds indépendants, il a été choisi de tirer parti de la double décomposition de maillage utilisée dans YALES2. Ce sont les groupes d'éléments qui sont échangés afin de bien répartir la charge. La version 4 de ParMetis [197, 117] a été utilisée afin de faire ces échanges à la volée. Un exemple de cette stratégie est donnée par la figure 4.33. Le maillage initial est réparti sur 8 processeurs et un poids (équivalent à une charge) différent est donné à chaque partie de maillage, égal au numéro du processeur (image de gauche) : de 1 (faible charge, en bleu) à 8 (charge élevée, en rouge). La librairie de partitionnement ParMetis est appelée et propose un nouveau découpage du maillage (image au centre). Les groupes d'éléments dont la couleur de processeur a changé sont alors

migrés vers leur processeur de destination. Le résultat obtenu est la figure de droite : le processeur 1 (en bleu) a beaucoup d'éléments à faible charge et le processeur 8 (en rouge) a peu d'éléments mais avec un poids élevé.

C'est exactement ce processus qui est employé afin de déplacer les frontières du maillage sur les processeurs. Après une première étape d'adaptation, un poids élevé est imposé sur les nœuds de la frontière et un poids faible est donné aux autres nœuds. Le nouveau partitionnement proposé par ParMetis permet alors aux nœuds de la frontière de se retrouver au centre d'un processeur après migration des groupes d'éléments. La librairie ParMetis sert donc ici à deux choses : déplacer l'interface entre chaque étape d'adaptation et homogénéiser le nombre d'éléments par processeur, c'est-à-dire équilibrer la charge de calcul.

La Fig. 4.34 présente l'algorithme utilisé pour l'adaptation parallèle de maillage. A partir d'un maillage initial et d'une solution donnée, une métrique (champ de taille de maille du maillage objectif) est défini à partir des critères présentés dans la section précédente. Ensuite, sur chaque processeur les groupes d'éléments sont fusionnés afin d'appeler la librairie d'adaptation MMG3D. Cette dernière adapte le maillage sans toucher aux frontières. Le maillage est alors redécoupé en groupes d'éléments, la connectivité du bord du domaine est reconstruite et les données sont interpolées du premier maillage sur le second. L'appel à ParMetis est effectué puis les groupes d'éléments sont transférés de leur processeur d'origine vers leur processeur de destination. Le processus d'adaptation est répété trois fois afin de traiter tout le domaine. Cette valeur a été obtenue par expériences numériques. Enfin le reste de la connectivité est assurée et le maillage adapté est obtenu avec la solution de départ interpolée.

Pour finir, une étape d'optimisation de maillage est réalisée afin de récupérer un maillage de meilleure qualité globale. Pour cela, les outils d'optimisation de maillage de MMG3D (jusqu'à maintenant désactivés) sont appliqués sur le maillage adapté. Ce dernier maillage obtenu peut même être de meilleure qualité que le maillage initial. Le résultat final de l'algorithme est donc un maillage adapté et optimisé avec la solution fournie au départ interpolée sur ce maillage.

Un exemple d'adaptation en parallèle et utilisant l'algorithme présenté est donné Fig. 4.35. On reproduit ici l'exemple de la Fig. 4.32 : adaptation d'un maillage initial dont la taille de maille est homogène avec une métrique donnée. Après trois étapes d'adaptation successives, le maillage répond parfaitement à la contrainte posée par la métrique et le nombre d'éléments sur chaque processeur est équivalent.

Il est important de noter que les frontières du domaine (les nœuds composant les conditions aux limites) de calcul ne peuvent pas être adaptés. En effet, les éléments aux bords ne peuvent pas être déplacés au centre d'un groupe d'éléments et la librairie d'adaptation MMG3D ne touche pas à ces éléments.

4.4.3.3 Contrôle du nombre d'éléments avec le critère Q_{c1}

Le second critère Q_{c2} basé sur la résolution de l'énergie cinétique turbulente est totalement déterminé, avec aucun paramètre ajustable : il donne directement la taille de maille locale nécessaire afin de répondre au critère. Au contraire, le premier critère Q_{c1} basé sur l'erreur d'interpolation des champs moyens a un degré de liberté intrinsèque, qui est le niveau de l'erreur. Dans des calculs LES classiques, cette erreur doit être homogène dans l'ensemble du domaine de calcul pour garantir une bonne répartition des cellules. Afin de conserver un nombre d'éléments acceptable, il est obligatoire de proposer une stratégie d'adaptation basée sur le premier critère qui permette le contrôle du nombre d'éléments.

En supposant un maillage isotrope avec une taille de maille locale Δ , le nombre de cellules dans un volume V peut être défini comme le produit entre la densité locale de maille ρ et le volume lui-même. Si le volume d'une cellule est approximativement $\gamma\Delta^3$, où γ est une constante, le nombre d'éléments dans

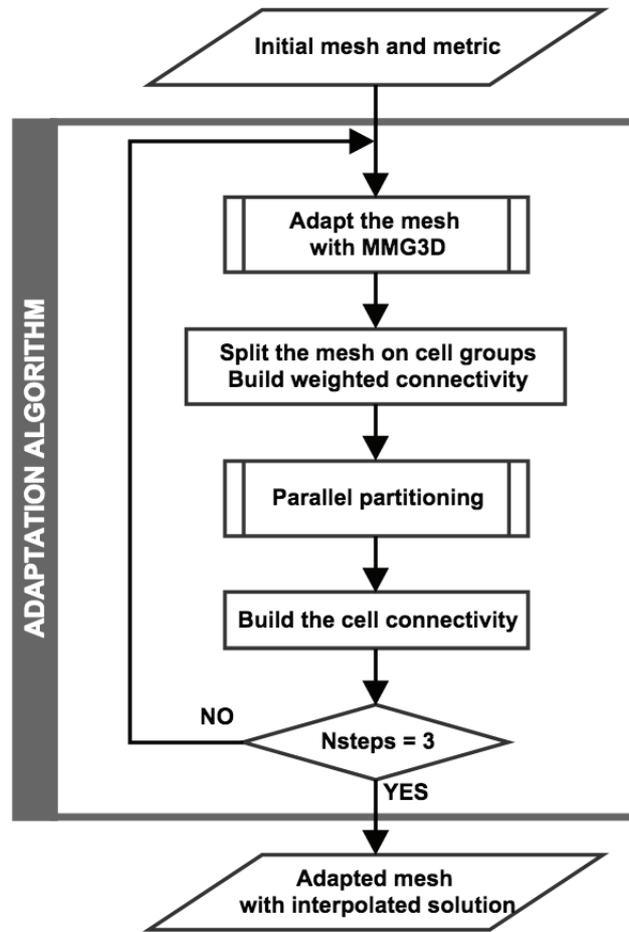


FIGURE 4.34: Algorithme d'adaptation parallèle avec couplage MMG3D-YALES2.

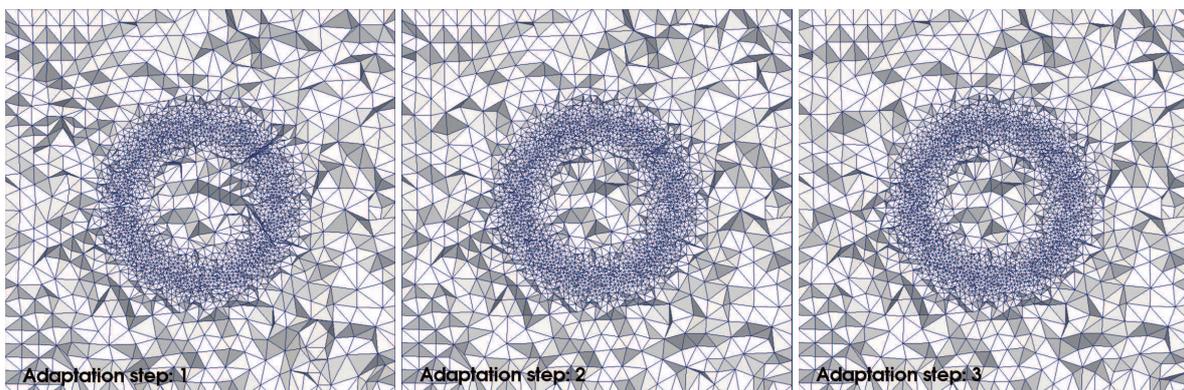


FIGURE 4.35: Exemple d'adaptation en parallèle d'un maillage en parallèle : étapes d'adaptation de 1 à 3 (de gauche à droite).

un petit volume V vaut environ $V/(\gamma\Delta^3)$. La densité locale de nombre d'éléments est $\rho = 1/(\gamma\Delta^3)$.

Le nombre total de cellules N_i d'un domaine de calcul initial \mathcal{D} peut être mesuré par l'intégrale de la densité locale de nombre d'éléments sur le domaine :

$$N_i = \int_{\mathcal{D}} \rho_i dV. \quad (4.22)$$

En définissant un taux de raffinement local τ comme le rapport entre les tailles de maille des maillages initial et adapté $\tau = \Delta_i/\Delta_a$, l'équation précédente permet d'estimer le nombre d'éléments du maillage adapté à partir de la densité initiale ρ_i :

$$N_a = \int_{\mathcal{D}} \rho_a dV = \int_{\mathcal{D}} \tau^3 \rho_i dV. \quad (4.23)$$

En utilisant (4.23) et (4.22), on obtient le rapport du nombre d'éléments entre les deux maillages :

$$\frac{N_a}{N_i} = \left(\int_{\mathcal{D}} \tau^3 \rho_i dV \right) \left(\int_{\mathcal{D}} \rho_i dV \right)^{-1}, \quad (4.24)$$

$$= \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{\tau^3}{\Delta_i^3} dV \right) \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{1}{\Delta_i^3} dV \right)^{-1}. \quad (4.25)$$

En considérant le premier critère d'adaptation, dont le but est d'homogénéiser les erreurs sur les champs moyens, le taux de raffinement local peut s'écrire $\tau = \sqrt{Q_{c1,i}/Q_{c1,a}}$ où $Q_{c1,i}$ et $Q_{c1,a}$ sont les évaluations des erreurs d'interpolations sur les maillages initial et adapté, respectivement. A partir de l'Eq. (4.15), le rapport de nombre d'éléments s'écrit

$$\frac{N_a}{N_i} = \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{Q_{c1,i}^{3/2}}{\Delta_i^3 Q_{c1,a}^{3/2}} dV \right) \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{1}{\Delta_i^3} dV \right)^{-1}. \quad (4.26)$$

L'homogénéité de l'erreur d'interpolation est obtenue quand $Q_{c1,a}$ est constant dans le domaine de calcul pour une variation du nombre d'élément N_a/N_i donnée. L'équation précédente permet de trouver la valeur de cette constante, illustrée par la Fig. 4.36 :

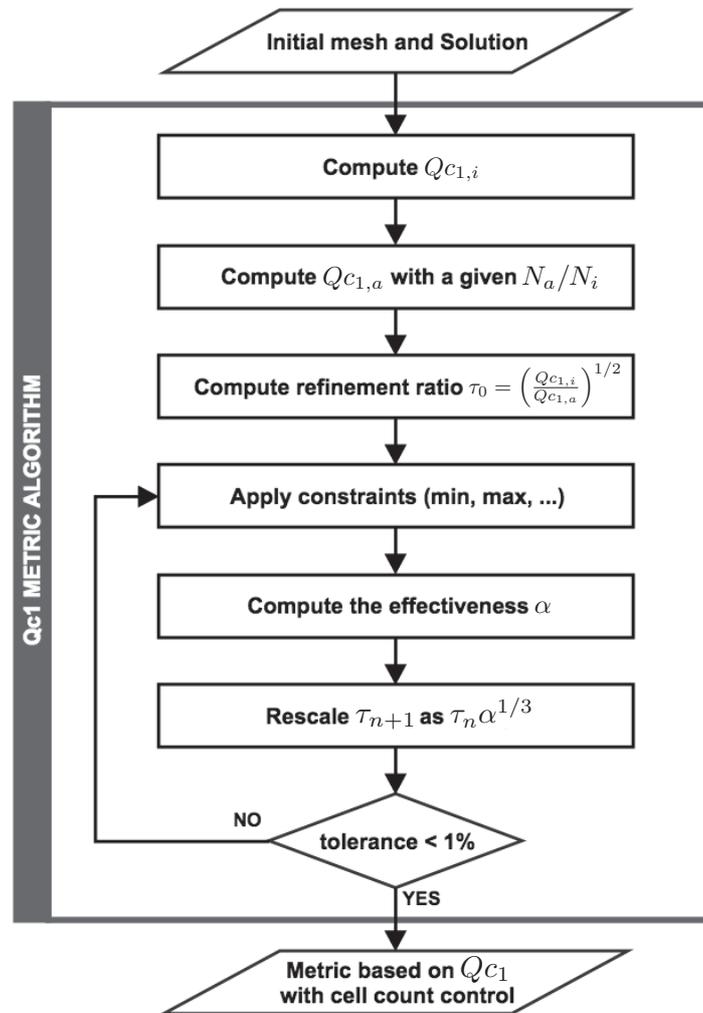
$$Q_{c1,a} = \left(\frac{N_a}{N_i} \right)^{-2/3} \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{Q_{c1,i}^{3/2}}{\Delta_i^3} dV \right)^{2/3} \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{1}{\Delta_i^3} dV \right)^{-2/3}. \quad (4.27)$$

Pour résumer, l'homogénéisation de l'erreur d'interpolation sur le domaine de calcul avec contrôle du nombre d'éléments total peut être réalisée en quatre étapes :

1. Evaluation du critère $Q_{c1,i}$ à partir de l'équation (4.15),
2. Calcul de $Q_{c1,a}$ pour un ratio de nombre d'éléments N_a/N_i donné avec l'équation (4.27),
3. Calcul du taux de raffinement local $\tau = \sqrt{Q_{c1,i}/Q_{c1,a}}$,
4. Modification du taux de raffinement local par des contraintes additionnelles : taille de maille minimum ou maximum, limitation du gradient de taille de maille...
5. Adaptation du maillage.

L'étape 4 est une procédure itérative. En effet, imposer une taille de maille minimale ou maximale ou bien limiter le gradient de taille de maille sont des contraintes locales, le contrôle du nombre d'éléments du maillage final est une contrainte globale. Le taux de raffinement doit être ajusté sur l'ensemble du domaine afin de satisfaire toutes les contraintes. Par conséquent, un coefficient α obtenu à partir de l'Eq. 4.28 est introduit et déterminé itérativement :

$$\alpha = \left(\frac{N_a}{N_i} \right)^{-1} \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{\tau^3}{\Delta_i^3} dV \right) \left(\int_{\mathcal{D}} \frac{1}{\Delta_i^3} dV \right)^{-1}. \quad (4.28)$$

FIGURE 4.36: Procédure de calcul de la métrique basée sur Q_{c1} avec contrôle du nombre d'éléments.

	M1	MREF	A1	A2
Nombre d'éléments	4 483 330	273 751 808	4 335 692	14 808 033
Nombre de nœuds	779 388	47 985 812	757 779	2 504 555
Taille de maille moyenne [μm]	94	24	95	64

TABLE 4.4: Caractéristiques des maillages étudiés.

Le coefficient α est relié au taux de raffinement effectif τ_{n+1} comme $\alpha = (\tau_n/\tau_{n+1})^3$. La procédure itérative permet au coefficient α de converger vers l'unité. Une tolérance de l'erreur de 1 % sur le nombre d'éléments est imposé dans ces travaux.

4.4.4 Application sur le brûleur centimétrique

4.4.4.1 Stratégie d'adaptation

Pour l'adaptation du maillage du brûleur MESO-CORIA, la stratégie suivante est proposée. L'objectif est d'obtenir un maillage optimal pour les calculs LES, en respectant chaque critère d'adaptation avec un nombre minimal de cellules. La stratégie d'adaptation peut être résumée comme ceci :

- Plusieurs étapes d'adaptation du maillage avec uniquement le critère Q_{c1} et un nombre d'éléments constant ($N_a/N_i = 1$),
- Le maillage convergé obtenu est adapté avec le critère Q_{c2} , sans restriction sur le nombre d'éléments, en limitant le taux de raffinement local maximum à 1. Ainsi, cette étape ne raffine que dans les zones indiquées par Q_{c2} , laissant le reste du maillage inchangé.

Cette stratégie garantit d'avoir suffisamment de cellules à la fois dans les zones où les gradients moyens sont importants et également dans les zones où l'énergie cinétique turbulente est importante. Si l'ordre inverse était adopté, le niveau de résolution de l'énergie cinétique turbulente ne pourrait pas être garanti.

Plusieurs étapes d'adaptation avec le critère Q_{c1} sont nécessaires car la modification du maillage engendre une modification de l'écoulement moyen. C'est pourquoi, entre chacune de ces étapes, un nouveau calcul LES est réalisé avec le maillage adapté et les statistiques sont ré-initialisées. Le temps physique de calcul est de 200 ms, soit six temps de passage évalué comme le rapport du volume du domaine sur le débit volumique. La métrique est limitée entre 20 et 500 μm afin d'éviter les éléments trop petits ou trop grands. L'ensemble de la procédure d'adaptation est illustrée par la Fig. 4.37.

4.4.4.2 Résultats de l'adaptation de maillage

La stratégie d'adaptation a été menée à partir du maillage M1 (voir section 4.3.1), de 4.3 millions d'éléments. Le même point de fonctionnement que dans la section 4.1 a été calculé et le modèle de sous-maille WALE a été choisi car montrant de meilleurs résultats. Les résultats obtenus seront toujours à comparer aux résultats obtenus avec le maillage de référence MREF.

Le processus d'adaptation basé seulement sur le critère Q_{c1} a donné naissance au maillage adapté appelé A1. Ce maillage comporte presque autant d'éléments que le maillage M1 (Tab. 4.4). Le maillage obtenu ensuite en appliquant le critère Q_{c2} est appelé A2. Ce maillage comporte 14.8 millions d'éléments, soit trois fois plus que M1 mais 18 fois moins que le maillage MREF.

La Fig. 4.38 présente la distribution de la taille de maille dans le domaine pour chaque maillage. Le maillage M1 présente une distribution homogène centrée autour de 94 μm . Le maillage présente la même distribution que M1 mais centrée à une valeur quatre fois inférieure, soit 24 μm , car MREF est

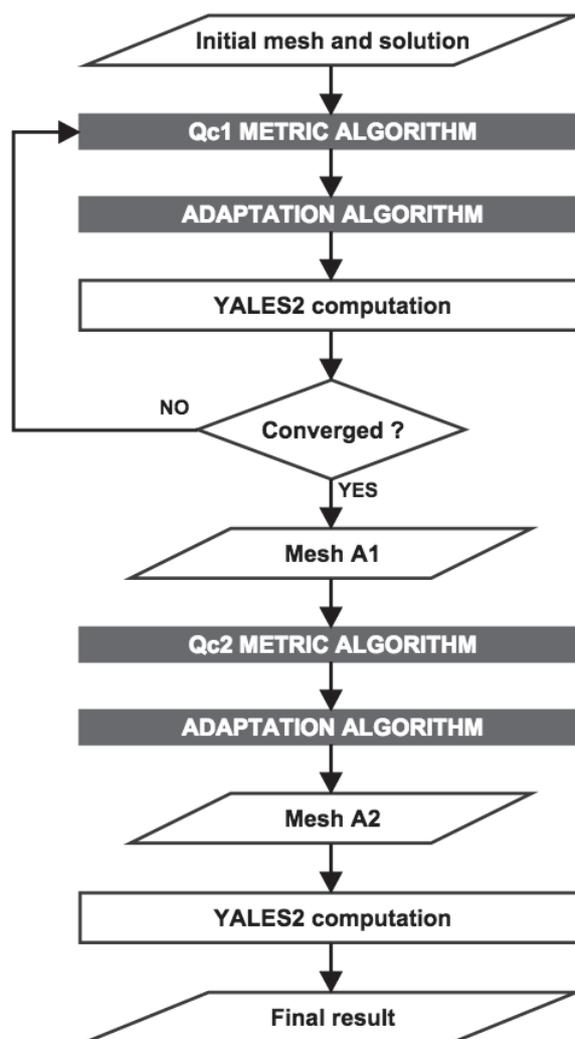


FIGURE 4.37: Procédure globale d'adaptation de maillage à partir des critères Q_{c1} et Q_{c2} .

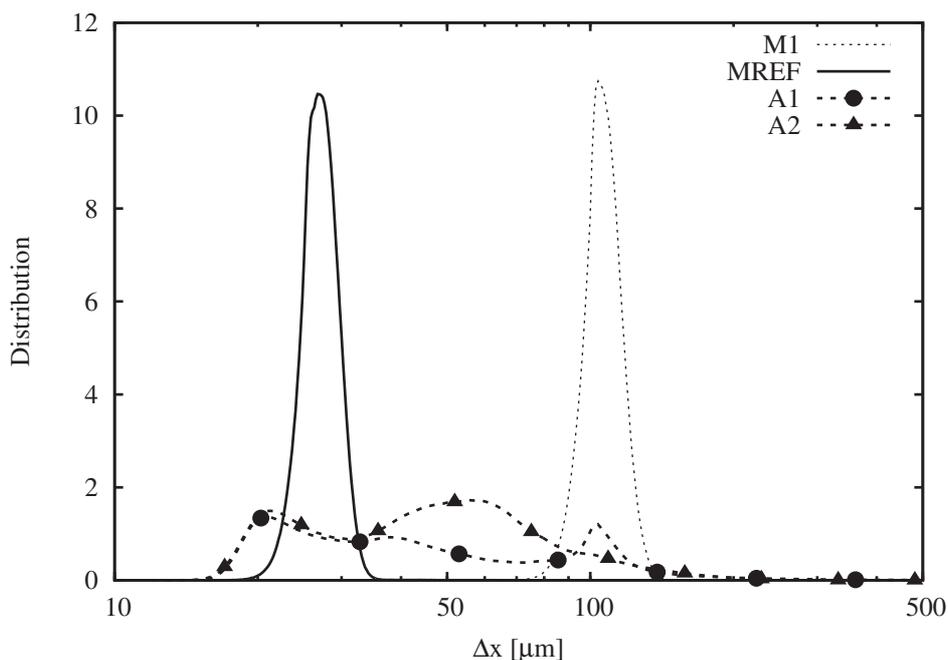


FIGURE 4.38: Distribution de taille de maille des grilles M1, MREF, A1 et A2.

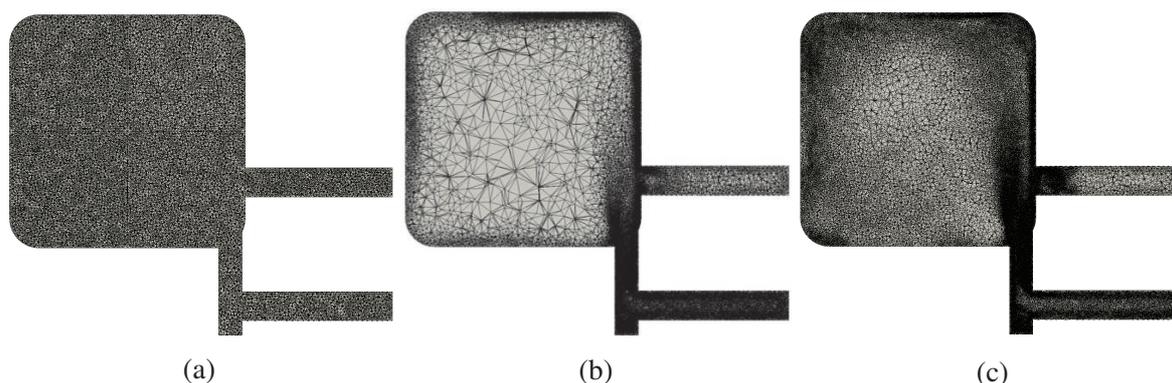


FIGURE 4.39: Comparaison des maillages M1 (a), A1 (b) et A2 (c) sur le plan d'injection.

issu d'un double raffinement automatique de maillage à partir de M1. Les maillages A1 et A2 présentent une distribution de taille de maille beaucoup plus hétérogène comprise entre 20 et 500 μm , les limites de taille de maille données en contraintes pendant le processus d'adaptation.

Cette distribution hétérogène est observable sur le plan d'injection montré par la Fig. 4.39. Comparé à la grille M1, le maillage A1 a surtout ajouté des nœuds dans le tube d'injection d'air, au pied du jet entrant dans la chambre (début de la couche de cisaillement) et près des parois. Ces zones correspondent aux endroits où les gradients moyens de vitesse sont les plus forts. Dans le reste du domaine, le processus d'adaptation a déraffiné le maillage. Le maillage A2 présente un maillage globalement plus fin que A1, du fait de son plus grand nombre d'éléments. La zone de jet montre une plus forte densité de maille que A1 car c'est là où la turbulence y est la plus développée.

La Fig. 4.40 montre les champs de vitesses moyenne obtenus avec les maillages adaptés. De façon qualitative, ces champs ressemblent très fortement au résultat DNS de référence (Fig. 4.17) aussi bien

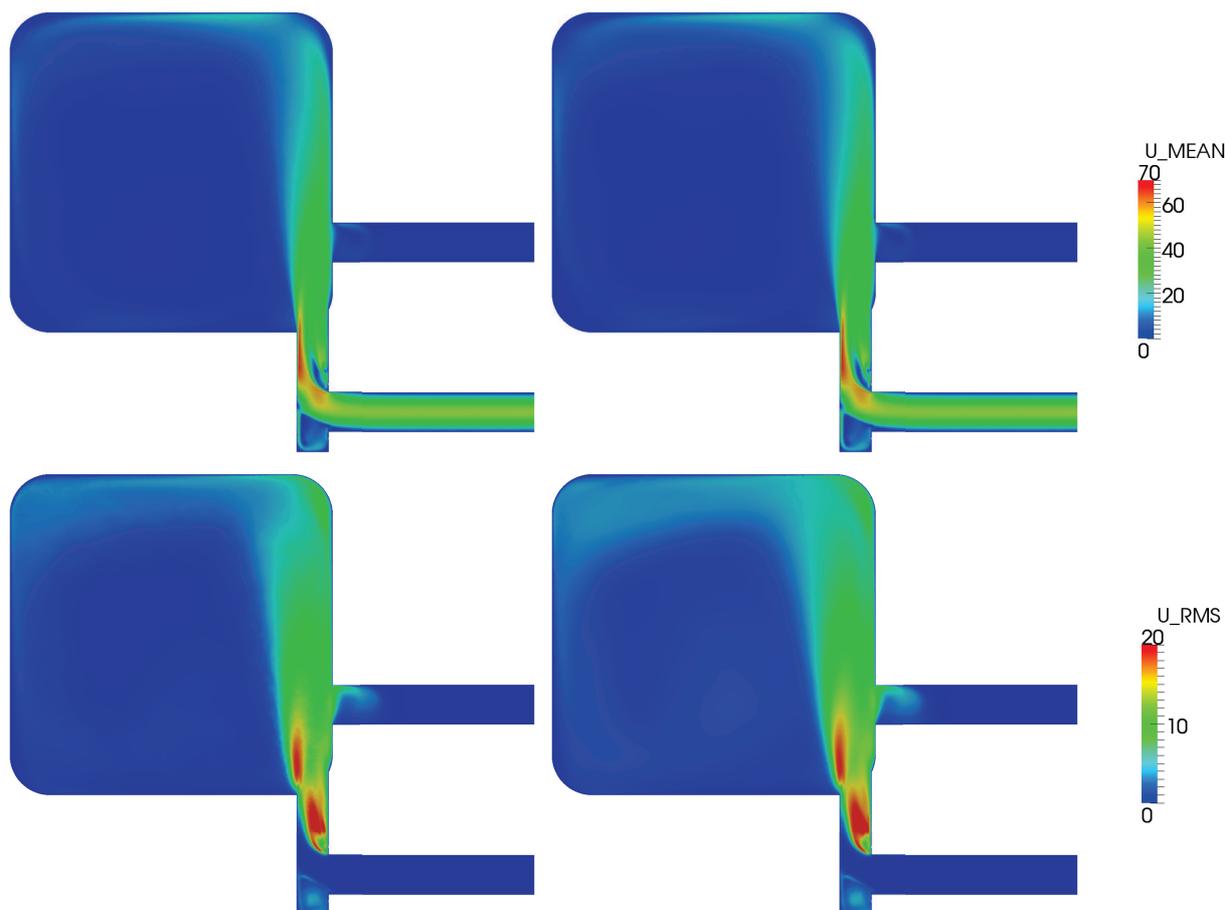


FIGURE 4.40: Champs de vitesse moyenne (haut) et RMS (bas) sur les maillages A1 (gauche) et A2 (droite).

avec A1 qu'avec A2. Ces maillages montrent une forte amélioration des résultats, comparés à M1. Les champs de vitesse RMS de la Fig. 4.40 montrent une amélioration considérable des résultats par rapport à M1 et semblent très similaires à MREF (voir Fig. 4.8). A1 et A2 présentent de fortes valeurs de vitesse RMS au pied du jet dans la zone de cisaillement et dans le tube d'injection d'air, après le coude. On peut cependant noter une différence à l'impact du jet d'air sur la paroi en les maillages A1 et A2 : des vitesses RMS plus faibles sont observées pour A1. La trop faible résolution du maillage dans cette zone turbulente peut expliquer ce phénomène.

Des profils de vitesse sont comparés suivant quatre lignes dans le domaine de calcul montrés par la Fig. 4.41. Les lignes 1 et 2 se situent dans le plan d'injection, la ligne 3 au milieu du domaine et la ligne 4 dans le plan de sortie. La Fig. 4.42 montre les profils de vitesse moyenne et RMS sur ces quatre lignes. Sur les lignes 1 et 2, on constate de fortes différences dans la prise en compte du jet entre M1 et la référence MREF. Les maillages adaptés ont fortement amélioré la modélisation du jet et les profils de vitesse moyenne sont très proches du calcul DNS. Afin de mesurer de façon plus quantitative les différences à la référence, le Tab. 4.5 réunit les erreurs relatives de norme L2. Ainsi l'erreur passe de 60% et 30%, pour les lignes 1 et 2 respectivement, à moins de 5% sur les maillages adaptés, le maillage A2 montrant une erreur légèrement meilleure que A1. Un constat similaire peut être fait sur les vitesses moyennes des lignes 3 et 4 : A2 montre le résultat le plus proche de la référence, A1 est sensiblement

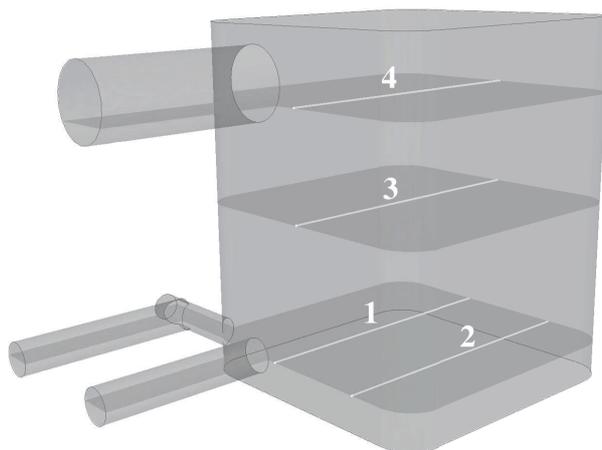


FIGURE 4.41: Visualisation des quatre lignes étudiées.

Lignes	M1	A1	A2
1	60.1	5.4	4.5
2	30.0	4.7	3.4
3	13.6	7.3	4.0
4	18.4	14.7	6.5

TABLE 4.5: Erreur relative de norme L2 sur les profils de vitesse moyenne sur 4 lignes dans les différents maillages (en %).

moins bon et M1 montre de larges différences. Sur les profils de fluctuations de vitesse, la grille A2 se montre aussi la meilleure, toujours très proche du résultat DNS. En revanche, sur les lignes 3 et 4, la grille A1 montre de plus mauvais profils de vitesse RMS que le maillage M1. Le très fort déraffinement induit par le processus d'adaptation en dehors de la zone d'injection peut expliquer cet effet.

La Fig. 4.43 montre les critères d'adaptation sur les grilles A1 et A2 dans le plan d'injection. Sur le maillage A1, le champ de critère Q_{c1} montre une très bonne homogénéité, comme attendu, en dehors des zones proche-paroi où le maillage n'a pas été adapté. Quelques zones isolées montrent des valeurs un peu plus élevées de l'erreur d'interpolation. Cela est dû à la restriction sur la taille de maille minimale : le critère Q_{c1} cherche à imposer ici des mailles plus petites que $20 \mu\text{m}$ qui est la contrainte de taille minimale. Le maillage A1 montre en revanche de très larges zones où le critère Q_{c2} est supérieur à 0.2. La modélisation de l'énergie cinétique turbulente y est importante car la taille de maille locale est élevée. La grille A2 montre une erreur d'interpolation Q_{c1} au moins inférieure à celle trouvée sur A1. Au centre du domaine, l'erreur y est même bien plus faible que dans le jet grâce à une densité de maille plus importante. De plus, le critère Q_{c2} montre une bien meilleure résolution de l'énergie cinétique turbulente dans tout le domaine. La valeur du critère Q_{c2} n'excède pas 0.25 sauf dans les tubes d'entrées mais ces zones montrent une très faible énergie cinétique donc l'apport du modèle de sous-maille est négligeable.

4.4.4.3 Performances

L'adaptation de maillage a été effectuée sur une station de travail locale, sur 8 processeurs. Le temps d'adaptation est de quelques minutes depuis le maillage initial jusqu'au maillage optimisé. Il va de soi

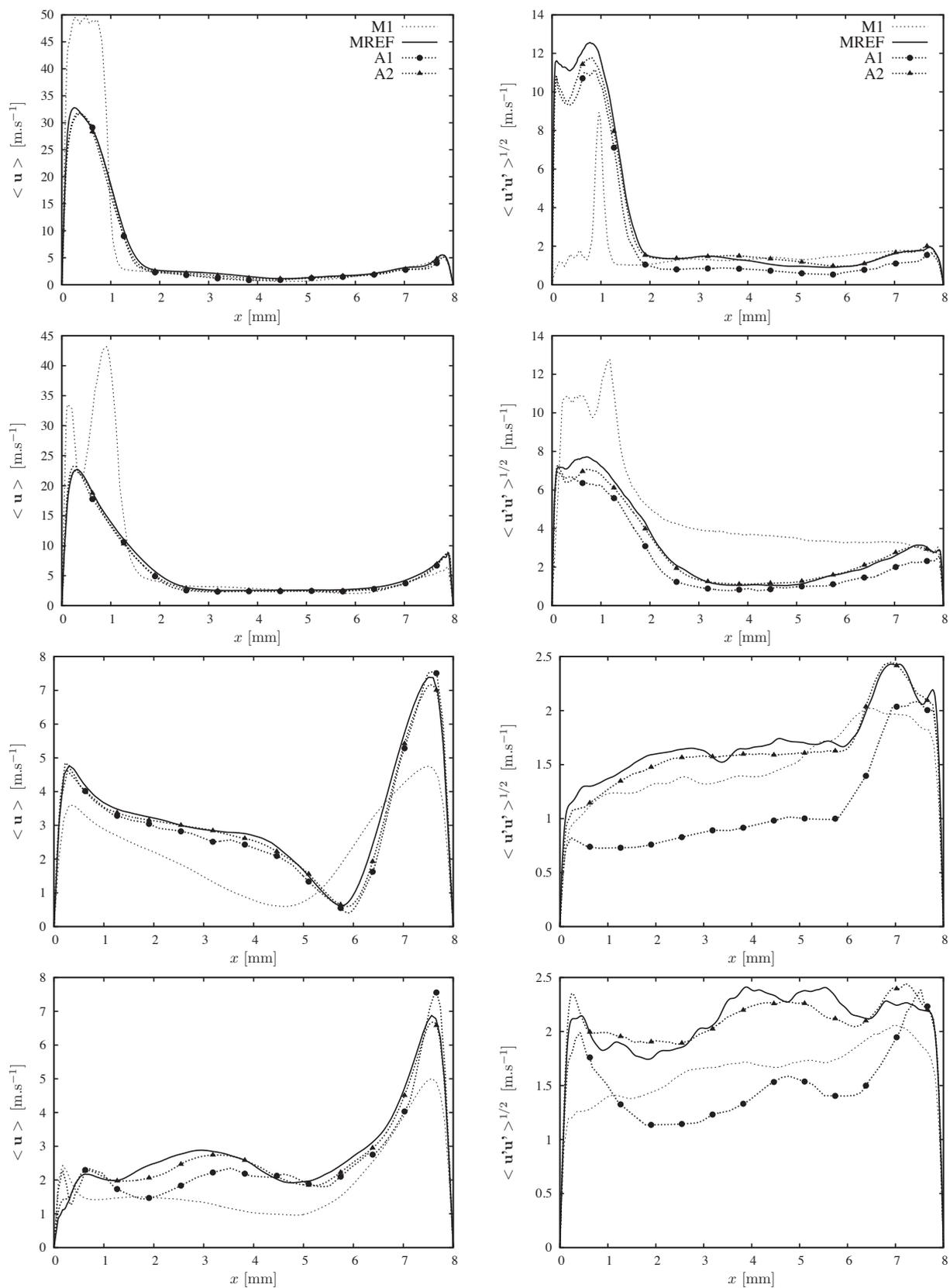


FIGURE 4.42: Profils de vitesse moyenne (gauche) et RMS (droite) suivant les lignes 1, 2, 3 et 4 (de haut en bas).

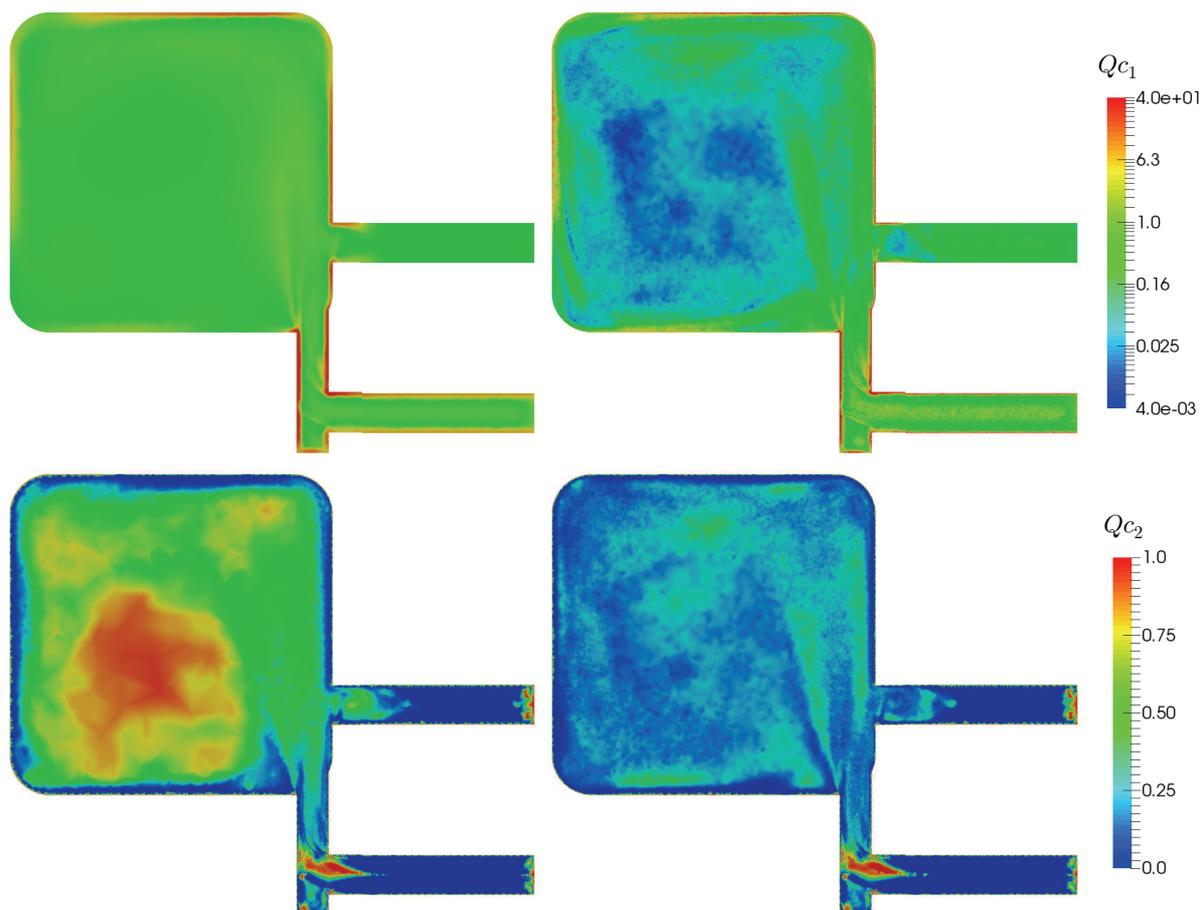


FIGURE 4.43: Champs de critères Q_{c1} (haut) et Q_{c2} (bas) sur le plan d'injection des maillages A1 (gauche) et A2 (droite).

	M1	MREF	A1	A2
Coût CPU normalisé	1.0	358.5	16.0	92.9

TABLE 4.6: Temps de calcul normalisé pour chaque maillage étudié.

qu'augmenter le nombre de cœurs permet de réduire le temps nécessaire à l'adaptation. Cependant, aucune étude de *scaling* n'a été réalisée. De même, si la métrique objectif est proche de la métrique initiale, la librairie MMG3D produira d'autant plus rapidement le nouveau maillage.

Le temps CPU nécessaire pour réaliser chaque calcul LES est résumé dans le tableau 4.6. Ce temps est normalisé par le coût CPU du calcul sur le maillage M1, qui est de 6.7 heures sur 128 processeurs Intel Nehalem. Les calculs sur maillages adaptés A1 et A2 sont respectivement 16 et 93 fois plus chers que celui avec M1 mais restent 22 et 4 fois moins chers qu'avec le maillage DNS MREF. Bien que A1 montre un nombre de maille similaire à M1, il contient une taille de maille minimale bien plus faible que la plus petite maille de la grille M1. Le pas de temps du solveur fluide en est sensiblement affecté.

4.4.5 Perspectives

Ce travail a montré qu'une stratégie d'adaptation de maillage en parallèle montrait des résultats très prometteurs. Cependant, certaines limites ont été observées et demandent à être approfondies.

En premier lieu, les limitations intrinsèques de la librairie d'adaptation MMG3D ne permettent pas d'adapter les surfaces. Dès lors, les bords du domaine ne peuvent être modifiés. Cela empêche d'améliorer le maillage en proche paroi alors que ce serait nécessaire. Cette limitation pourra normalement être levée avec la nouvelle version 5.0 de MMG3D qui devrait autoriser l'adaptation de surface. L'adaptation de maillage dans des configurations 2D sera donc aussi possible.

Aujourd'hui, l'adaptation de maillage est réalisable pour des maillages composés de tétraèdres uniquement. Le développement de l'adaptation pour des maillages composés d'hexaèdres ou pour des maillages hybrides peut constituer une perspective intéressante.

Une autre limitation soulevée par cette étude est le temps de retour important. La diminution de la taille de la plus petite maille engendre un forte diminution du pas de temps. Il devient alors nécessaire de réaliser un nombre d'itérations plus important pour effectuer le même temps physique. Le développement de méthodes d'intégration temporelle implicites constitue une piste pour palier à cette difficulté.

Tous les travaux sur l'adaptation présentés dans cette thèse sont réalisés sur des écoulements non-réactifs. Le développement de l'adaptation pour des calculs réactifs est la perspective la plus attendue. Le critère d'adaptation pourrait par exemple être un capteur de flamme indiquant la zone du maillage à raffiner afin de capter correctement la structure de flamme. De plus, l'adaptation dynamique, c'est à dire en cours de calcul, pourrait permettre au maillage de suivre la flamme : résolution fine dans la zone de flamme, plus grossier ailleurs. Cette perspective est déjà exploitable aujourd'hui dans YALES2 mais le temps d'adaptation reste trop grand par rapport au temps de calcul pour être utilisable. Des améliorations sont encore nécessaires pour une utilisation courante.

Pour finir, comme la procédure d'adaptation itérative proposée ici converge vers un maillage adapté, il serait intéressant de vérifier si divers maillages initiaux convergent tous vers le même maillage final. Cela confirmerait que la LES avec indépendance du maillage est réalisable : la simulation serait indépendante de l'utilisateur.

4.5 Conclusions

Dans ce chapitre, l'écoulement non-réactif dans la géométrie MESO-CORIA a été étudié. Un calcul de référence DNS a été réalisé avec un maillage composé de 273 millions d'éléments. Cette simulation a montré que l'écoulement tourbillonnaire whirled est bien obtenu : un cœur central de faible activité est entouré de fluide mis en rotation. L'analyse du mélange entre les fluides entrant par les deux entrées n'est pas optimal, ce qui peut être un frein à la combustion dans des conditions réactives. En outre, la répartition des temps de séjour ont montré une grande disparité : certains chemins préférentiels allant d'une entrée directement vers la sortie ont été observés tandis que des zones de recirculation dans les coins du domaine mènent à des temps de séjour très longs. Le temps de séjour étant un paramètre critique dans le dimensionnement de chambre de combustion centimétrique, cet effet peut aussi être un obstacle à une combustion complète.

Une étude de sensibilité aux paramètres numériques a également été effectuée. L'analyse en raffinement de maillage a montré qu'une résolution trop grossière ne capte pas correctement la dynamique du jet d'air et donc influence le reste de l'écoulement et le mélange. Sur un maillage intermédiaire, la dynamique se rapproche fortement du résultat DNS. Néanmoins, l'influence du modèle de sous-maille pour la turbulence a montré que le modèle de Smagorinsky dynamique n'est pas le plus adapté. Ce dernier provoque une perturbation dans le jet d'air entrant dans la chambre de combustion. Cet effet n'est pas présent avec le modèle WALE ou avec l'approche NO-MODEL.

Dans le cadre de la réduction des coûts des calculs LES, une méthode innovante d'adaptation de maillage a été développée au cours de cette thèse. Le code de calcul YALES2 est maintenant capable d'adapter un maillage tétraédrique de géométrie complexe, en parallèle, et à partir d'une métrique basée sur des critères physiques et numériques. L'adaptation du maillage est réalisée par la librairie externe MMG3D. Cette stratégie d'adaptation a été testée sur la configuration MESO-CORIA et a montré des résultats très encourageants. La simulation réalisée avec un maillage adapté composé de 14.8 millions d'éléments présente des résultats très similaires à ceux obtenus avec le maillage DNS de 273 millions de cellules, pour un coût quatre fois moins élevé.

Chapitre 5

Etude de l'écoulement réactif dans le brûleur centimétrique

Dans ce chapitre, une stratégie de calcul pour les écoulements réactifs dans les chambres de combustion centimétriques est présentée et validée sur des cas tests simples. Un premier calcul LES réactif 3D méthane-air dans le brûleur du CORIA permet de mieux comprendre les mécanismes physiques en jeu. Les performances du brûleur sont mises en parallèle avec l'analyse de l'écoulement réactif. Afin d'améliorer les performances du brûleur, l'enrichissement en hydrogène du mélange de carburant est testé sur deux points de fonctionnement. Ces résultats numériques sont comparés aux résultats expérimentaux. Les résultats présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication scientifique soumise au journal Combustion and Flame.

Sommaire

5.1	Calculs préliminaires	129
5.1.1	Choix de modélisation de la chimie	129
5.1.2	Flammes laminaires 1D	131
5.1.3	Interaction flamme-paroi	134
5.1.4	Etude de la convergence en maillage : bec bunsen 2D	139
5.2	Etude de la combustion air-méthane dans le brûleur centimétrique MESO-CORIA	142
5.2.1	Présentation du cas de calcul	142
5.2.2	Topologie de l'écoulement	143
5.2.3	Structure de flamme	146
5.2.4	Régime de combustion	147
5.2.5	Performances du brûleur	149
5.2.6	Performances de calcul	151
5.3	Impact de l'enrichissement en hydrogène	152
5.3.1	Intérêt	152
5.3.2	Validation sur flammes 1D	153
5.3.3	Description des cas de calcul 3D	155
5.3.4	Topologie de l'écoulement réactif	155
5.3.5	Performances	159
5.3.6	Polluants	162
5.4	Conclusions	162

5.1 Calculs préliminaires

Avant d'effectuer des calculs 3D sur la configuration MESO-CORIA, des calculs préliminaires ont été réalisés. Ces études permettent de préparer le calcul 3D en évaluant la meilleure stratégie numérique à adopter. Le choix du schéma cinétique ainsi que la résolution du maillage nécessaire ont été analysés grâce à des simulations de flammes 1D laminaires. Des calculs 2D stationnaires de la configuration bec bunsen ont ensuite été réalisés. Ils ont permis de valider la méthodologie et le développement d'une méthode de répartition de la charge du calcul du terme source pour les calculs parallèles.

5.1.1 Choix de modélisation de la chimie

Le choix de la méthode de modélisation de la chimie est crucial et dépend des phénomènes physiques à prendre en compte. Dans le brûleur MESO-CORIA, des effets instationnaires alliant combustion et turbulence peuvent apparaître. Les calculs 3D non-réactifs ont révélé des inhomogénéités de mélange en espace et en temps. Le même phénomène devrait apparaître sur la température. De plus, les pertes thermiques sont à prendre en compte dans notre configuration à cause du faible volume de la chambre de combustion. Un aspect supplémentaire de ces simulations est la prise en compte de la diffusion différentielle du fait de l'importance des effets diffusifs dans la combustion petite échelle. De multiples trajectoires (T, Y_k) seraient nécessaires pour modéliser tous les régimes et situations dans le brûleur. Ainsi, une modélisation de la chimie avec approche des flammelettes ne peut être appliquée pour résoudre l'écoulement réactif dans le brûleur.

Une approche de chimie dite multi-espèces, couplée au transport complexe, a été adoptée. Le système d'équations résolues pour l'étude de l'écoulement réactif est le système (3.153)-(3.156) détaillée dans la section 3.6.4. Une équation de transport est résolue pour chaque espèce contenue dans le schéma cinétique choisi, et le terme source chimique est évalué à partir de ce mécanisme en chaque point du domaine et à chaque pas de temps. L'utilisation de schémas cinétiques détaillés (plusieurs centaines d'espèces et plusieurs milliers de réactions) dans des configurations complexes est au-delà des capacités de calcul actuelles. Des schémas moins complexes doivent être employés. Cependant, avec des schémas globaux ou avec une cinétique trop simple, la prédiction des polluants est incorrecte. Albouze [6] a montré qu'un schéma 2 étapes peut surestimer la fraction massique de monoxyde de carbone d'un facteur supérieur à trois. Pour les besoins du calcul 3D du brûleur MESO-CORIA, la complexité du schéma cinétique doit être comprise entre des schémas simples et des schémas détaillés.

Le schéma de cinétique chimique est un paramètre clé pour la simulation d'écoulements réactifs. Il conditionne les caractéristiques de la flamme comme la vitesse de flamme laminaire ou son épaisseur et la qualité de la description du front de flamme et des polluants. Le choix d'un schéma cinétique adapté à la configuration étudiée est primordial. Les modèles de cinétique ont beaucoup progressé ces dernières années. La Fig. 5.1 montre l'évolution en fonction des années de la mesure expérimentale de la vitesse de flamme laminaire pour une flamme méthane/air à 298K. Avant les années 1980, la mesure de la vitesse de flamme montrait une grande dispersion : elle pouvait presque varier du simple au double. A partir des années 1980, les effets d'étirement ont été reconnus et systématiquement éliminés, ce qui a permis un meilleurs accord sur la vitesse de flamme entre diverses études.

Des méthodes de réduction et d'optimisation ont aussi permis de réduire la complexité (nombre d'espèces et de réactions du schéma) de ces schémas cinétiques. Evidemment, cette réduction s'accompagne d'une diminution de la plage d'utilisation du schéma en pression, température ou richesse. Le grand avantage des schémas réduits est leur temps de calcul : avec moins d'espèces à transporter et de réactions

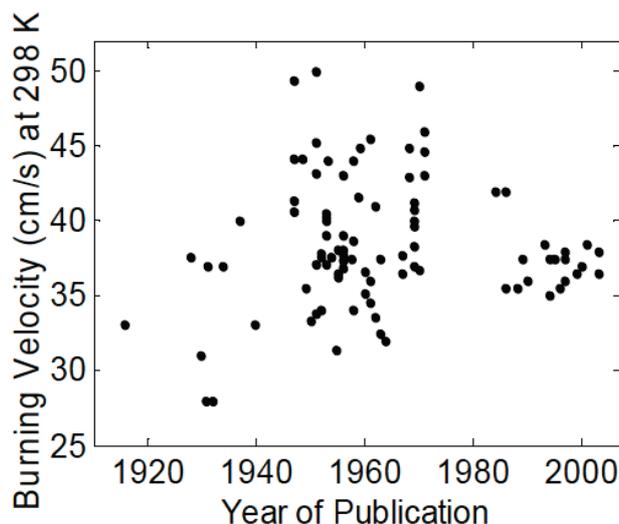


FIGURE 5.1: Maximum de vitesse laminaire d'une flamme méthane/air à 298K mesurée expérimentalement, tiré de [131].

à calculer, ces schémas permettent un temps de retour plus rapide des calculs.

Afin de choisir le schéma cinétique utilisé pour les calculs 2D et 3D, plusieurs schémas cinétiques adaptés aux flammes méthane-air ont été sélectionnés car présentant une complexité variée :

- **BFER** : de son nom complet 2S_CH4_BFER et développé par Franzelli *et al.* [71, 72], ce schéma global se compose de 6 espèces (CH_4 , O_2 , N_2 , CO , CO_2 et H_2O) et 2 réactions. Il doit être utilisé avec un nombre de Prandtl constant et à Lewis unitaire. Les coefficients pré-exponentiels des taux de réaction sont ajustés via l'utilisation de fonctions de correction en fonction de la richesse locale du mélange. Cela permet de retrouver des valeurs de vitesse laminaire de flamme et épaisseur de flamme plus proches de la réalité et dans une gamme de richesse plus grande. Il a ainsi été validé sur des plages assez larges de fonctionnement en température $T \in [300 - 700]$ K, pression $P \in [1 - 10]$ atm et richesse $\phi \in [0.6 - 1.4]$.
- **Jones-Lindstedt** : ce schéma global comporte 7 espèces (CH_4 , O_2 , N_2 , CO , CO_2 , H_2O et H_2) et 4 réactions et a été développé par Jones et Lindstedt [108]. Il utilise une approche de transport complexe : les coefficients de diffusion sont calculés à l'aide de l'approximation de Hirschfelder-Curtiss. Les résultats obtenus donnent un bon accord avec l'expérience pour le cas d'une flamme de prémélange et d'une flamme de diffusion à $T = 300$ K et $P \sim 1$ atm.
- **Coffee** : Coffee [40] a développé deux schémas destinés à des flammes méthane-air prémélangées pauvres aux conditions normales de température et pression. Comme ils présentent sensiblement les mêmes résultats, le schéma retenu dans ces travaux est celui comportant 14 espèces et 38 réactions.
- **GRI 1.2** : développés par le *Gas Research Institute*, les schémas GRI-Mech font partis des mécanismes réactionnels les plus utilisés pour la combustion du gaz naturel dont l'espèce majoritaire est le méthane. Celui développé en 1995, le GRI 1.2 [75] utilise 32 espèces et 177 réactions. Il a été validé sur de nombreux cas tests afin de respecter le maximum de caractéristiques de la flamme : temps d'auto-allumage, profils d'espèces, vitesse laminaire de flamme... Le schéma a été testé sur les plages suivantes : $P \in [0.25 - 20]$ atm, $T \in [300 - 1500]$ K, $\phi \in [0.4 - 1.7]$.
- **GRI 3.0** : le schéma GRI 3.0 est une version plus récente des schémas GRI car il date de

2000 [206]. Il comprend 53 espèces et 325 réactions. Il a été développé et validé en comparant les résultats obtenus sur une large gamme de résultats expérimentaux : délais d'auto-inflammation, concentration d'espèces au sein de tubes à chocs, vitesse et profils d'espèces de flammes laminaires... et cela pour des plages de conditions thermodynamiques larges : $T \in [1000 - 2500]$ K, $P \in [0.001 - 10]$ atm et $\phi \in [0.1 - 5.0]$.

Le dernier schéma présenté, GRI 3.0, sera utilisé comme référence car il est le plus complet et a été validé dans de très nombreuses configurations.

Les cinq schémas ont été comparés sur des flammes 1D laminaires en propagation libre. Plusieurs critères, considérés comme importants du point de vue de la réponse du schéma, ont été déterminés :

- les caractéristiques principales de la flamme (température adiabatique, vitesse et épaisseur de flamme) doivent être proches de la référence,
- les principaux polluants doivent être présents et bien évalués par le schéma car la combustion risque d'être incomplète dans le brûleur centimétrique,
- les critères doivent être valides pour une plage de température de gaz frais $T \in [300 - 800]$ K et une richesse $\phi \in [0.5 - 1.5]$, à la pression atmosphérique,
- les effets de diffusion différentielle doivent être pris en compte car les effets diffusifs sont plus importants à petite échelle (le nombre d'espèces prises en compte et le modèle de diffusion couplé au schéma cinétique conditionnent ce point),
- la présence d'une chimie faible température : les effets en proche paroi imposent la présence d'un ensemble de réactions capables de modéliser la cinétique basse température,
- le coût de calcul de la chimie doit rester acceptable (ce point essentiel sera longuement discuté section 5.1.4).

Ces critères éliminent directement le schéma BFER car ce dernier ne prend pas en compte les effets de diffusion différentielle. Cependant, il sera conservé pour la comparaison car il présente un coût de calcul très réduit comparé aux autres schémas.

5.1.2 Flammes laminaires 1D

Caractéristiques de flamme

Pour vérifier les caractéristiques de flamme sur l'ensemble de la plage de fonctionnement désirée, des flammes à plusieurs températures de gaz frais et plusieurs richesses ont été calculées avec le code CANTERA. La Fig. 5.2 montre l'évolution de la vitesse de flamme et de l'épaisseur de flamme en fonction de la richesse du mélange méthane/air pour les différents schémas. Le schéma Jones-Lindstedt surévalue nettement, jusqu'à 250 %, la vitesse de flamme pour des mélanges riches par rapport au GRI3.0. Les schémas BFER et Coffee surévaluent légèrement, d'au maximum de 20 %, la vitesse de flamme sur l'ensemble de la gamme de richesse (sauf entre $\phi = 1.2$ et $\phi = 1.4$ pour le BFER). Les schémas GRI1.2 et GRI3.0 donnent sensiblement les mêmes résultats. Concernant l'épaisseur de flamme, les schémas BFER et Jones-Lindstedt présentent le plus d'écart à la référence. L'erreur du schéma Coffee ne dépasse pas 20 %. La température de flamme adiabatique est comparée sur la Fig. 5.4 (a) et est similaire pour l'ensemble des schémas sauf pour les schémas BFER et Jones-Lindstedt proche stœchiométrie. L'introduction de plus d'espèces avec les autres schémas cinétiques permet une meilleure description de la température d'équilibre.

La comparaison des schémas en fonction de la température des gaz frais est donné par la Fig. 5.3. L'écart constaté sur la vitesse de flamme à $T = 300$ K entre les schémas est conservé en proportion jusqu'à une température de gaz frais de 700 K. Entre 700 et 800 K, la vitesse de flamme obtenue avec les

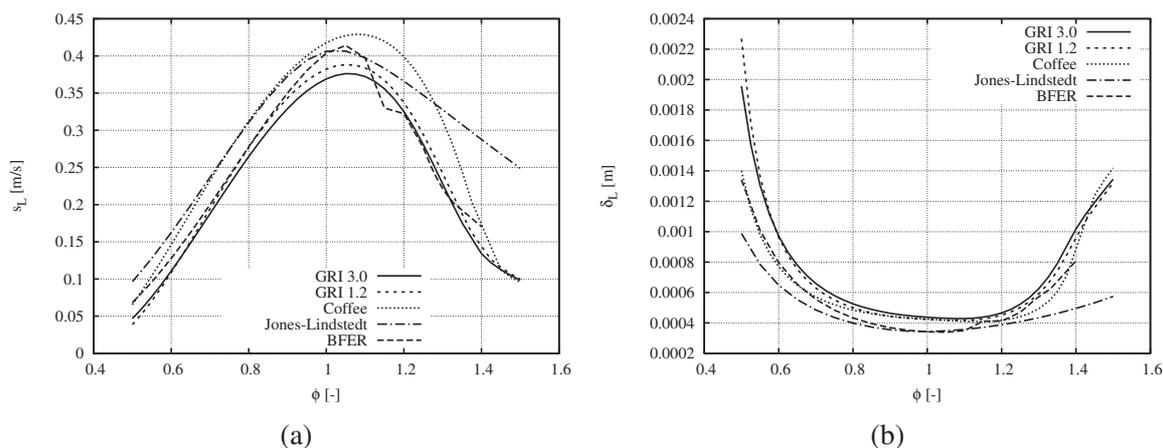


FIGURE 5.2: Comparaison de la vitesse de flamme (a) et épaisseur de flamme (b) en fonction de la richesse pour différents schémas cinétiques.

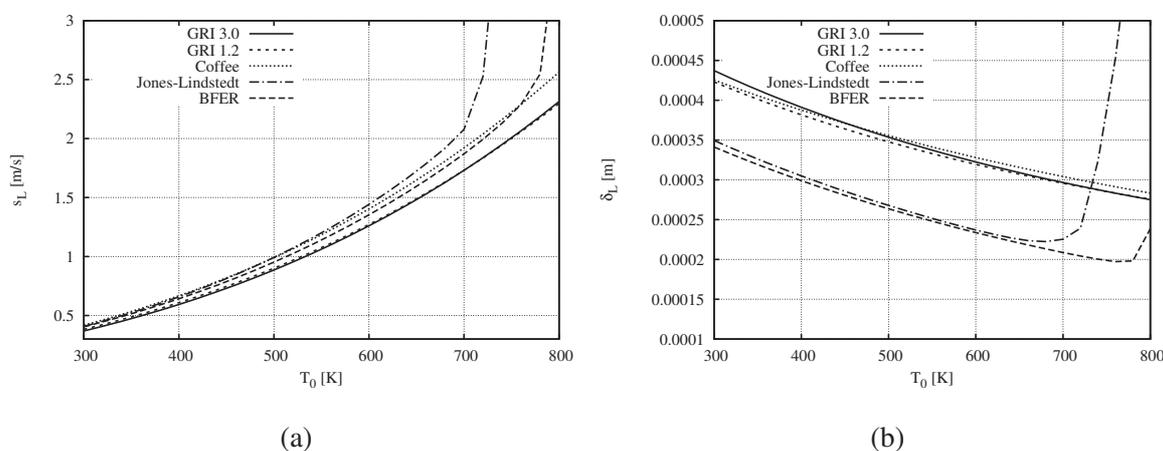


FIGURE 5.3: Comparaison de la vitesse de flamme (a) et épaisseur de flamme (b) en fonction de la température des gaz frais pour différents schémas cinétiques.

schémas BFER et Jones-Lindstedt divergent vers des valeurs beaucoup trop importantes. Ces schémas ne sont pas construits pour fonctionner à de telles températures. Cette dynamique est reproduite sur l'épaisseur thermique de flamme. L'écart de 25 % des schémas BFER et Jones-Lindstedt par rapport aux autres schémas, observé à $T = 300$ K, est conservé jusqu'à 700 K. Passé cette température, l'épaisseur obtenue avec ces deux schémas augmente brutalement. L'évolution de la température adiabatique de flamme en fonction de la température des gaz frais est montrée par la Fig. 5.4 (b). Moins le schéma comporte d'espèces, moins il est capable de reproduire correctement l'état d'équilibre : la température adiabatique de flamme s'écarte de la température de référence du schéma GRI3.0. En effet, la température adiabatique de flamme ne dépend pas de la cinétique chimique mais uniquement des espèces présentes dans le schéma réactionnel.

A l'analyse de ces résultats, les schémas BFER et Jones-Lindstedt ne peuvent être utilisés pour les calculs 3D car ils ne respectent pas les critères définis précédemment. Le schéma Coffee, même s'il présente un léger écart à la référence sur la vitesse de flamme, se comporte correctement sur la plage de richesse et de température. C'est ce schéma, présentant une précision suffisante sur les grandeurs

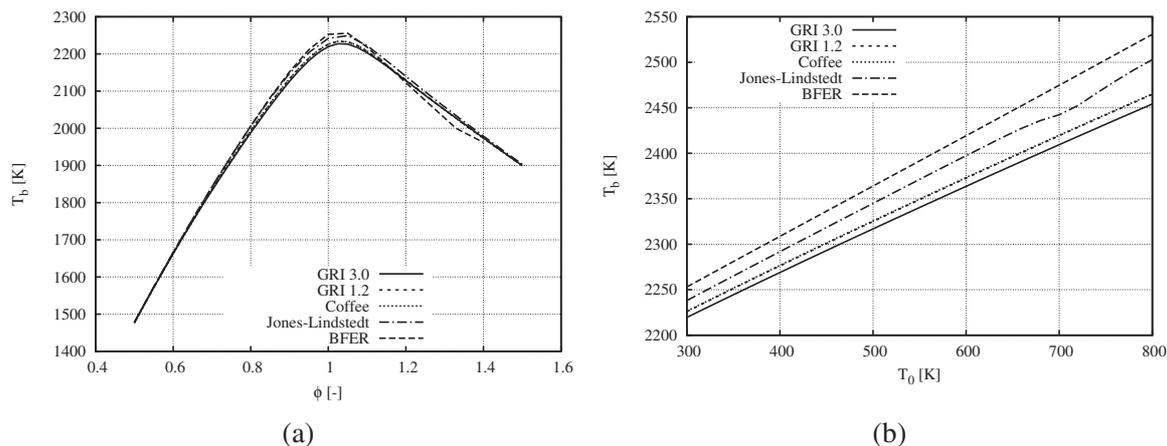


FIGURE 5.4: Comparaison de la température adiabatique de flamme en fonction de la richesse (a) et de la température des gaz frais (b) pour différents schémas cinétiques.

Δx [μm]	5	10	25	50	100	200
s_l^0 [$\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$]	41.6	42.0	41.7	41.7	41.9*	41.3*
δ_l^0 [μm]	421	479	426	445	521	733

TABLE 5.1: Temps de calcul normalisé pour chaque maillage étudié. Le symbole * indique que la flamme est accrochée au maillage.

caractéristiques de flamme, qui sera retenu pour la suite de l'analyse.

Convergence en maillage

L'étude précédente a été effectuée avec le code CANTERA qui permet de résoudre les flammes 1D laminaires avec un pas d'espace variable et ainsi s'adapter idéalement pour chaque schéma. Pour les calculs 3D, le code YALES2 est utilisé avec des maillages non-structuré, dont la taille de maille est fixée et ne peut être modifiée. Pour étudier l'indépendance du schéma Coffee à la résolution spatiale, une étude en convergence de maillage sur des flammes laminaires 1D avec YALES2 a été effectuée.

Le point de fonctionnement choisi est une flamme méthane/air stœchiométrique dont les gaz frais sont à 300 K. Le Tab. 5.1 résume les résultats obtenus sur la vitesse et l'épaisseur de flamme laminaire pour des tailles de maille comprises entre 5 et 200 μm . On constate que la vitesse de flamme est correctement prédite quelle que soit la taille de maille. En réalité, à partir de $\Delta x = 100 \mu\text{m}$, on observe un phénomène d'accrochage numérique de la flamme à la grille. Le maillage est trop grossier pour résoudre une telle flamme et la vitesse de flamme obtenue ne peut être considérée comme exploitable. De plus, on remarque pour ces flammes que l'épaisseur de flamme s'écarte sensiblement de la référence (flamme à $\Delta x = 5 \mu\text{m}$). De plus, comme l'a révélé l'étude de l'épaisseur de flamme en fonction de la richesse, la flamme stœchiométrique est la plus critique : pour d'autres richesses, l'épaisseur de flamme est plus importante. Le meilleur compromis en terme de précision des résultats semble être la résolution à $\Delta x = 50 \mu\text{m}$ dans cette configuration. Par ailleurs, les flammes de diffusion sont plus épaisses que les flammes de prémélange et donc bénéficient d'une meilleure résolution.

La Fig. 5.5 montre les profils d'espèces dans l'espace physique et dans l'espace des phases $Y_c = Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}} + Y_{\text{H}_2\text{O}}$. Les profils d'espèces majoritaires semblent indépendants de la taille de maille. En

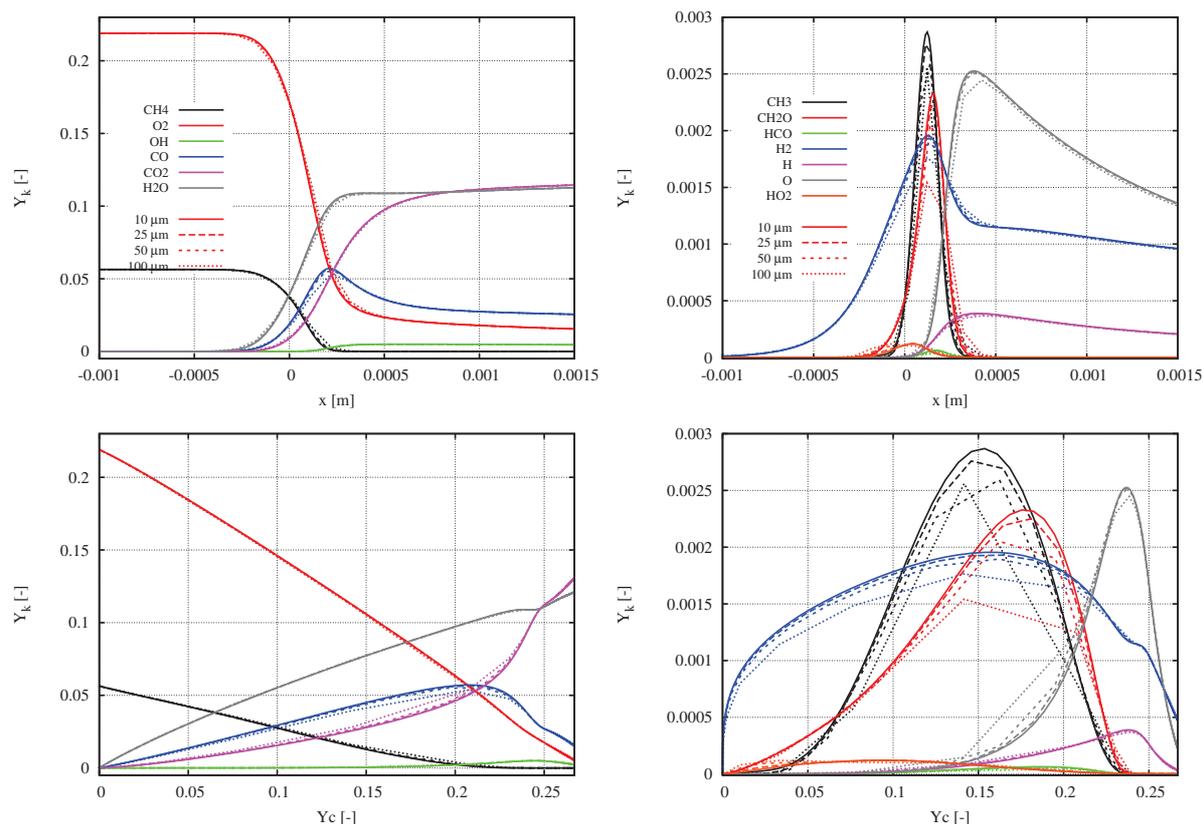


FIGURE 5.5: Comparaison de profils d'espèces majoritaires (gauche) et intermédiaires (droite), dans l'espace physique (haut) et dans l'espace des phases (bas) pour différentes résolutions de maillage.

revanche, de larges erreurs sont commises avec une résolution trop grossière ($\Delta x = 100 \mu\text{m}$) sur des espèces intermédiaires comme CH_3 ou CH_2O . Le front de flamme n'est pas assez bien décrit.

Le résolution apparaissant comme optimum est donc $\Delta x = 50 \mu\text{m}$. Elle permet d'obtenir les bonnes caractéristiques de flamme avec une description suffisante des profils d'espèces. Cette résolution sera retenue pour la suite des travaux.

5.1.3 Interaction flamme-paroi

5.1.3.1 Problématique

L'objectif de ces travaux est d'étudier le développement de la combustion dans des chambres de combustion de petite taille. La flamme est limitée à un petit espace. A cause des interactions flamme-paroi, elle est même confinée à un plus petit espace. En effet, les parois du brûleur sont froides : entre 400 et 500 K sur le brûleur MESO-CORIA. Dans les simulations, le point à la paroi est considéré comme isotherme : la température de consigne ne change pas avec le temps. Cependant, le premier point dans le domaine est laissé libre, et peut présenter un taux de dégagement de chaleur important. L'évaluation correcte des flux de chaleur aux parois est essentielle pour étudier les performances et le rendement thermique du brûleur. L'interaction entre la flamme et la paroi doit être suffisamment bien captée dans nos simulations.

La thématique de l'interaction flamme-paroi est un domaine complexe, faisant l'objet de recherches

approfondies. L'objectif ici est de dresser un état de l'art permettant de correctement évaluer les pertes thermiques dans les simulations 3D. Un cas test d'interaction flamme-paroi 1D a été mené avec le code YALES2 et une stratégie de mesure du flux pariétal est proposée.

De nombreuses études existent dans la littérature scientifique à propos de l'interaction de la flamme et les parois du brûleur. Lorsque la flamme approche une paroi froide, la cinétique chimique à basse température devient critique [179, 182, 226]. Certains schémas cinétiques chimiques sont incapables de modéliser correctement cet effet. La combustion catalytique peut devenir importante dans certains cas et les réactions de surfaces devraient être considérées. Le processus d'extinction de la flamme à une paroi froide implique une augmentation très importante du taux de dégagement de chaleur de la flamme sur un très court instant, à cause des réactions de recombinaison de radicaux, exothermiques et à énergie d'activation nulle [87]. Un tel phénomène implique une résolution de maillage parfois plus importante que pour des flammes classiques. La zone d'extinction est de l'ordre de l'épaisseur de flamme mais les gradients d'espèces et de température peuvent y être plus forts d'un facteur quatre pour une flamme méthane-air [187] et dix pour une flamme hydrogène-air [87].

Certains auteurs avancent aussi l'importance de la prise en compte des effets Soret et Dufour [34, 188, 187, 229]. L'effet Soret consiste en l'apparition d'un flux d'espèces dû au gradient de température. L'effet dual, dit effet Dufour, est l'apparition d'un flux de chaleur en présence d'un gradient de concentration. L'importance de la prise en compte de ces flux supplémentaires est encore sujet à débat au sein de la communauté scientifique, et restent la plupart du temps négligés. Certains auteurs s'accordent pour dire que plus la température de paroi et la pression augmentent, plus ces effets sont importants. Popp [188] avance la température minimum de 400 K pour les deux effets tandis que Hasse *et al.* [97] évoquent la pression de 10 atm pour l'effet Soret et une température de 600 K pour l'effet Dufour. De plus, plus la température de paroi augmente, moins la paroi peut être considérée comme inerte. La température de paroi $T_w = 400$ K, est proposée par Popp [188].

5.1.3.2 Présentation du cas de calcul

Un cas test d'interaction flamme-paroi a été étudié avec le code YALES2. Il simule une flamme plane 1D se dirigeant de façon normale vers une paroi froide. Ce cas test est courant dans la littérature sous le nom de 1D *Head-On Quenching* (HOQ) [34, 87, 188, 187]. La configuration du cas de calcul est montré par le schéma Fig. 5.6. Le mélange de gaz frais est identique à celui des flammes 1D précédentes : un mélange méthane air stœchiométrique à 300 K. La pression est égale à 1 atm. La paroi a une température imposée de $T_w = 300$ K dans un premier temps, et est considérée chimiquement inerte.

Le cas test est similaire à celui de Popp *et al.* [187]. Cependant, il été réalisé dans notre cas avec le schéma cinétique Coffee et une résolution homogène de $\Delta x = 10 \mu\text{m}$.

5.1.3.3 Calcul du flux thermique pariétal aux condition aux limites de Dirichlet isotherme

Comme on impose une condition de Dirichlet sur la température, un traitement spécial du calcul du flux de chaleur aux parois a été développé pour des conditions de parois isothermes non-glissantes. L'algorithme peut être décrit comme suit :

1. L'enthalpie sensible est avancée en temps durant la dernière étape du schéma Runge-Kutta, à

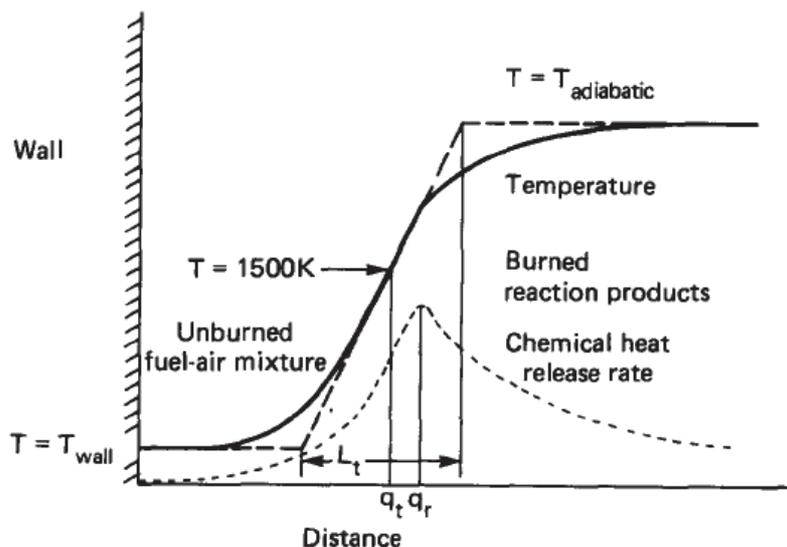


FIGURE 5.6: Schéma du cas test 1D HOQ. Tiré de [226].

travers son équation de transport semi-discrétisée, obtenue à partir de l'Eq. 3.156 :

$$\frac{\rho h_s^{n+1} - \rho h_s^n}{\Delta t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i h_s = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho h_{s,k} \mathcal{V}_{k,i} Y_k - P \sum_{k=1}^{N_{sp}} \chi_k \mathcal{V}_{k,i} \right) + \dot{\omega}_T, \quad (5.1)$$

où h_s^n et h_s^{n+1} sont respectivement les valeurs de l'enthalpie sensible en début et en fin d'itération.

2. A la fin du pas de temps, la température de paroi est corrigée afin qu'elle corresponde à la température de consigne. La valeur de l'enthalpie sensible à la paroi $h_s^{BC} = h_s(T_w, Y_{k,w})$ est calculée à partir de la température de consigne T_w et de la composition locale $Y_{k,w}$, et imposée en valeur de bord. Finalement, le flux thermique local Φ est calculé comme la combinaison du flux de Fourier et de la correction liée à la condition de Dirichlet :

$$\Phi = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{\rho V_c (h_s^{n+1} - h_s^{BC})}{S \Delta t}, \quad (5.2)$$

où V_c est le volume de contrôle et S la surface de paroi de ce volume de contrôle.

5.1.3.4 Résultats

La Fig. 5.7 montre les profils spatiaux de température et de taux de dégagement de chaleur à différents instants. L'évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global, du flux thermique pariétal et de la distance de la flamme à la paroi x_{T1500} sont tracés sur la Fig. 5.8. Cette distance est calculée à partir de la position de la flamme considérée à l'iso-T à 1500 K. On peut décrire le processus d'extinction à partir des étapes suivantes :

1. La flamme se propage de façon libre jusqu'à ce que le mur commence à influencer la flamme. Toutes les caractéristiques de la flamme sont constantes et identiques à la flamme en propagation libre.
2. La flamme ressent la présence du mur lorsqu'elle pénètre dans la zone d'influence, à environ deux épaisseurs de flammes. Le taux de dégagement de chaleur, aussi bien la valeur maximum

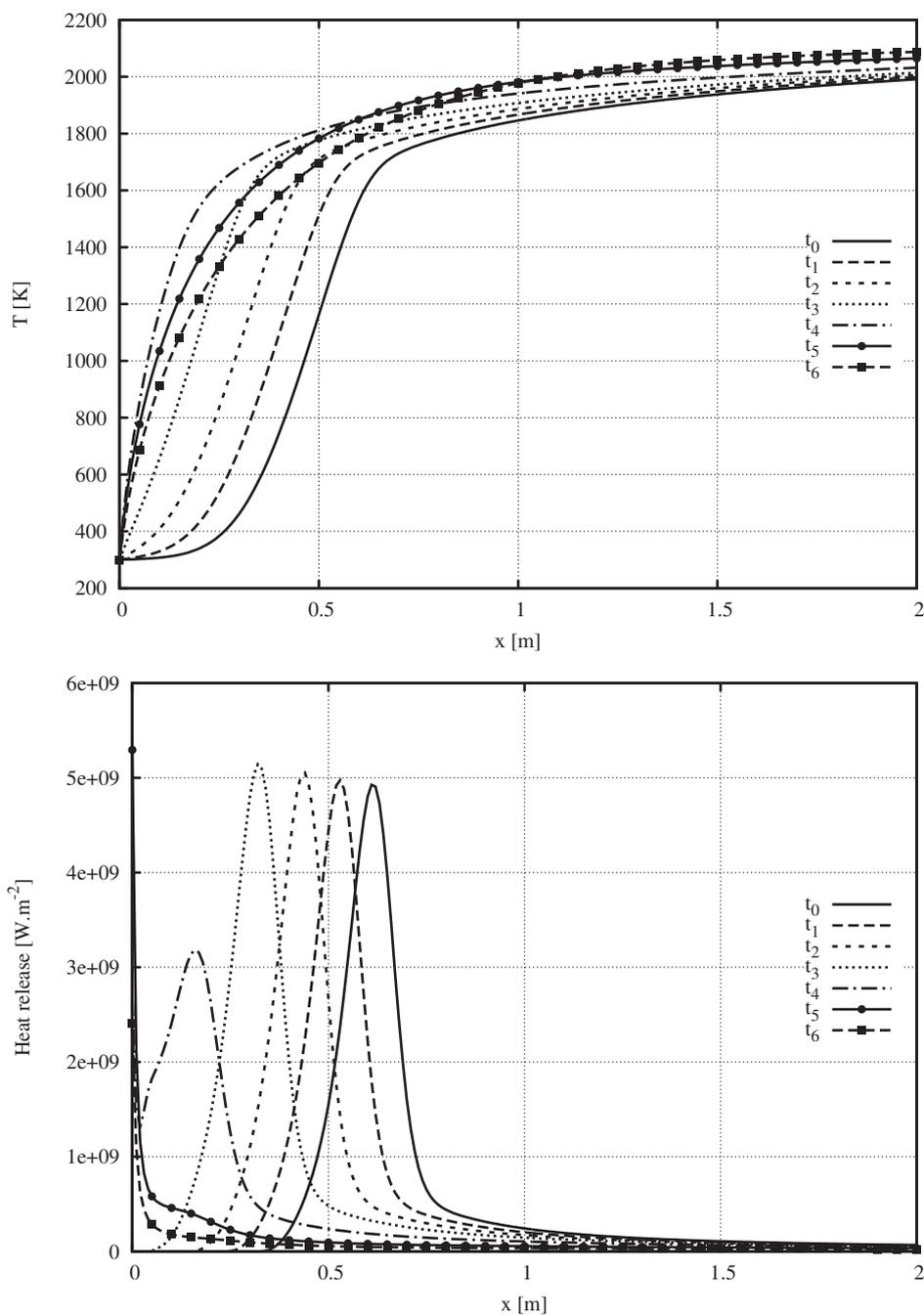


FIGURE 5.7: Profils spatiaux de température et taux de dégagement de chaleur pour différents instants, autour de l'extinction de la flamme, séparés de $200 \mu\text{s}$.

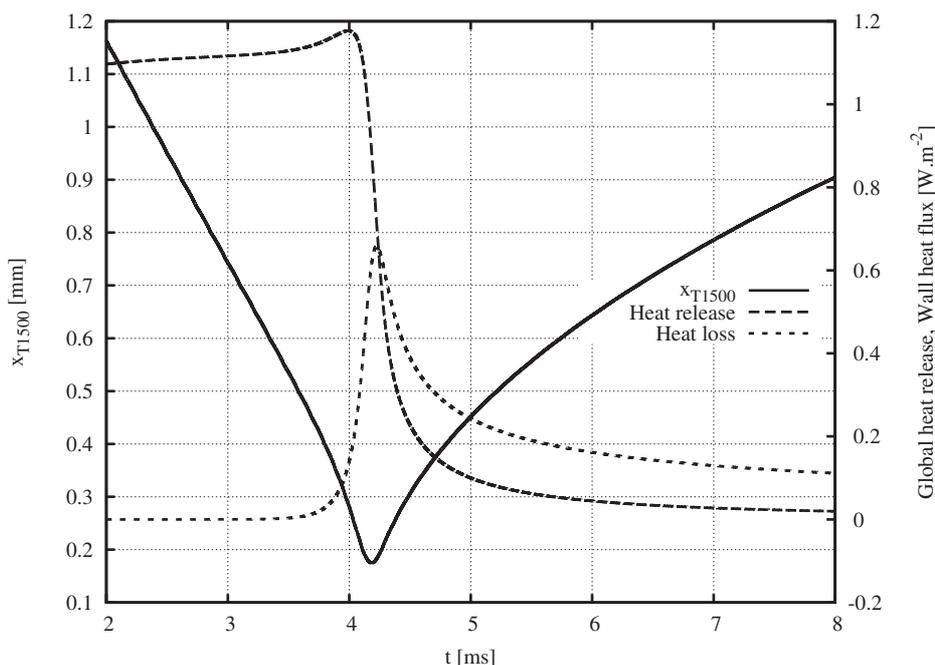


FIGURE 5.8: Evolution temporelle de la distance flamme-paroi x_{T1500} , du taux de dégagement de chaleur global et du flux de chaleur à la paroi.

que la valeur globale, augmente sensiblement et le profil de température se raidit : l'épaisseur de flamme diminue.

3. Dès que le gradient de température atteint la paroi, l'interaction procède rapidement : le flux augmente jusqu'à atteindre sa valeur maximale en seulement 0.25 ms et son épaisseur est réduite de 25 %.
4. Après cet instant, le flux pariétal et le taux de réaction diminuent.

La distance d'extinction est souvent trouvée dans la littérature sous la forme d'une distance adimensionnée, appelée nombre de Péclet $Pe_Q = x_Q/\delta_Q$, calculée comme le rapport de la distance flamme-paroi x_Q par l'épaisseur de flamme thermique à l'extinction δ_Q . La distance x_Q dans notre cas est prise égale à x_{T1500} et l'épaisseur de flamme thermique δ_Q est calculée à chaque instant pour prendre en compte la variation du gradient de température. Dans notre cas, le nombre de Péclet est $Pe_Q = 0.67$, ce qui est très proche de la valeur trouvée par Popp *et al.* [187] : 0.7.

L'étude en raffinement de maillage sur les flammes 1D en propagation libre (cf. section précédente) a montré que la résolution de $50 \mu\text{m}$ était suffisante pour conserver une description pertinente de la flamme. Malgré des gradients thermiques et d'espèces plus forts, cette résolution a été testée sur ce cas test d'interaction flamme-paroi. Les résultats obtenus sont présentés sur la Fig. 5.9. La dynamique d'extinction est la même entre le cas à 10 et celui à $50 \mu\text{m}$. Le zoom sur la partie droite de la Fig. 5.9 indique que le flux maximal à la paroi reste le même. La distance flamme-paroi semble légèrement affectée car la résolution de $50 \mu\text{m}$ entraîne une réduction d'environ $100 \mu\text{m}$ de la distance minimale entre l'iso $T = 1500 \text{ K}$ et la paroi. Cependant, ces résultats restent en très bon accord et cette résolution est suffisante pour prendre en compte la dynamique de l'extinction de la flamme proche-paroi.

Comme l'a montré la recherche bibliographique, les effets Soret et Dufour peuvent être non négligeables dans certaines conditions thermodynamiques. L'influence de ces effets thermodiffusifs a été

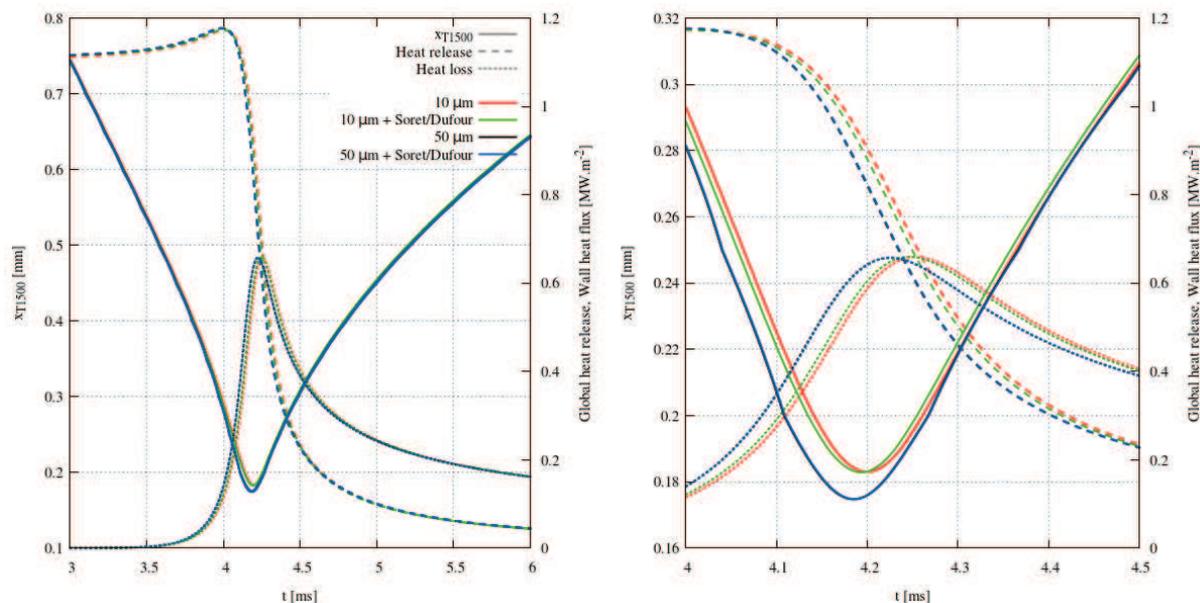


FIGURE 5.9: Evolution temporelle entre 3 et 6 ms de la distance flamme-paroi x_{T1500} , du taux de dégagement de chaleur global et du flux de chaleur à la paroi (partie gauche) et zoom entre 4 et 4.5 ms, au moment de l'extinction (partie droite).

étudiée dans ce cas test, proche de notre configuration 3D. La détermination des flux Soret et Dufour a été implémentée dans le solveur YALES2 et le cas test d'interaction flamme-paroi reproduit en les prenant en compte : les résultats ont été ajoutés à la Fig. 5.9. Avec une résolution de $10 \mu\text{m}$, les effets Soret et Dufour modifient très légèrement l'interaction flamme-paroi, qui est légèrement plus rapide, mais conserve le flux maximal ainsi que la distance flamme-paroi. Avec une résolution de $50 \mu\text{m}$, les évolutions temporelles avec et sans prise en compte des effets thermodiffusifs sont confondues. Le mécanisme d'extinction de la flamme n'est pas affecté par les effets Soret et Dufour dans ces conditions opératoires.

5.1.4 Etude de la convergence en maillage : bec bunsen 2D

La validation de la stratégie de modélisation de la chimie sur le cas d'une flamme laminaire Bunsen est présentée ici. Le schéma de la configuration est proposé sur la Fig. 5.10. Un maillage de départ avec une taille de maille de $180 \mu\text{m}$ dans le front de flamme a d'abord été créé. Plusieurs maillages ont été construits à partir de ce premier maillage grâce au raffinement automatique proposé par YALES2, découpant chaque triangle en quatre triangles. Un calcul de référence, sur lequel le front de flamme est parfaitement résolu, est effectué avec le maillage ayant subi trois niveaux de raffinement successifs. Ainsi la résolution du maillage dans le front de flamme est de $22.5 \mu\text{m}$. Le mélange réactif est un prémélange méthane/air à richesse $\phi = 1$, et température $T = 300 \text{ K}$. Les réactifs sont injectés avec une vitesse $u_{in} = 3 \text{ m.s}^{-1}$.

Dans ces simulations, l'extrémité de la flamme est fortement courbée et présente des propriétés de propagation complexes [178], difficiles à capter avec un maillage grossier. Aussi, la vitesse de flamme s_L obtenue avec chaque maillage sera comparée au calcul de référence et non à la vitesse obtenue avec une flamme 1D laminaire. Cette vitesse de flamme s_L est obtenue en mesurant l'angle du demi-cône α ,

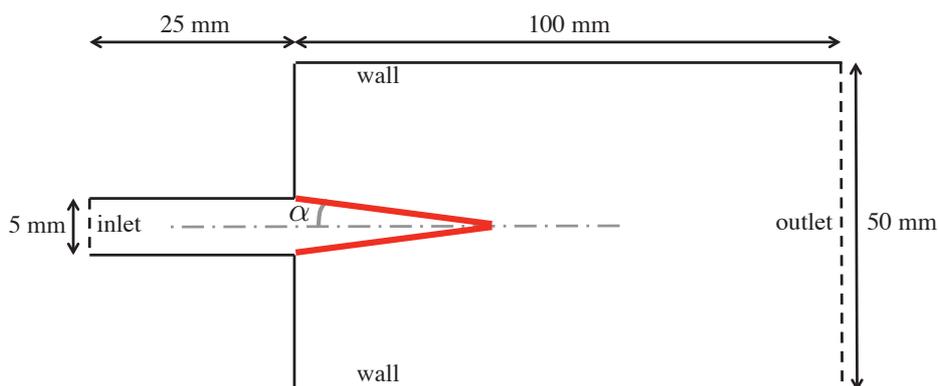


FIGURE 5.10: Schéma du cas test Bunsen.

Taille de maille dans le front de flamme Δx [μm]	180	90	45	22.5
Angle α [$^\circ$]	4.91	6.68	6.73	6.71
Vitesse de flamme s_L [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]	0.257	0.349	0.352	0.351

TABLE 5.2: Résultats obtenus sur chaque cas de la flamme Bunsen.

montré sur la Fig. 5.10. et calculé grâce à la formule suivante :

$$s_L = u_{in} \sin(\alpha) . \quad (5.3)$$

Les résultats sont rassemblés dans le Tab. 5.2. La vitesse de flamme obtenue semble converger vers la vitesse de référence dès le second maillage, soit avec une taille de maille de $90 \mu\text{m}$. Ce résultat confirme la résolution $50 \mu\text{m}$ choisie à partir des précédents cas tests.

Outre l'analyse sur la taille de maille, cette étude de flamme Bunsen a permis de mettre en évidence le coût important que constitue le calcul des termes sources de la chimie. En effet, ce dernier peut représenter plus de 90 % du temps de calcul d'une itération. Une évaluation locale de ce temps est présentée Fig. 5.11 (a). On constate que le coût de calcul de la chimie est beaucoup plus important dans le front de flamme que dans les gaz frais ou les gaz brûlés. La profil de coût CPU de la chimie le long de l'axe de symétrie Fig. 5.11 (b) indique un facteur dix sur ce coût entre la zone de flamme et en dehors. Cet écart est dû à l'utilisation de l'intégrateur raide pour la chimie comme décrit en section 3.6.2 : ces méthodes utilisent un pas de temps qui s'adapte à la raideur du système. Dans la flamme, l'évolution des fractions massiques et de la température est plus forte qu'ailleurs, le pas de temps y est plus faible. Cela provoque un déséquilibre spatial de la charge de travail. Sur un calcul séquentiel, cet effet n'a aucune conséquence. En revanche, pour un calcul parallèle, les processeurs contenant beaucoup de points dans la zone de flamme auront besoin de plus de temps pour calculer l'intégration des termes sources que ceux qui n'en n'ont pas. L'ensemble du calcul sera alors plus lent, l'ensemble des processeurs devant attendre le plus lent.

Un moyen de s'affranchir de ce problème est de répartir la charge de travail de l'intégration des termes sources de la chimie dynamiquement sur tous les processeurs. L'idée est ici d'échanger les points entre processeurs afin d'améliorer la répartition du coût CPU. Aussi appelé *scheduler*, cet algorithme a été développée au cours de la thèse de Gruselle [88] et a nécessité son optimisation pour les calculs

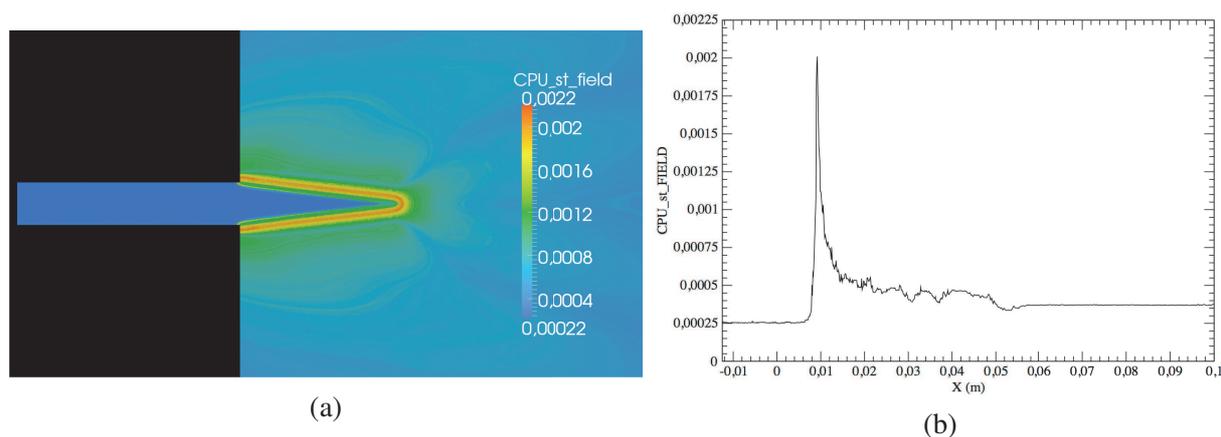


FIGURE 5.11: (a) : champ de coût de calcul du terme sources d'espèces. (b) : profil du coût de calcul de la chimie le long de l'axe de symétrie.

3D des présents travaux. En effet, la méthode de départ était suffisante pour des calculs parallèles de quelques centaines de processeurs. Elle a montré des gains importants malgré le léger surcoût de communications MPI. Néanmoins, pour les calculs sur quelques milliers de processeurs, les communications MPI pouvaient annihiler les gains observés. Une modification de l'algorithme permettant le groupement des processeurs en groupes à quantité de travail identique a été développée. L'ensemble de l'algorithme permettant la répartition de la charge de calcul est détaillée dans l'Annexe A.

Sans scheduler		Avec scheduler	
	Nombre de processeurs	128	128
	Coût de calcul réduit [μ s]	1832	1070
Répartition	Scalaires	95 %	91 %
	dont Termes sources	20 %	46 %
	dont Advection	50 %	4 %
	dont Diffusion	24 %	40 %
	Communications	57 %	8 %
	Equation de Poisson	2 %	4 %

TABLE 5.3: Synthèse des performances du processus maître pour la flamme Bunsen 2D avec le maillage de résolution $45 \mu\text{m}$ dans le front de flamme sur 128 processeurs, avec et sans répartition de la charge de calcul des termes sources.

Le Tab. 5.3 regroupe les performances de calcul avec et sans la répartition dynamique de la charge de calcul des termes sources obtenus avec 128 processeurs sur le calculateur Antares du CRIHAN. On constate que le calcul avec scheduler est 70 % plus rapide que le calcul sans scheduler. Dans les deux cas, une itération passe plus de 90 % du temps dans le transport des scalaires. En revanche, la répartition entre calcul des termes sources, convection et diffusion est différente. Dans le calcul sans scheduler, ces calculs représentent 20 %, 50 % et 24 % respectivement. Pour le calcul avec scheduler, ces proportions sont 46 %, 4 % et 40 %. Ces chiffres laissent croire que le calcul des termes sources coûte plus cher avec la répartition de charge que sans. En réalité, il n'existe pas de barrière de synchronisation entre tous les processeurs à la fin du calcul des termes sources. Le processeur maître du calcul, qui a fait le relevé

de performances, est resté 20 % du temps seulement dans le calcul des termes sources car il possède peu de points dans la flamme. Ayant fini avant les processeurs les plus lents, il est passé dans la partie "Advection" où il a dû attendre ses processeurs voisins. C'est pour cette raison que le pourcentage y est aussi important. Cet effet est d'ailleurs observable dans la partie "Communications" qui représente 57 % de l'itération. Ce chiffre important est en grande partie constitué du temps d'attente du processeur maître. Le calcul avec scheduler présente une répartition plus équilibrée avec seulement 8 % passé dans les communications. Ici, le processeur maître a passé plus de temps dans le calcul des termes sources car la charge de calcul est partagée. En conséquence, tous les processeurs terminent au même moment et le temps d'attente est réduit au minimum.

La répartition dynamique de charge sur le calcul des termes sources a montré une amélioration très importante des performances sur ce cas test 2D bunsen. L'algorithme sera utilisé pour les simulations 3D.

5.2 Etude de la combustion air-méthane dans le brûleur centimétrique MESO-CORIA

5.2.1 Présentation du cas de calcul

Point de fonctionnement

Le calcul réactif avec mélange méthane/air a été réalisé afin de pouvoir comparer les résultats à l'expérience de Liu [137]. Dans cet objectif, la même géométrie que dans le chapitre précédent a été utilisée et un point de fonctionnement expérimental a été reproduit. Les conditions opératoires sont rassemblées dans le Tab. 5.4. Il s'agit d'un mélange méthane-air proche de la stœchiométrie, avec une puissance chimique injectée de 87 W. La température de paroi, mesurée à l'aide d'un thermocouple insérée dans le solide, est de 417 K. Le temps de séjour, évalué comme le rapport entre le volume du domaine et le débit volumique, est de l'ordre de 8.6 ms.

Paramètres numériques

Les simulations numériques 3D du brûleur MESO-CORIA ont été réalisées avec le solveur VDS de YALES2, en utilisant une approche de chimie multi-espèces. Le schéma cinétique Coffee [40] a été sélectionné à partir des cas tests précédents. Le maillage utilisé est le maillage M2 possédant une taille de maille homogène $\Delta x = 50 \mu\text{m}$ et composé de 34.2 millions de tétraèdres et 6.17 millions de nœuds (voir section 4.3.1). La modélisation de la turbulence de sous-maille est assurée par le modèle Smagorinsky dynamique [135]. D'après les calculs non réactifs, ce modèle couplé au maillage M2 n'agit que dans la

Cas	C1
Débit massique de méthane $\dot{m}_{\text{CH}_4} [\times 10^{-6} \text{ kg.s}^{-1}]$	1.74
Débit massique d'air $\dot{m}_{\text{air}} [\times 10^{-6} \text{ kg.s}^{-1}]$	29.0
Richesse globale $\phi [-]$	1.03
Puissance chimique injectée $P_{in} [\text{W}]$	87.0
Température de paroi $T_w [\text{K}]$	417
Temps de séjour moyen $\tau [\text{ms}]$	8.6

TABLE 5.4: Operating conditions for the considered computations.

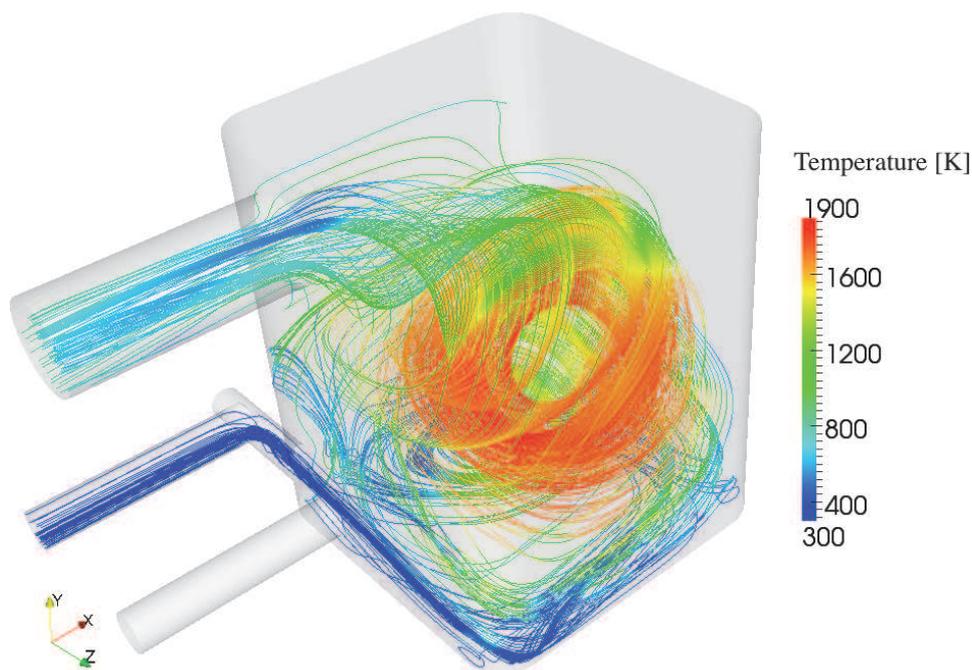


FIGURE 5.12: Lignes de courant de l'écoulement dans le brûleur, coloriées par la température.

zone de jet et à l'impact du jet sur la paroi. En dehors de cette zone, le modèle de sous-maille n'agit pas. Ainsi le front de flamme est bien résolu, avec environ huit points dans le front de flamme. Les termes sources filtrés issus des équations (3.100) et (3.101) de la LES sont modélisés par leurs valeurs non filtrées, en supposant un Dirac pour la PDF(Y_k, T) :

$$\overline{\dot{\omega}_k} = \dot{\omega}_k \quad \text{et} \quad \overline{\dot{\omega}_T} = \dot{\omega}_T. \quad (5.4)$$

Les calculs non réactifs ont aussi démontré que le maillage M2 était suffisant pour la résolution de la couche limite aux parois. Aucune loi de paroi n'a été ajoutée : une condition de paroi non glissante et isotherme est appliquée. La mesure du flux thermique pariétal a demandé le développement d'une stratégie particulière, développée dans la section 5.1.3.

L'allumage du mélange réactif à l'intérieur de la chambre a été réalisé grâce à une boule de gaz brûlés imposée au centre du domaine. Le calcul a ensuite convergé pendant plusieurs dizaines de millisecondes avant de commencer l'analyse de la combustion dans le brûleur.

5.2.2 Topologie de l'écoulement

Sur la Fig. 5.12, les lignes de courant montrent comment les réactifs se mélangent dans le domaine, créant la recirculation whirlée qui devient une zone de recirculation centrale (ou *Central Recirculation Zone* en anglais). Comme attendu, les gaz brûlés chauds sont concentrés dans cette zone de recirculation alors que les gaz frais restent près des parois froides. L'identification des structures turbulentes est réalisée à l'aide d'isocontours du critère-Q, présentés sur la Fig. 5.13. De petits tourbillons sont créés dans le jet d'air, plissant le front de flamme dans la zone d'injection des réactifs. En progressant dans la chambre, les structures tourbillonnaires sont moins présentes et le front de flamme adopte une topologie plus laminaire.

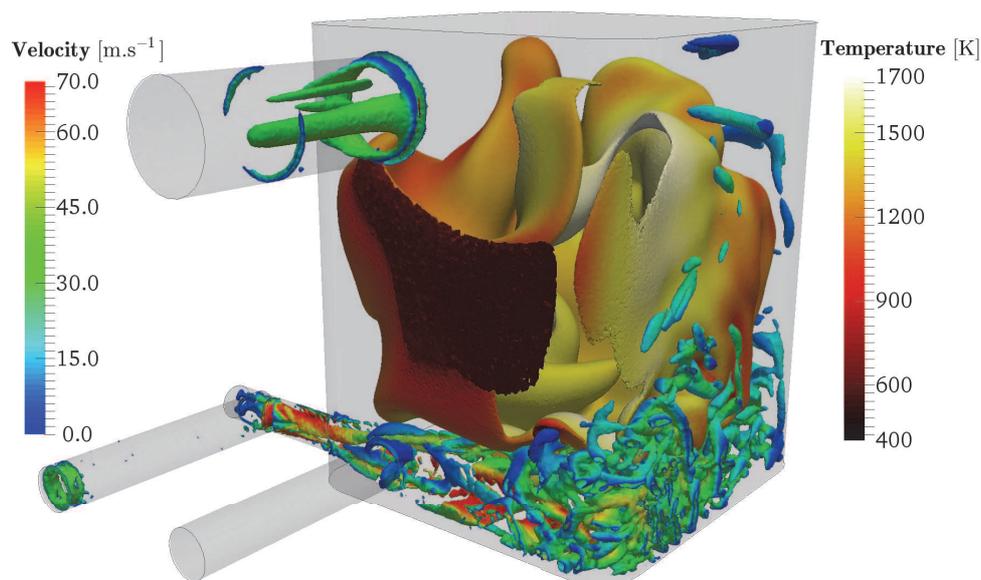


FIGURE 5.13: Iso-contour instantané 3D de critère-Q colorié par la vitesse (couleurs arc-en-ciel) et iso-contour de taux de dégagement de chaleur (en couleur feu).

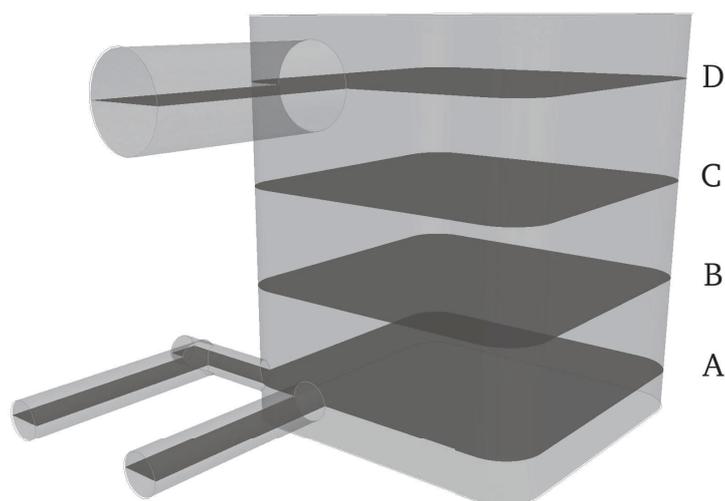


FIGURE 5.14: Vue 3D des quatre plans étudiés dans la Fig. 5.15 : plans A à $y=1$ mm, B à $y=3.5$ mm, C à $y=6$ mm et D à $y=8.5$ mm.

La Fig. 5.15 montre une coupe instantanée de vitesse, scalaire temps de résidence, richesse, température et taux de dégagement de chaleur suivant quatre plans. Ces plans sont répartis suivant la direction \vec{y} , séparés de 1.5 mm, du plan d'injection (plan A) jusqu'au plan de sortie (plan D), comme indiqué sur la figure 5.14.

La première colonne de la Fig. 5.15 représente la norme de la vitesse. Sur le plan A, le jet d'air impacte la paroi opposée au tube d'injection, créant de fortes fluctuations de vitesse en proche paroi puis mène ensuite au tourbillon central. Comme le jet d'air est injecté tangentiellement à la paroi, l'écoulement commence à tourner et créer la topologie de l'écoulement whirlé. Ce comportement tourbillonnaire est observé sur les plans B et C, mais avec une plus faible intensité turbulente. Sur le plan D, l'influence

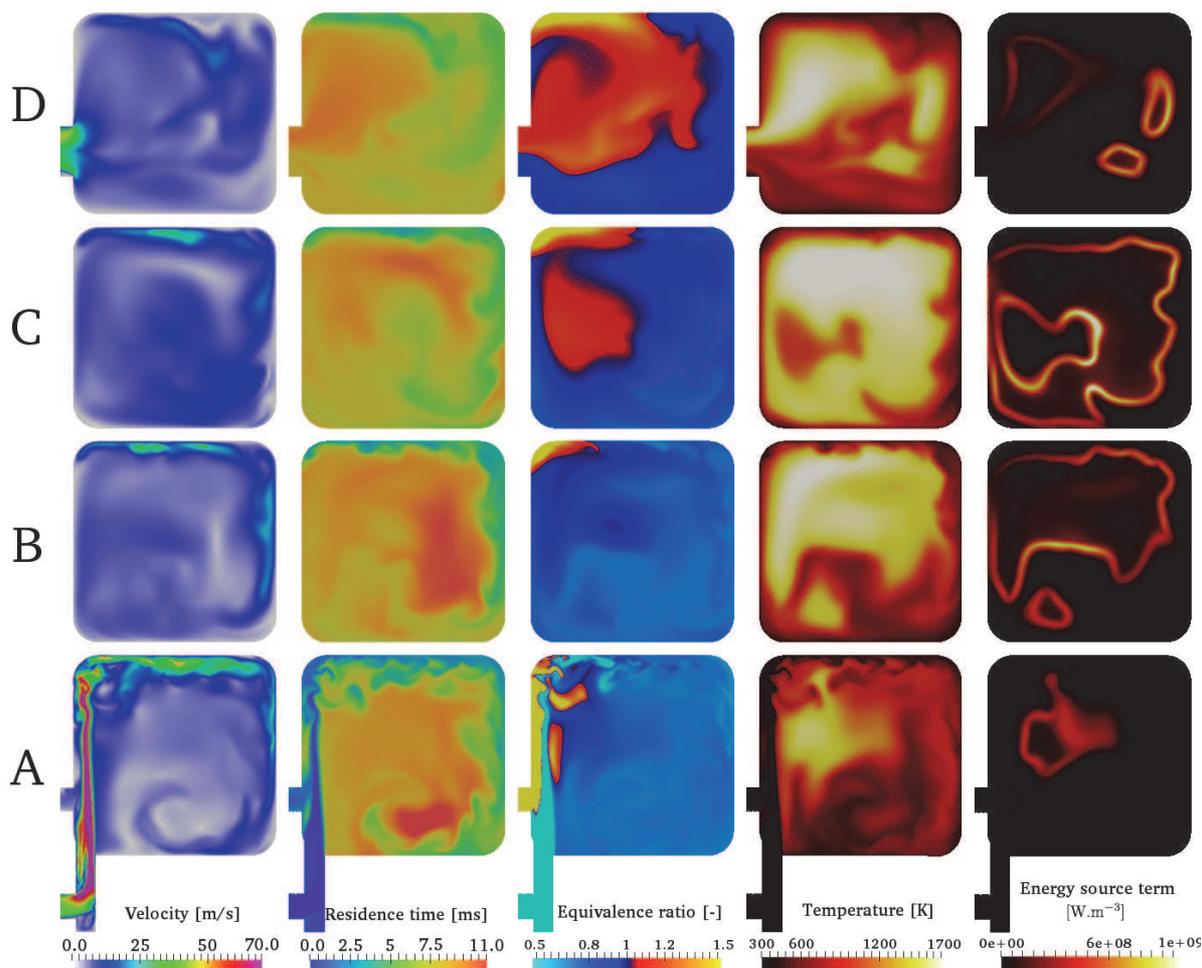


FIGURE 5.15: Champs instantanés de vitesse, scalaire temps de résidence, richesse, température et terme source d'enthalpie sur les quatre plans le long de l'axe y , du plan d'injection au plan de sortie.

de la sortie modifie l'écoulement qui devient plus complexe et au comportement tourbillonnaire moins évident.

En suivant l'écoulement, après la zone d'injection, on observe de grandes fluctuations spatiales de la zone de réaction. Le rendu volumique de la Fig. 5.16 ainsi que la dernière colonne de la Fig. 5.15 montre que des fluctuations hydrodynamiques favorisent le plissement de la flamme. La troisième colonne de la Fig. 5.15 montre des inhomogénéités de richesse, aussi responsables de la localisation de la flamme. En effet, des régions de gaz frais trop pauvres ou trop riches en combustible peuvent mener à l'extinction locale de la flamme car le mélange est en dehors du domaine de flammabilité. Cependant, des effets instationnaires peuvent localement modifier la dynamique de flamme : la stratification en richesse peut soutenir ou empêcher la combustion de se produire.

Les comportements instationnaires de l'écoulement sont essentiellement liés au mélange incomplet de l'air et du méthane. Des chemins préférentiels ou des zones mortes de combustible peuvent notamment créer ces larges inhomogénéités de richesse. Pour étudier ces phénomènes, l'indicateur de temps de résidence τ_{res} présenté en section 4.2.4 a été utilisé. Comme montré sur la seconde colonne de la Fig. 5.15, le scalaire τ_{res} commence à 0.0 ms en entrée du domaine et augmente jusqu'à atteindre 11 ms dans les gaz brûlés de la zone de recirculation centrale. Des valeurs plus faibles du temps de résidence

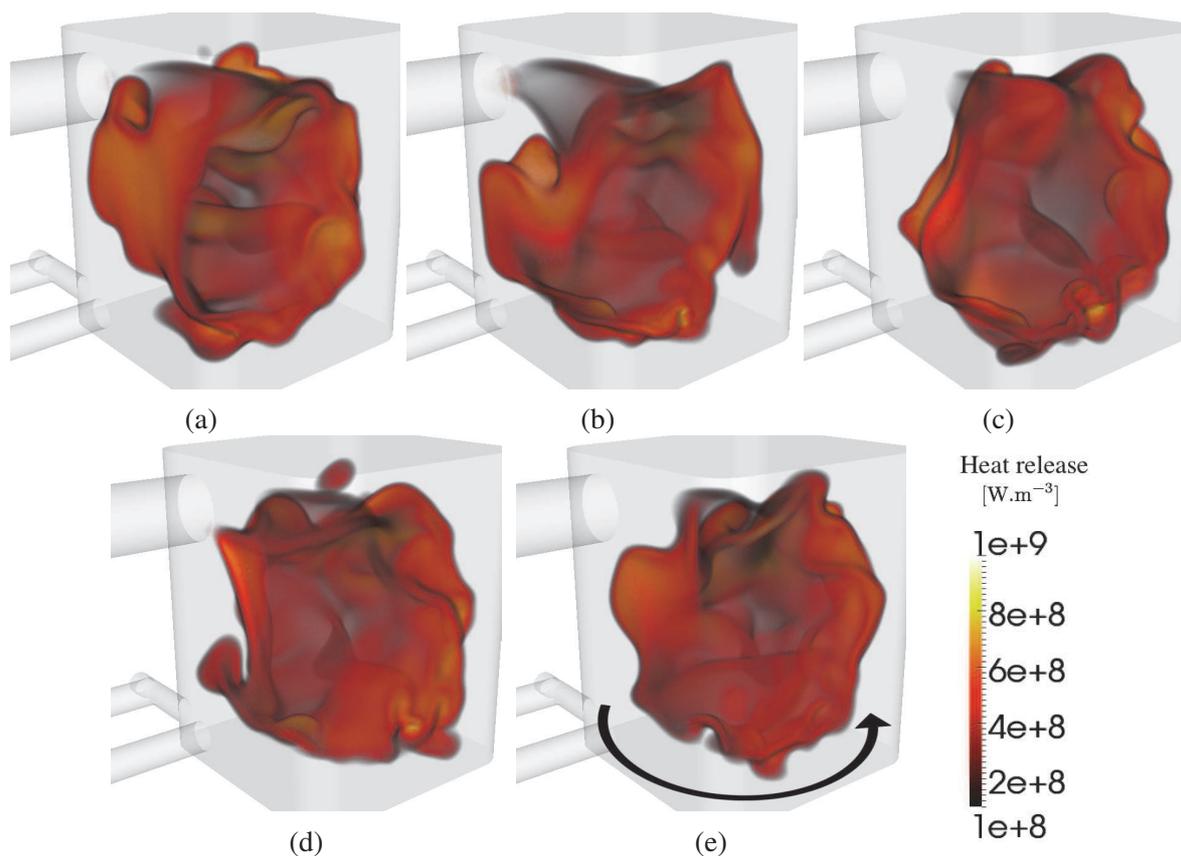


FIGURE 5.16: Rendu volumique 3D du taux de dégagement de chaleur local à différents pas de temps séparés de 0.86 ms (10 % du temps de passage moyen).

sont trouvées près des parois, indiquant la présence de gaz frais. Comme attendu avec la topologie de l'écoulement whirlé, le cœur chaud central montre les plus fortes valeurs de temps de résidence, supérieures à 10 ms.

5.2.3 Structure de flamme

La dernière colonne de la Fig. 5.15 montrant le taux de dégagement de chaleur indique que la flamme adopte une forme sphérique plissée. C'est aussi ce qui peut être observé sur le rendu volumique 3D de la Fig. 5.16 pour différents instants. A cause de l'extinction de flamme en proche paroi, le front de flamme est principalement confiné à la zone de recirculation centrale comme attendu. Du plissement de faible amplitude est visible sur le front de flamme, près des injections d'air et méthane, alors que le plissement est de plus grande échelle proche de la sortie. La topologie du front de flamme est gouvernée par la structure de l'écoulement whirlé et tourne dans la direction anti-horaire comme indiqué par la flèche noire de la Fig. 5.16 (e). Sur la Fig. 5.16 (b), on peut observer une poche de gaz toujours en train de brûler se séparant du reste de la zone réactive et se dirigeant vers le tube de sortie. De tels événements peuvent mener à une combustion incomplète et à la production d'imbrûlés.

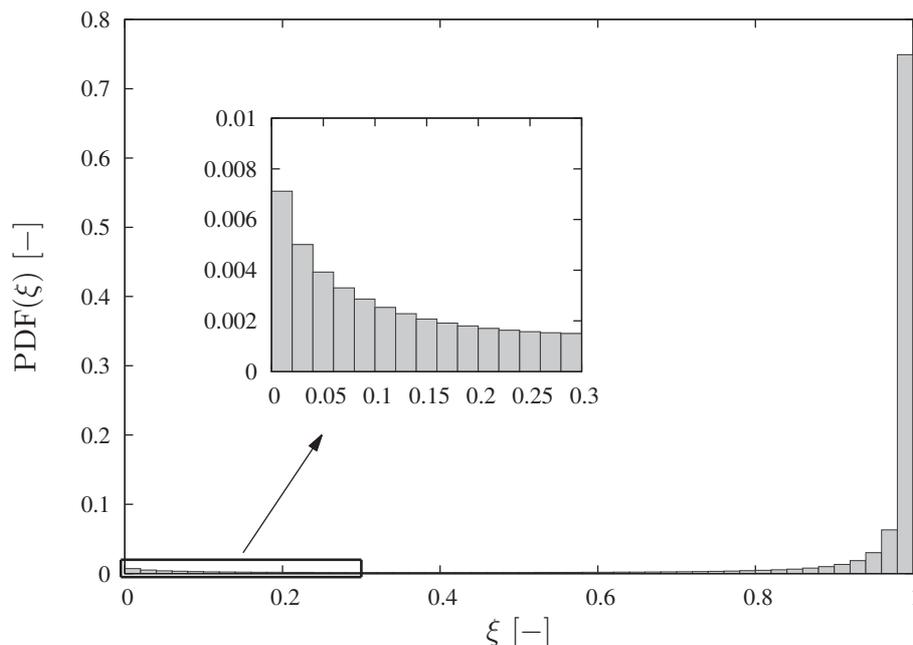


FIGURE 5.17: Fonction Densité de Probabilité de l'indice de flamme ξ conditionné à la zone réactive.

5.2.4 Régime de combustion

Dans la configuration étudiée, le méthane et l'air sont injectés séparément dans la chambre de combustion. La combustion en régime de prémélange ou en régime de diffusion peut alors apparaître. Cependant, la topologie whirlée de l'écoulement est supposée amplifier le mélange des réactifs et favoriser le régime de prémélange. Afin d'identifier le régime de combustion de la flamme, la distribution de l'indice de flamme (aussi appelé indice de Takeno) dans la zone de flamme est présentée sur la Fig. 5.17. Cet indice de flamme ξ est calculé selon

$$\xi = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O}{|\nabla Y_F| |\nabla Y_O|} \right). \quad (5.5)$$

La valeur $\xi = 0$, où les flux d'air et méthane vont dans des directions opposées, correspond au régime de diffusion. Lorsque $\xi = 1$, les gradients de combustible et d'oxydant sont alignés indiquant le régime de combustion parfaitement prémélangée. La Fig. 5.17 montre que la combustion a lieu presque uniquement en régime de prémélange. Néanmoins, comme indiqué sur le zoom sur les valeurs faibles de ξ , il existe quelques zones de la chambre où la combustion est en régime non-prémélangée. Ces points sont principalement situés dans la zone d'injection, à l'intersection des jets d'air et de méthane : des poches de méthane pur sont arrachées par le jet d'air et interagissent immédiatement avec le front de flamme. Ces dernières peuvent être la source de production de polluant imbrûlés en sortie du brûleur.

Afin de mesurer le degré de prémélange, la PDF (densité de probabilité) de richesse φ sur les volumes de contrôle composant le front de flamme a été calculée. La valeur maximum de distribution est proche de $\varphi = 0.75$ et la PDF indique que la combustion a lieu entre $\varphi = 0.7$ et $\varphi = 1.1$, bien que le point de fonctionnement global soit proche de $\varphi = 1.0$. La combustion se déroule donc essentiellement en régime pauvre ou faiblement riche et non centrée autour de la stœchiométrie. La Fig. 5.18 représente aussi la distribution du terme source de chaleur conditionné à la richesse. Cette distribution est très proche de la PDF de richesse montrant que le taux de dégagement de chaleur est libérée pour des richesses autour

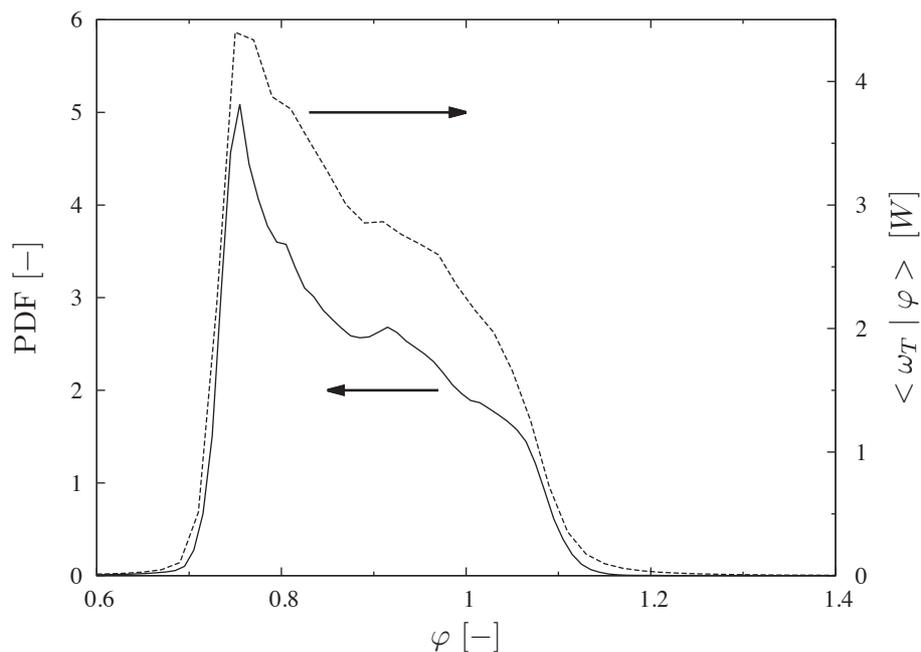


FIGURE 5.18: Fonction Densité de Probabilité de la richesse φ des zones réactives (ligne solide) et distribution du taux de dégagement de chaleur local conditionné par la richesse (ligne pointillée).

de l'unité.

Cet écart entre la richesse du point de fonctionnement et la richesse effective indique que tout le méthane injecté dans la chambre ne rencontre pas la flamme. Le mélange entre réactifs demeure donc partiel et du méthane imbrûlé devrait être trouvé en sortie du brûleur. Pour analyser ce processus, le champ de richesse est tracé sur la troisième colonne de la Fig. 5.15 distinguant les zones riches (en jaune) des zones pauvres (en bleu clair), le long de la direction y . Une zone très riche peut être observée dans la partie supérieure gauche de chaque plan, ressemblant à un chemin préférentiel de méthane le long de la recirculation de coin. De plus, sur le plan D, une poche riche en méthane semble être aspirée par la sortie. Ce chemin préférentiel s'étend de l'entrée du méthane dans le domaine jusqu'à sa sortie, sans rencontrer la flamme, ce qui provoque un gaspillage de carburant. Cependant, certaines poches de gaz riches interagissent avec la flamme, menant à des portions de flamme dont la richesse est supérieure à 1.0.

Afin d'en apprendre plus sur le régime de combustion et comme la combustion s'effectue essentiellement en régime prémélangé, il peut être intéressant de tracer le diagramme de combustion turbulente. Une stratégie de post-traitement identique à Wang [222] est adoptée. Pour cela, la vitesse turbulente u' et l'échelle intégrale l_t sont obtenues comme décrit dans la section 4.2.2. Les caractéristiques de la flamme laminaire sont supposées constantes et correspondent au point de fonctionnement : vitesse de flamme $s_0^L = 0.417 \text{ m.s}^{-1}$ et épaisseur diffusive $\delta = D_{th}/s_0^L = 60 \mu\text{m}$. La Fig. 5.19 montre le *scatter plot* des gaz frais devant la flamme sur le diagramme de combustion turbulente pour flamme de prémélange, comme proposé par Peters [175]. La plupart des points se situent entre les lignes $Ka = 1$ et $Ka = 100$, i.e. dans la zone de flamme plissée-épaissie. Dans ce régime, les tourbillons turbulents de l'écoulement peuvent pénétrer et épaissir la zone de préchauffage de la flamme mais seulement plisser la zone de réaction. La flamme est principalement trouvée autour d'un nombre de Reynolds turbulent de 80, valeur faible pour un système de combustion. De plus, certains points situés loin de la zone d'injection sont

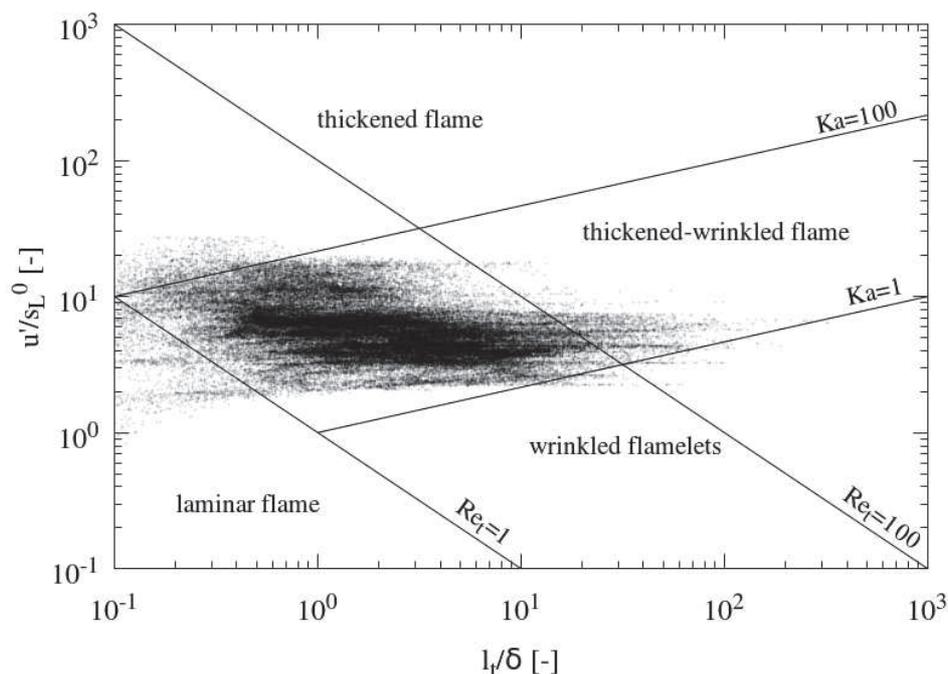


FIGURE 5.19: Diagramme de combustion turbulente en régime prémélangée.

trouvés à des valeurs $Re_t < 10$, c'est-à-dire brûlant dans le régime de flamme laminaire.

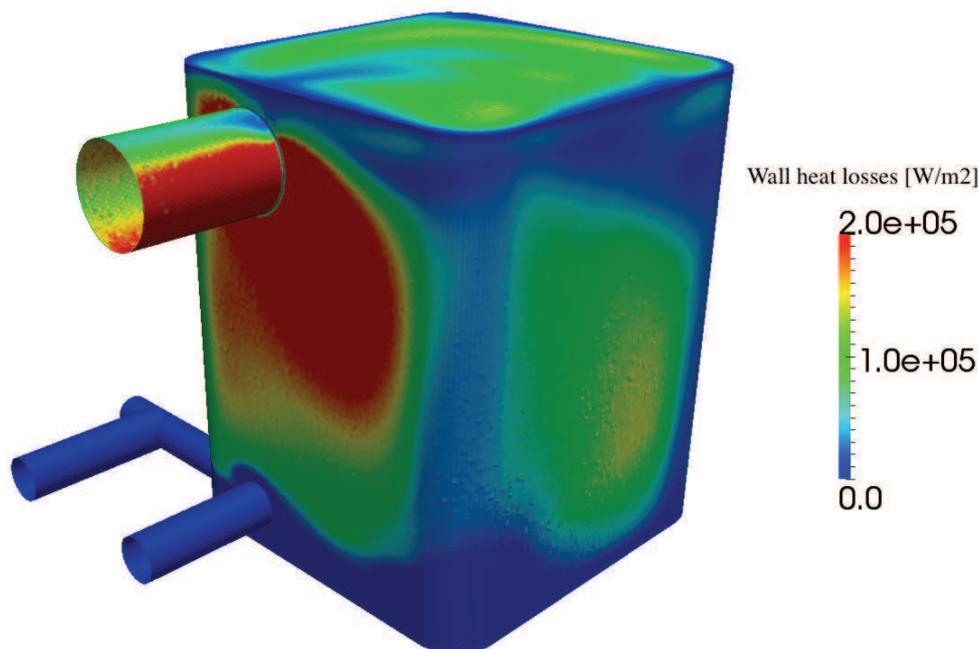
5.2.5 Performances du brûleur

Pour évaluer les performances globales du brûleur, il est important de mesurer précisément le flux de chaleur perdu aux parois, où une condition de Dirichlet sur la température est imposée. Une telle estimation requiert le calcul précis du bilan des flux de chaleur sur chaque volume de contrôle à la paroi, comme expliqué dans la section 5.1.3. Une visualisation 3D des pertes thermiques moyennées en temps est présentée sur la Fig. 5.20. Le flux de chaleur pariétal peut atteindre 0.5 MW/m^2 lorsque la flamme interagit avec le mur. Cette valeur correspond au maximum de flux de chaleur observé pour une flamme méthane-air laminaire à pression atmosphérique [187].

Le Tab. 5.5 donne le bilan énergétique du brûleur intégré en temps. Les données sont moyennées sur une période de 46 ms après un temps de convergence de 24 ms. Ce temps d'intégration correspond à plus de cinq temps de passage. Sur ce bilan, il est important de noter que le taux de dégagement de chaleur intégré en temps et en espace $P_r = 53 \text{ W}$ est très inférieur à la puissance chimique injectée P_{in} de 87 W. Le rapport de ces deux quantités représente le rendement de conversion $\eta_{conv} = P_r/P_{in}$, environ 61 % dans ce cas. Cela indique que la combustion demeure largement incomplète. En effet, le rendement chimique peut être calculé grâce à la formule suivante :

$$\eta_{chem} = \frac{[\text{CO}_2]}{[\text{CO}_2] + [\text{CO}] + [\text{CH}_4]}, \quad (5.6)$$

où les crochets représentent les concentrations moléculaires des espèces. Le rendement chimique calculé à partir des résultats de simulation est d'environ 52 %, valeur cohérente avec celle obtenue lors de l'expérience de Liu [137] : 63 %.

FIGURE 5.20: Pertes thermiques pariétales moyenne en W/m^2 .

Puissance chimique injectée P_{in} [W]	87.0
Puissance émise par la flamme P_r [W]	53.0
Pertes thermiques pariétales P_{loss} [W]	30.1
Bilan thermique entrée/sortie P_{out} [W]	22.9
Fraction massique de H_2O en sortie $Y_{\text{H}_2\text{O}}$ [%]	8.3
Fraction massique de CO_2 en sortie Y_{CO_2} [%]	8.0
Fraction massique de CO en sortie Y_{CO} [%]	1.8
Fraction massique de UHC en sortie Y_{UHC} [%]	1.7
Rendement de conversion η_{conv} [%]	60.9
Rendement chimique η_{chem} [%]	52.0
Rendement thermique η_t [%]	43.2

TABLE 5.5: Performances globales du brûleur, moyennées en temps, pour le cas avec méthane pur.

Les performances thermiques sont étudiées grâce au rendement thermique, calculé comme le rapport entre la puissance récupérée en sortie et le taux de dégagement de chaleur moyen $\eta_{th} = P_{out}/P_r$. Sur l'ensemble de la puissance émise par la flamme, 57% est perdu à la paroi, et seulement 43% sort du domaine. Ce niveau de pertes thermiques est très élevé, et affecte fortement le processus de combustion, les émissions polluantes et l'efficacité du brûleur.

Le rendement global du brûleur est obtenu grâce au rendement de conversion et au rendement thermique : $\eta_g = P_{out}/P_{in} = \eta_{conv}\eta_t$. Pour ce point de fonctionnement, le rendement global est de 26.3%.

Comme le rendement du brûleur est faible, on peut s'attendre à une forte production de méthane imbrûlé et de monoxyde de carbone. Pour mettre en évidence ces émissions, l'évolution temporelle des fractions massiques d'hydrocarbures imbrûlés (UHC) (composés de CH_4 , CH_3 , CH_2O et HCO), eau

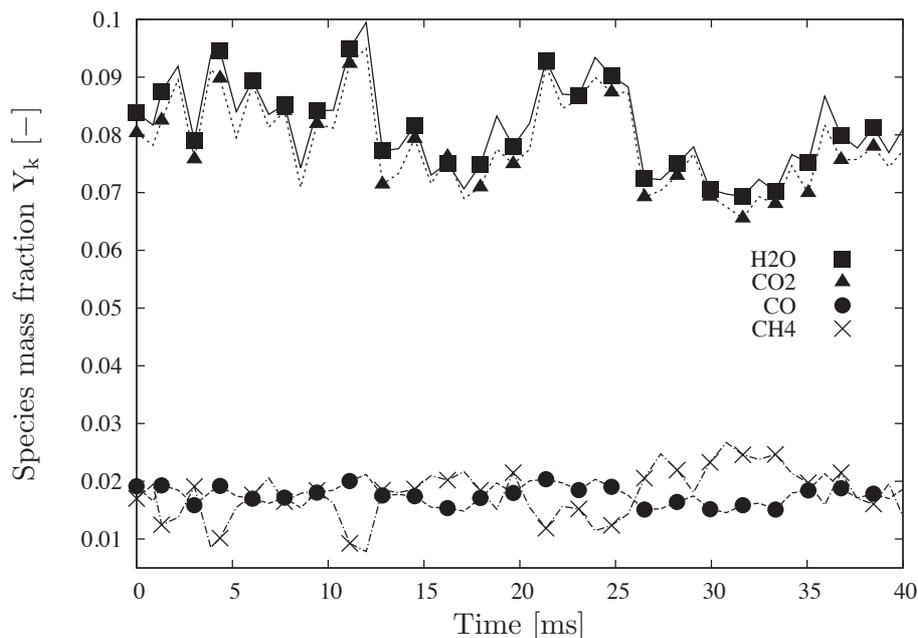


FIGURE 5.21: Evolution temporelle des fractions massiques de CO, CO₂, H₂O et CH₄ intégrées sur la sortie.

(H₂O), monoxyde de carbone (CO) et dioxyde de carbone (CO₂) intégrés sur la sortie du brûleur sont tracés sur la Fig. 5.21. Ces valeurs, moyennées en temps, sont résumées dans le Tab. 5.5. Comme attendu, de grandes quantités de UHC et CO sont trouvées en sortie. Les espèces hydrocarbonées imbrûlées représentent même 30 % du méthane injecté en entrée. L'intermittence des profils d'espèces est observable sur la Fig. 5.21, prouvant encore le comportement instationnaire de la flamme et de la formation des polluants.

Pour analyser la formation de CO, une iso-surface de fraction massique de CO colorée par la fraction massique CO₂ est présentée sur la Fig. 5.22. Cette figure montre que le CO est présent dans le front de flamme mais aussi dans les zones de recirculation de coin, indiquant l'existence d'extinction locale ou d'inhibition de recombinaison sans extinction dans ces zones. En outre, cette iso-surface sort du domaine de calcul, ce qui démontre qu'un temps de résidence trop court ou encore le refroidissement des gaz brûlés par les parois froides peut empêcher la recombinaison de CO en CO₂.

5.2.6 Performances de calcul

Ce calcul a été réalisé sur le ordinateur Curie "nœuds fins" du centre de calcul TGCC avec 1024 processeurs. Les performances du code sont rassemblées dans le Tab. 5.6. Le pas de temps limitant est le pas de temps convectif, de l'ordre de 1.7×10^{-7} s, menant à un temps de retour d'environ 10000 heures CPU par milliseconde physique calculée. Après la phase de convergence du calcul, les statistiques sont accumulées pendant environ cinq temps de passage, soit 40 ms. Cela représente donc 400 000 hCPU.

Le Tab. 5.6 comprend aussi la répartition du coût de calcul entre les sections du code les plus coûteuses. On constate que le calcul des termes sources de la chimie représente le travail le plus coûteux malgré la répartition de charge dynamique (cf. Annexe A). Néanmoins, passer uniquement 39 % du temps de calcul d'une itération pour la résolution de la cinétique chimique constitue un gain substantiel par rapport aux premiers calculs réalisés sans répartition de charge. Ce gain permet une répartition

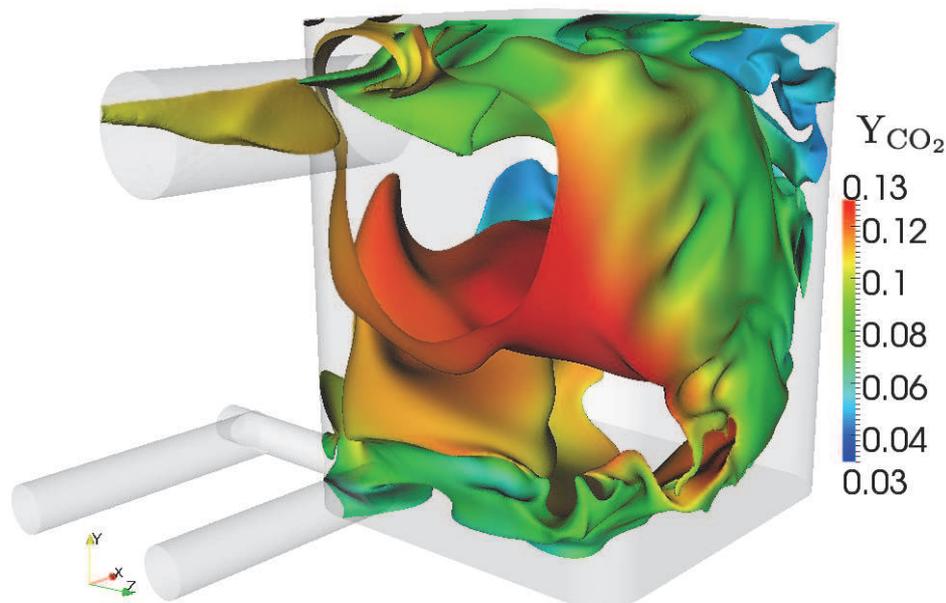


FIGURE 5.22: Iso-contour instantané de fraction massique de monoxide de carbone $Y_{CO} = 0.01$ colorié par la fraction massique de dioxyde de carbone.

Nombre d'éléments [$\times 10^6$]		34.2
Nombre de processeurs		1024
Pas de temps [μs]		0.168
Coût de calcul réduit [μs]		1030
Temps de retour [hCPU/ms]		9921
Répartition	Scalaires [%]	76
	dont Termes sources [%]	39
	dont Advection [%]	13
	dont Diffusion [%]	16
	Communications [%]	13
Equation de Poisson [%]		11

TABLE 5.6: Performances de calcul pour la configuration MESO-CORIA méthane-air sur maillage avec 34.2 millions d'éléments.

équitable entre les autres sections du code de l'ordre de 10 %.

5.3 Impact de l'enrichissement en hydrogène

5.3.1 Intérêt

L'hydrogène a de meilleures caractéristiques de résistance à l'extinction que le méthane [98]. L'ajout d'hydrogène au méthane jusqu'à maintenant injecté permettrait d'améliorer la combustion dans le brûleur mésoscopique. La stabilisation de la flamme serait favorisée, augmentant le rendement de combustion et réduisant les émissions polluantes. Ces avantages ont été largement étudiés expérimentale-

ment et numériquement dans des configurations académiques [98, 59] et sur des brûleurs macroscopiques [95, 74]. Une flamme enrichie en hydrogène présente une température adiabatique de flamme plus élevée, une plus grande vitesse de flamme turbulente ainsi que de meilleures limites de flammabilité [98]. L'enrichissement en hydrogène d'une flamme méthane-air dans des brûleurs tourbillonnaires peut mener à une flamme plus courte et robuste [196, 23], à une réduction des émissions polluantes [196, 120] et permet à la flamme de brûler sur une gamme de richesse plus grande [45]. Ces effets sont dus à un taux de dégagement de chaleur plus important par unité de surface de flamme et une plus grande vitesse laminaire de flamme. Les flammes enrichies en hydrogène sont aussi moins stables thermiquement et plus résistantes à l'extinction qu'une flamme méthane/air. La plus grande diffusivité de l'hydrogène implique un nombre de Lewis plus faible, ce qui affecte la stabilité thermodiffusive. Le taux de réaction est fortement corrélé à la courbure et la diffusion différentielle influe sur le plissement de la flamme. A cause de sa forte vitesse diffusive, l'hydrogène se concentre au pic de courbure positive [228]. Comme la flamme dans le méso-brûleur est faiblement turbulente, tous ces effets peuvent être significatifs. L'utilisation de mélanges hydrogène-air à la place de mélanges méthane-air dans des brûleurs centimétriques a déjà montré une amélioration des performances [231].

L'enrichissement en hydrogène du mélange de carburant a été étudié expérimentalement sur le brûleur MESO-CORIA par Liu [137]. Dans l'étude numérique présentée ici, deux mélanges méthane / hydrogène ont été étudiés : 50 % molaire en hydrogène pour le cas C2 et 90 % molaire en hydrogène pour le cas C3. Ces valeurs correspondent respectivement à 11 et 53 % en masse.

5.3.2 Validation sur flammes 1D

Afin de vérifier la validité de la stratégie numérique appliquée à ces enrichissements en hydrogène, des flammes 1D en propagation libre ont été calculées. Le but est de vérifier que le schéma cinétique réduit, ainsi que la résolution du maillage 3D sont adaptés pour retrouver les bonnes caractéristiques de flamme. Des flammes laminaires 1D ont été calculées avec le schéma cinétique GRI3.0 aux deux taux d'enrichissement proposés précédemment. Ce calcul sert de référence. Ces mêmes points de fonctionnement ont ensuite été calculés avec le schéma cinétique Coffee [40] à la fois avec le code Cantera et avec le code YALES2, pour une résolution de maillage $\Delta x = 50 \mu\text{m}$, équivalente à la résolution du maillage 3D. Les profils d'espèces majoritaires dans l'espace physique et dans l'espace des phases sont comparés sur la Fig. 5.23. La comparaison des profils obtenus avec Cantera et les schémas cinétiques GRI3.0 et Coffee permettent de valider le schéma cinétique Coffee car ils montrent la même dynamique de flamme que le schéma de référence. Les deux calculs avec le schéma Coffee présentent des profils d'espèces confondus. Cela indique que la résolution de $50 \mu\text{m}$ est suffisante pour correctement décrire la structure de flamme. Les vitesses de flamme laminaire correspondant aux cas C2 et C3 sont respectivement $s_L^{C2} = 0.66$ et $s_L^{C3} = 1.64 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Ces valeurs n'excèdent pas un écart de 10 % par rapport aux valeurs expérimentales de Hu *et al.* [103], ou par rapport aux valeurs obtenues avec le code Cantera et le schéma cinétique GRI 3.0. La Fig. 5.24 montre le taux de dégagement de chaleur de la flamme dans l'espace physique, normalisée par le taux de dégagement de chaleur du cas C1, le cas avec méthane uniquement. Le taux de dégagement de chaleur maximum est respectivement de 1.6 et 3.8 fois supérieur pour les cas C2 et C3, par rapport au cas C1.

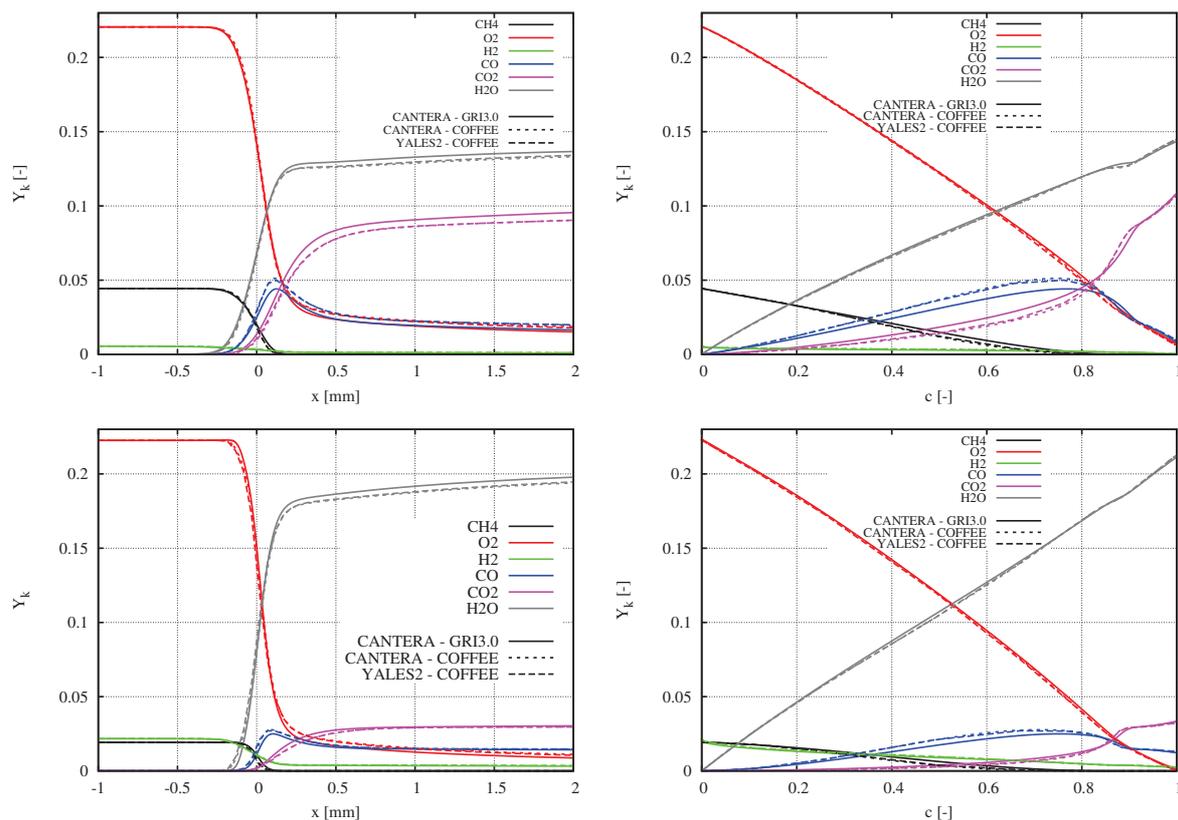


FIGURE 5.23: Comparaison de profils d'espèces majoritaires dans l'espace physique (gauche) et dans l'espace des phase (droite) pour les taux d'enrichissement des cas C2 (haut) et C3 (bas).

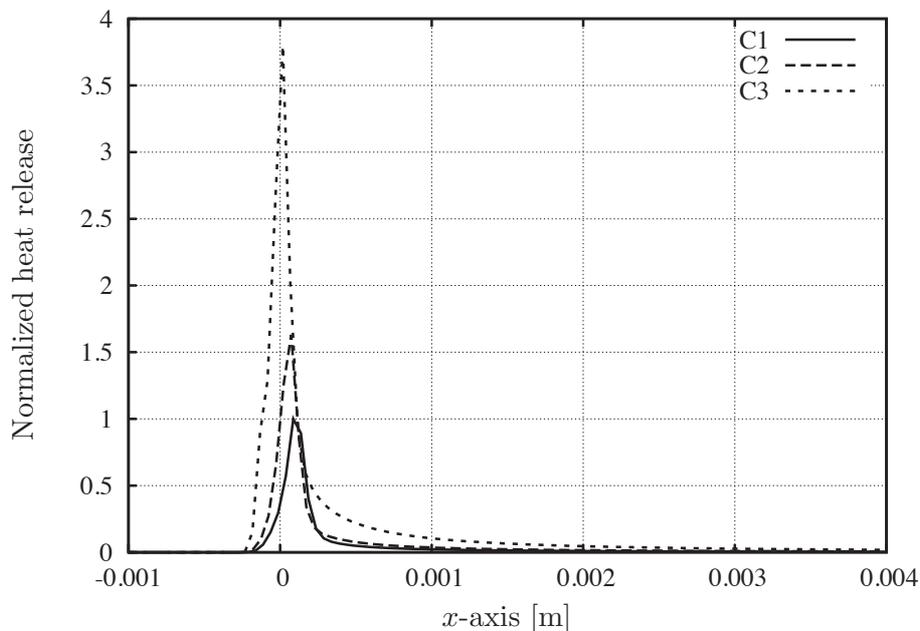


FIGURE 5.24: Taux de dégagement de chaleur dans l'espace physique de flammes 1D des cas C1, C2 et C3, normalisés par la valeur du cas C1.

Cas	C1	C2	C3
Débit massique de méthane \dot{m}_{CH_4} [$\times 10^{-6}$ kg.s $^{-1}$]	1.74	1.28	0.47
Débit massique d'hydrogène \dot{m}_{H_2} [$\times 10^{-6}$ kg.s $^{-1}$]	0.0	0.16	0.53
Débit massique d'air \dot{m}_{air} [$\times 10^{-6}$ kg.s $^{-1}$]	29.0	27.6	23.7
Richesse globale ϕ [-]	1.03	1.00	1.12
Puissance chimique injectée P_{in} [W]	87.0	83.4	87.6
Température de paroi T_w [K]	417	463	472
Temps de séjour moyen τ [ms]	8.6	8.8	8.4

TABLE 5.7: Conditions opératoires des trois cas étudiés.

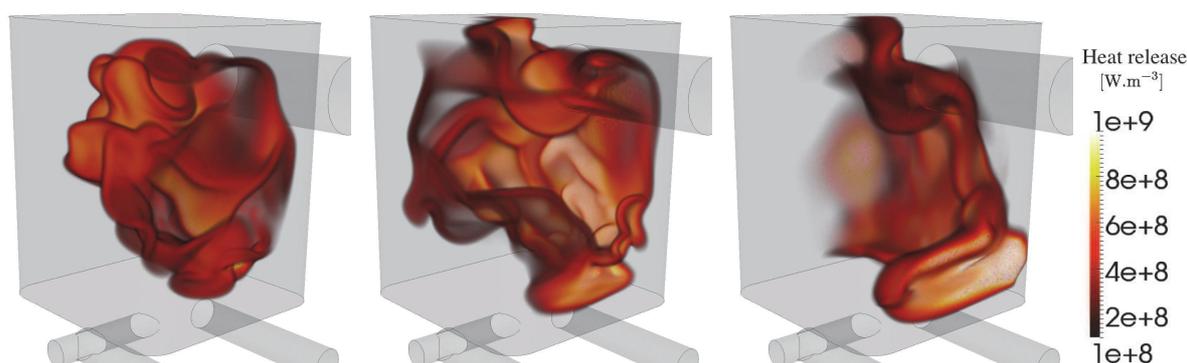


FIGURE 5.25: Rendu volumique instantané du taux de dégagement de chaleur local pour les trois cas C1 (a), C2 (b) et C3 (c).

5.3.3 Description des cas de calcul 3D

Des calculs 3D du brûleur MESO-CORIA ont été réalisés avec les deux taux d'enrichissement présentés précédemment : cas C2 pour un mélange de carburant contenant 50 % molaire d'hydrogène et le cas C3 avec 90 %. Les points de fonctionnement sont résumés dans le Tab. 5.7, en rappelant les informations du cas C1 avec méthane pur. Ces conditions opératoires enrichies présentent une puissance chimique injectée et une richesse similaire au cas méthane pur. La température de paroi est imposée égale à celle mesurée expérimentalement. Cette température augmente avec le taux d'enrichissement passant ainsi de 417 K pour le cas C1 à 463 K et 472 K pour les cas C2 et C3 respectivement.

5.3.4 Topologie de l'écoulement réactif

Expérimentalement, il a été observé que la flamme apparaissait plus proche des parois sur les cas C2 et C3. Cela peut être expliqué par la plus faible distance de coincement de la flamme hydrogène-air : 1.3 mm pour le méthane contre 0.3 mm pour l'hydrogène [115]. La Fig. 5.25 montre des rendus volumiques instantannés du taux de dégagement de chaleur pour chaque cas. Dans le cas C2, la flamme présente la même topologie de flamme que dans le cas C1 mais paraît plus ridée et plus proche des murs. Dans le cas C3, la topologie de la flamme est différente : elle est moins plissée, plus confinée et encore plus proche des parois et du jet d'air. La flamme est aussi enroulée autour du jet d'air, là où le mélange entre air et combustible n'est pas complet. Cette observation est cohérente avec une extension des limites de flammabilité observées expérimentalement [196].

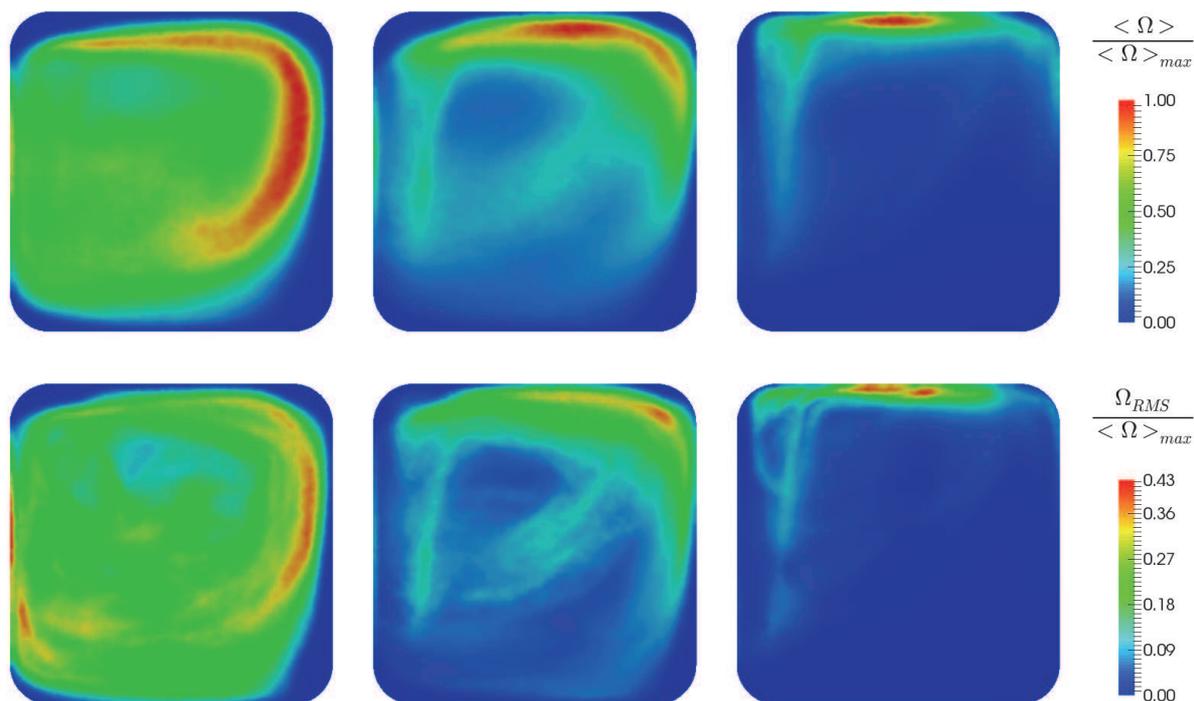


FIGURE 5.26: Taux de dégagement de chaleur intégré le long de l'axe y normalisé par la valeur moyenne maximale de chaque cas C1, C2 et C3 (de gauche à droite) : moyenne temporelle (haut) et RMS (bas).

Afin d'analyser la position de la flamme, le taux de réaction de chaleur est intégré le long de la direction axiale :

$$\Omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_T dy, \quad (5.7)$$

puis Ω est moyenné en temps. La Fig. 5.26 montre les champs moyens et RMS de Ω pour chaque cas. Comme chaque cas présente des dégagements de chaleur différents, ces valeurs sont normalisées par la valeur maximale de taux de dégagement de chaleur moyen $\langle \Omega \rangle_{max}$. Dans le cas C1, la flamme est globalement répartie dans tout le domaine. Comme le front de flamme tourne autour de l'axe y , de fortes fluctuations sont aussi observées dans toute la chambre. En moyenne, la flamme plus plissée du cas C2 est plus confinée dans la zone opposée à l'injection. Une propagation de flamme près du jet d'air commence aussi à être visible. Pour le cas C3, la Fig. 5.26 montre que la flamme brûle seulement près de la paroi opposée à l'injection d'air et autour du jet d'air. Le mélange air-carburant, après avoir impacté la paroi, longe cette paroi et rencontre rapidement la flamme. Les réactifs frais sont confinés dans un petit volume. Le reste du domaine est rempli de gaz brûlés refroidis par les parois plus froides. Dans le cas C3, la topologie de l'écoulement attendue comme dans les cas C1 et C2 n'est plus retrouvée.

L'effet de l'ajout d'hydrogène peut aussi être analysé avec l'évolution de la surface de flamme, montré sur la Fig. 5.27, définie comme une iso-surface de la variable de progrès c et en ne prenant que les points où le taux de dégagement de chaleur dépasse 10 % de la valeur maximum. Cette variable de progrès c est calculée comme $c = Y_c/Y_{c,eq}$ où $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}$ et $Y_{c,eq}$ correspond à Y_c à l'équilibre chimique. La composition spatiale variant spatialement et temporellement, l'équilibre chimique est calculé en chaque point grâce à la librairie externe CEQ¹. La surface de flamme moyenne des cas C1 et C2

1. CEQ est une librairie codée en Fortran 90 permettant de calculer l'équilibre chimique d'un mélange en minimisant la

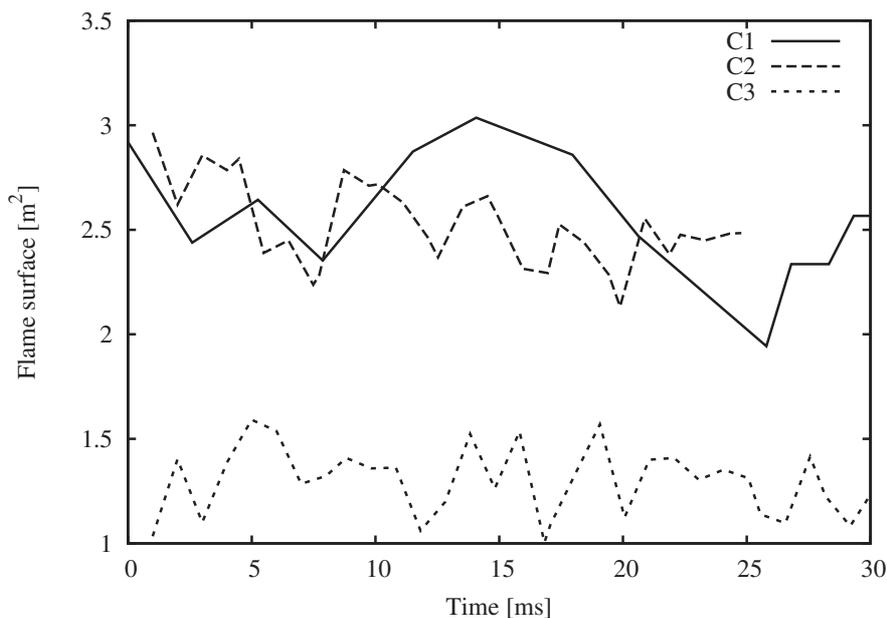


FIGURE 5.27: Evolution temporelle de la surface de flamme pour chaque cas étudié.

atteignent les mêmes valeurs moyennes, mais de plus grandes fluctuations de surface sont observées pour le cas C2. Cela suggère que la flamme du cas C2 est plus stable que celle du cas C1, comme attendu. Il est important de noter que le temps physique simulé est suffisant pour obtenir le calcul convergé mais la fréquence de sortie trop faible des résultats ne permet pas une étude statistique plus approfondie. Pour le cas C3, la surface de flamme est en moyenne inférieure aux deux autres cas. La vitesse de flamme laminaire du cas C3 peut expliquer ce phénomène. La flamme peut ainsi se localiser plus près des parois et du jet d'air. Cet effet peut aussi être lié à un domaine de flammabilité plus large, comme montré par la Fig. 5.28 qui présente la distribution de richesse des points situés dans la flamme. Les distributions de richesse sont environ 50 % et 250 % plus larges pour les cas C2 et C3 respectivement, comparé au cas C1. De plus, la distribution du cas C2 présente la même forme que le cas C1, avec un pic dans les richesses pauvres – 0.6 et 0.8 respectivement – puis une diminution progressive jusqu'à la richesse maximum. La PDF de la richesse du cas C2 est globalement différente avec une plus grande répartition sur l'étendue de richesse, avec des valeurs élevées autour de la stœchiométrie. Ce comportement peut impliquer que la flamme ne soit plus totalement en régime de prémélange dans le cas C3. La Fig. 5.29 montre la PDF de l'indice de flamme ξ pour chacun des cas étudiés. Même si le cas C3 montre une part plus importante de la flamme dans le régime de diffusion comparé aux cas C1 et C2, la flamme reste principalement dans le régime de combustion prémélangé. Les cas C1 et C2 montrent là encore des profils de distribution similaires.

Plus d'informations peuvent être obtenues grâce à la probabilité jointe de fraction de mélange Z , définie par Bilger [13], et de température T . La Fig. 5.30 représente cette probabilité jointe pour chaque cas avec des statistiques récoltées sur 18 solutions indépendantes. La température d'équilibre pour chaque valeur de fraction de mélange est ajoutée sur la Fig. 5.30 par la ligne rouge. La probabilité jointe montre un chemin principal pour tous les cas : une ligne verticale de forte probabilité montre que les réactifs

fonction de Gibbs [183, 185]. L'algorithme de résolution est donné par [186]. L'équilibre chimique est calculé soit à pression et température donnée, soit à pression et enthalpie fixée. Des contraintes supplémentaires peuvent être imposées sur des espèces individuelles, ou sur une combinaison linéaire arbitraire d'espèces.

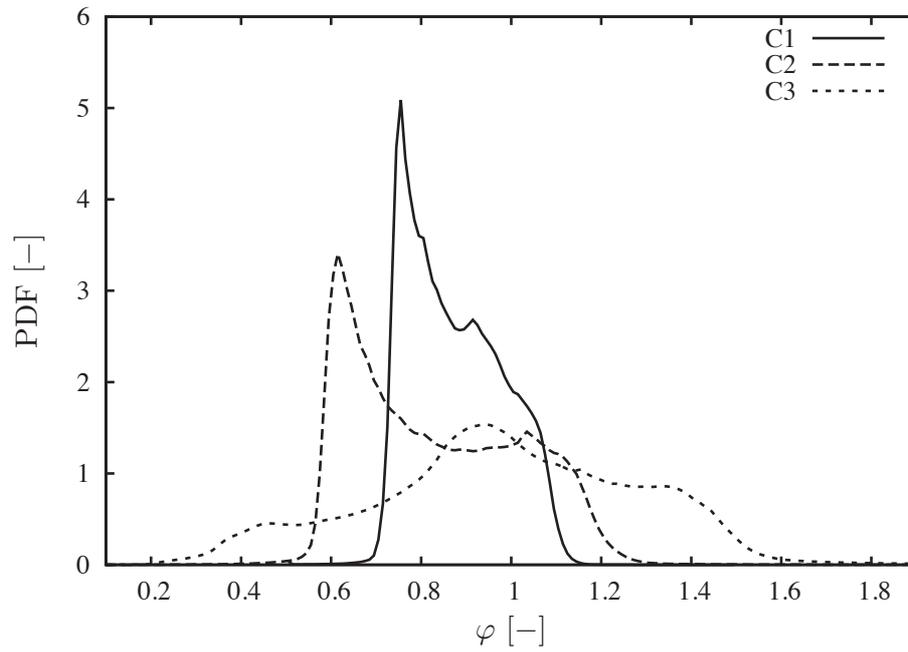


FIGURE 5.28: PDF de richesse sur la surface de flamme pour les trois cas.

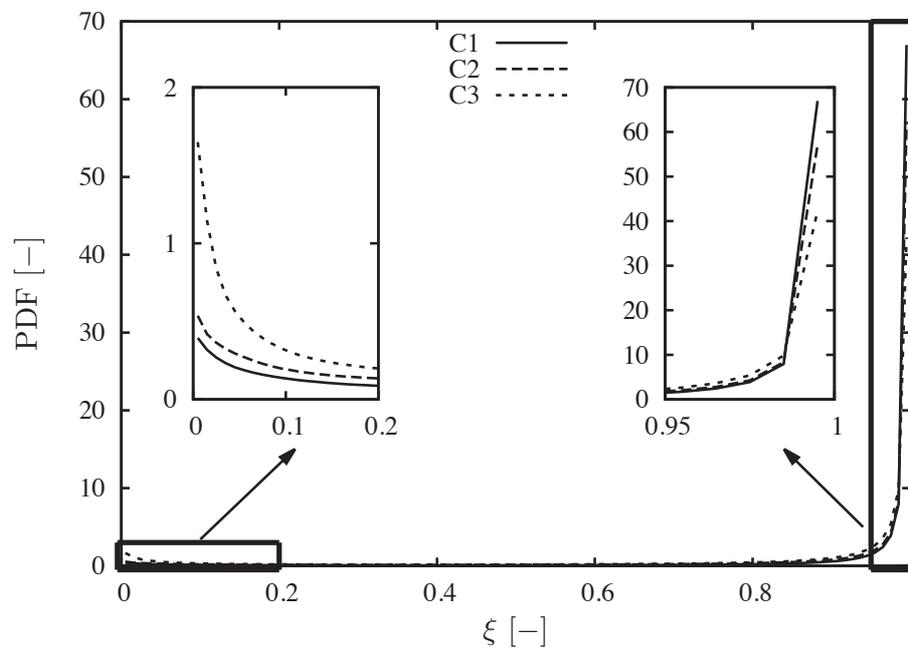


FIGURE 5.29: PDF de l'indice de flamme pour les trois cas.

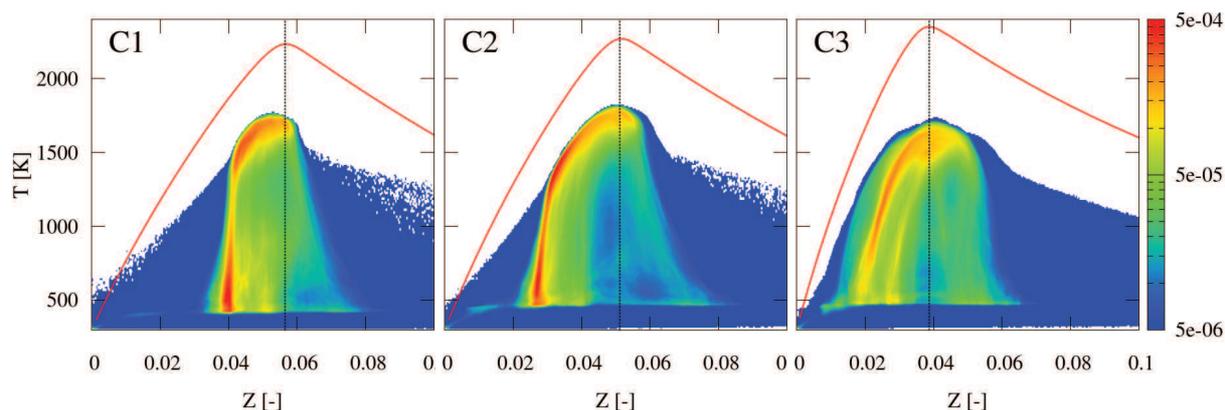


FIGURE 5.30: Probabilité jointe de fraction de mélange Z et de température T sur les trois cas. Ligne rouge : état d'équilibre. Ligne noire pointillée : ligne à iso- Z de maximum de température.

doivent être suffisamment mélangés avant de brûler. Ce comportement, représentatif du régime de combustion prémélangé, apparaît à des richesses inférieures aux richesses globales. Après avoir atteint des températures élevées, la probabilité jointe suit la même tendance que la ligne d'équilibre en direction de mélanges plus riche en carburant (vers des Z plus élevés). Ce phénomène démontre que des gaz brûlés pauvres sont enrichis en carburant puis brûlent de nouveau, augmentant la température du mélange. L'épaisseur de la zone de probabilité supérieure à 10^{-5} s'épaissit avec l'enrichissement en hydrogène. Cela confirme le domaine de flammabilité plus large des mélanges enrichis en hydrogène. La Fig. 5.30 montre également que le mélange local est toujours en dessous de la température d'équilibre. De l'énergie est perdue par le mélange à cause du refroidissement lié au flux thermique pariétal, ce qui mène à une diminution de la température. Le défaut d'enthalpie, calculé comme le rapport entre la température maximale dans le domaine et la température d'équilibre maximale, atteint 77.1 %, 78.9 % et 70.4 % pour respectivement les cas C1, C2 et C3. Ces valeurs révèlent que l'extinction de la flamme dans le cas C3 est plus forte que dans les autres cas.

L'ajout d'hydrogène est aussi connu pour avoir un impact sur la courbure de flamme [98, 96]. Ici, le calcul de la courbure de flamme $\nabla \cdot \mathbf{n}$ est obtenu à partir de la normale au front de flamme $\mathbf{n} = -\nabla c / |\nabla c|$, où c est la variable de progrès. La densité de probabilité de la courbure de flamme, normalisée par l'épaisseur de flamme laminaire, est montrée sur la Fig. 5.31 pour les trois différents cas. Les courbures moyennes sont -0.1275 , -0.0334 , 0.0281 pour les cas C1, C2 et C3 respectivement avec des variances de 0.6504, 0.5358, 0.5711. Les trois cas présentent une PDF similaire dans les courbures positives et une distribution plus large dans le cas C1 dans les courbures négatives. Comme la configuration n'est que faiblement turbulente, l'enrichissement en hydrogène ne favorise pas le plissement à petite échelle comme montré par Halter *et al.* [96].

5.3.5 Performances

Le taux de dégagement de chaleur intégré en temps et en espace, ainsi que les pertes thermiques et le bilan enthalpique des flux d'entrée et sortie sont résumés dans le Tab.5.8 pour les trois cas. Les rendements de conversion et thermique sont aussi donnés dans le Tab. 5.8. Comme attendu, la puissance émise par la flamme augmente avec l'ajout d'hydrogène, du fait de l'extension du domaine de flammabilité et de la plus grande réactivité. C'est un effet bien connu de l'enrichissement en hydrogène. Le taux de

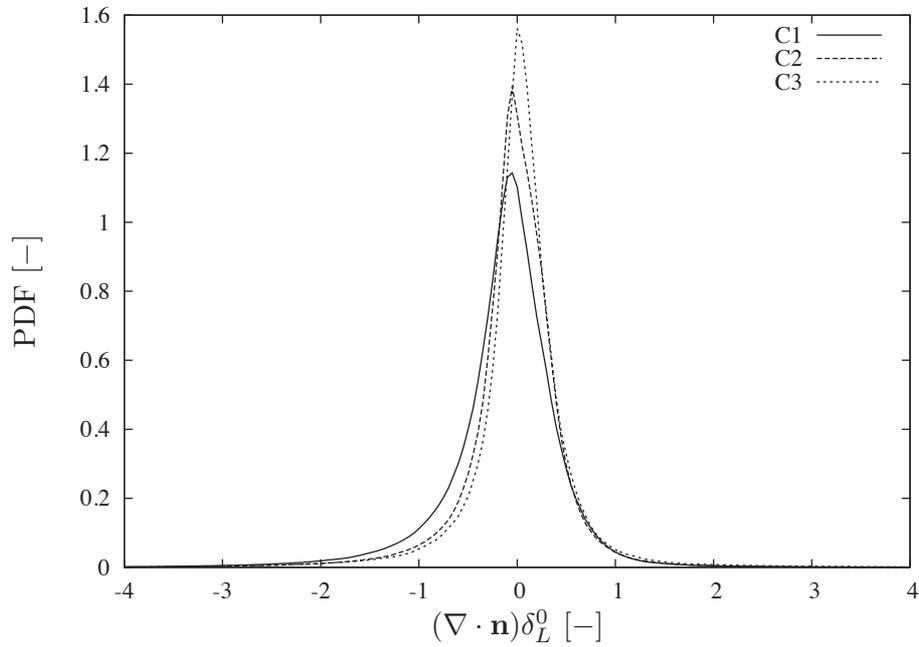


FIGURE 5.31: PDF de la courbure de flamme.

Cas	C1	C2	C3
Puissance chimique injectée P_{in} [W]	87.0	83.4	87.6
Taux de dégagement de chaleur moyen P_r [W]	53.0	61.2	61.6
Pertes thermiques moyennes P_{loss} [W]	30.1	35.5	42.0
Bilan entrée/sortie du flux de chaleur P_{out} [W]	22.9	25.7	19.2
Rendement de conversion $\eta_c = P_r/P_{in}$ [%]	60.9	73.3	70.3
Rendement thermique $\eta_t = P_{out}/P_r$ [%]	43.2	42.0	31.8
Rendement global $\eta_g = \eta_c \eta_t$ [%]	26.3	30.8	22.4

TABLE 5.8: Performances globales du brûleur pour les points de fonctionnement C1, C2 et C3.

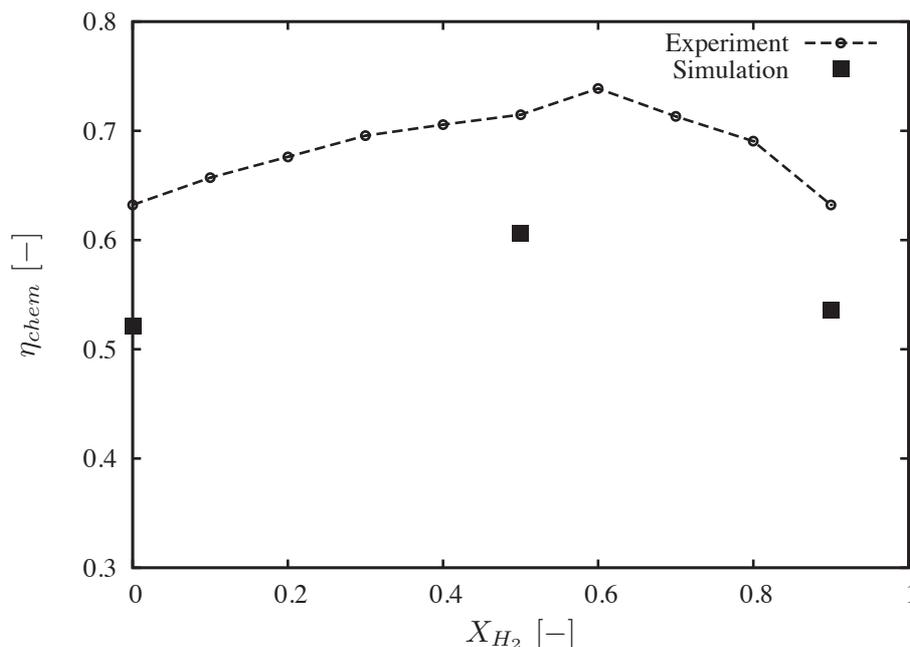


FIGURE 5.32: Rendement chimique pour chaque cas étudié en fonction de la fraction molaire d'hydrogène dans le mélange de carburant et comparé à l'expérience.

conversion commence à 61 % pour le cas sans hydrogène, et monte jusqu'à 73 % avec l'enrichissement.

Néanmoins, dans le même temps, les pertes thermiques augmentent aussi avec l'ajout d'hydrogène. Comme le but du brûleur est de fournir la plus grande puissance sous forme de chaleur en sortie du domaine, la plus grande efficacité thermique est désirée. Les rendements thermiques des cas C1 et C2 montrent une tendance similaire avec environ 40 % du dégagement de chaleur perdu sous forme de pertes thermiques. Le rendement du cas C3 tombe à 32 %, montrant une encore plus médiocre efficacité thermique. Le cas le plus enrichi montre une puissance plus importante émise par la flamme mais cette puissance additionnelle est perdue aux parois. La distance d'extinction plus courte du cas C3 et donc le gradient thermique pariétal plus fort peuvent expliquer cette amplification des pertes thermiques.

Le rendement global η_g du brûleur est obtenu en multipliant le rendement de conversion et le rendement thermique. Les valeurs obtenues pour les trois cas sont très faibles : en dessous de 31 % (cf. Tab. 5.8). Le meilleur cas demeure le cas C2, suivi de C1 puis de C3. Il est intéressant de noter que ces rendements globaux suivent la même tendance que le défaut d'enthalpie calculé à partir de la Fig. 5.30.

La Fig. 5.32 représente le rendement chimique mesuré expérimentalement en fonction de l'enrichissement en hydrogène pour une puissance donnée d'environ 90 W. L'enrichissement améliore le rendement jusqu'à un taux de 60 % en volume d'hydrogène dans le mélange méthane/hydrogène. Après cette valeur pic, le rendement chute rapidement. La Fig. 5.32 compare aussi le rendement chimique issu des trois cas simulés avec ceux obtenus lors de l'expérience. Les valeurs à comparer sont résumées dans le Tab. 5.9. Même si un écart d'environ dix points est observé entre les valeurs expérimentales et numériques, la tendance observée expérimentalement est retrouvée : le rendement chimique est plus grand pour le cas C2, avec 50 % molaire d'enrichissement en hydrogène, que pour les deux autres cas.

En résumé, comme il amplifie la réaction, l'ajout d'hydrogène favorise la combustion et le taux de dégagement de chaleur. Cependant, ajouter de plus en plus d'hydrogène dans le mélange de carburant n'améliore pas les performances du brûleur en conséquence, et peut mener à un changement radical de la

Cases	C1	C2	C3
Expérience [%]	63.2	71.5	63.2
Simulation [%]	52.0	60.6	53.5

TABLE 5.9: Comparaison du rendement chimique entre l'expérience et la simulation. Les valeurs expérimentales sont tirées de [137].

Cas	C1	C2	C3
Fraction massique de CO Y_{CO} [%]	1.8	1.18	0.72
Fraction massique d'imbrûlés Y_{UHC} [%]	1.7	1.02	0.59
$Y_{CO_{outlet}}/Y_{CH_4_{inlet}}$ [%]	31.8	26.7	37.7
$Y_{UHC_{outlet}}/Y_{CH_4_{inlet}}$ [%]	30.0	23.0	30.9

TABLE 5.10: Emissions polluantes en sortie pour les trois cas.

topologie de la flamme. Sur les points de fonctionnement étudiés, la plupart de cette énergie additionnelle dégagée est perdue aux parois. Le cas C2 apparait comme le meilleur compromis car il présente une plus grande puissance émise par la flamme tout en gardant un rendement thermique raisonnable.

5.3.6 Polluants

L'ajout d'hydrogène engendre une modification des émissions polluantes [98]. L'influence de l'enrichissement en hydrogène sur les émissions de monoxyde de carbone et d'espèces hydrocarbonées imbrûlées est investiguée sur les gaz brûlés sortant du domaine. Comme les cas C2 et C3 ont un meilleur rendement de conversion que le cas C1, de plus faibles émissions sont attendues. Le Tab. 5.10 rassemble les fractions massiques de CO et UHC (toujours composés des espèces hydrocarbonées du schéma cinétique Cofee : CH_4 , CH_3 , CH_2O et HCO) intégrés sur la sortie et moyennés en temps. Plus on ajoute de l'hydrogène dans le mélange de carburant, moins on trouve d'émissions polluantes. L'enrichissement en hydrogène semble une stratégie efficace pour réduire ces émissions.

Cependant, comme la composition du mélange de carburant est différente dans les trois cas étudiés, les émissions de CO et UHC sont divisées par la quantité de méthane injectée dans le brûleur. Les valeurs sont réunies dans le Tab. 5.10. Ces rapports révèlent que le cas C3 a le comportement le moins favorable en terme d'émissions polluantes, malgré son plus fort taux d'enrichissement. Le cas C1 montre des émissions polluantes plus faibles que le cas C3 mais le meilleur choix est ici encore le cas C2. Ce résultat peut être interprété en examinant la distance d'extinction, plus faible dans le cas C3, menant à plus d'extinction locale de flamme. La combustion devient alors incomplète, augmentant la formation de polluants.

5.4 Conclusions

L'étude de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion centimétrique MESO-CORIA a été traitée dans ce chapitre. Des calculs préliminaires ont été réalisés afin de déterminer la meilleure stratégie de calcul en terme de précision des résultats et coût de calcul. Le schéma cinétique Cofee, composé de 14 espèces et 38 réactions, et une résolution de $50 \mu m$ ont été retenus. L'étude d'interaction flamme-paroi a permis le développement des conditions de paroi isotherme et la détermination du flux de chaleur

pariétal induit. Ce cas test a aussi mis en évidence la faible influence des effets de Soret et Dufour sur l'évaluation du flux de chaleur et la distance d'extinction de la flamme sur notre point de fonctionnement particulier. Enfin, la configuration 2D bec bunsen a mis en évidence la problématique du coût de calcul des termes sources de la chimie. Une stratégie de répartition de charge de calcul de ces termes sources entre processeurs a été mise en place et optimisée pour les calculs 3D sur plusieurs milliers de processeurs.

Les simulations LES, avec utilisation d'un modèle de sous-maille uniquement pour la turbulence, ont mené à de nombreuses analyses. Le point de fonctionnement avec méthane pur a montré que la topologie de l'écoulement réactif et de la flamme ainsi que le régime de combustion sont en accord avec les résultats expérimentaux et des simulations moins détaillées. La présence de la zone de recirculation centrale permet de stabiliser la flamme entre les gaz brûlés au centre et les gaz frais en proche paroi. Le mélange entre l'air et le méthane est suffisant pour que la combustion ait lieu en régime de combustion prémélangé presque partout dans la chambre. La combustion a lieu majoritairement à une richesse pauvre, inférieure à la richesse globale, faisant apparaître qu'une partie du carburant injecté sort du domaine sans avoir rencontré la flamme. Le rendement de conversion approche dans ce cas 61 %. Le rendement thermique de 43 % fait tomber le rendement global de la chambre de combustion à 26 %.

Afin d'améliorer la faible efficacité de ce brûleur, l'enrichissement en hydrogène de l'injection de méthane a été étudiée. Deux taux d'enrichissement du mélange de méthane ont été testés, pour une puissance chimique injectée similaire : 50 % et 90 % en volume. La vitesse de flamme plus importante et le taux de dégagement supérieur de l'hydrogène par rapport au méthane permet a priori de favoriser la combustion. Dans la configuration MESO-CORIA, le taux de dégagement de chaleur est supérieur au cas méthane pur et le domaine de flammabilité est agrandi, permettant à la flamme de brûler à des richesses plus pauvres. Cependant, un comportement différent a été observé entre les deux taux d'enrichissement. Ajouter une faible quantité d'hydrogène a permis d'améliorer les performances du brûleur et réduire les émissions polluantes. Après une certaine limite, l'enrichissement en hydrogène peut radicalement changer la topologie de la flamme et amplifier les pertes thermiques pariétales. L'extinction locale de la flamme est plus importante, menant à une combustion plus incomplète que dans le cas méthane pur et à la formation de polluants.

Chapitre 6

Amélioration de la forme du brûleur centimétrique

L'amélioration des performances du brûleur centimétrique est étudiée grâce à la modification de sa forme. Des géométries basées sur une forme cylindrique, plutôt que cubique, sont testées. Pour réduire le coût de calcul et augmenter le nombre de configurations étudiées, une stratégie de calcul utilisant des maillages avec une résolution plus grossière que dans le chapitre précédent et le modèle d'épaissement de flamme est proposée.

Sommaire

6.1	Stratégie de réduction du coût de calcul	165
6.1.1	Introduction	165
6.1.2	Implantation du modèle TFLES	166
6.1.3	Validation sur flammes laminaires 1D	170
6.1.4	Interaction flamme-turbulence : cas test flamme-tourbillons 2D	172
6.2	Validation de la stratégie sur la configuration MESO-CORIA	179
6.2.1	Présentation des calculs	179
6.2.2	Topologie de l'écoulement	180
6.2.3	Performances globales et polluants	186
6.2.4	Performances de calcul	187
6.3	Amélioration de la forme du brûleur	188
6.3.1	Méthodologie	188
6.3.2	Configurations étudiées	189
6.3.3	Paramètres physiques et numériques	191
6.3.4	Etude de l'écoulement réactif	191
6.3.5	Performances	193
6.4	Conclusion	197

6.1 Stratégie de réduction du coût de calcul

6.1.1 Introduction

Le chapitre précédent a montré le faible rendement obtenu avec le brûleur cubique MESO-CORIA. Il convient dès lors de proposer des pistes d'amélioration du brûleur, comme la modification de sa forme,

afin d'en améliorer ses performances. Cette étude mène au calcul de plusieurs points de fonctionnement ou à tester différentes géométries. En raison du nombre important de calculs à réaliser et du temps de retour élevé, l'utilisation de la procédure de calcul du chapitre précédent n'est pas possible. Une stratégie de réduction du coût de calcul doit être développée pour mener à bien cet objectif.

Comme on l'a vu, l'utilisation d'une approche de chimie multi-espèces est indispensable pour correctement décrire la structure de flamme dans le cas d'inhomogénéités de richesse et température. Malgré les outils numériques tels que l'intégration raide des termes sources et la répartition de charge de cette intégration, cette approche reste chère en ressources de calcul.

L'utilisation de maillages à la résolution plus grossière que dans le chapitre 5 peut apporter une réponse. Avec un facteur 2 sur la résolution, le temps de retour d'un calcul 3D est diminué d'un facteur environ 16 : facteur 2 dans chaque direction spatiale et facteur 2 en temps.

Appliquée sur notre configuration de brûleur centimétrique, on passerait d'un maillage de 34 millions d'éléments avec une résolution de $50 \mu\text{m}$ à un maillage d'environ 4 millions de cellules avec une résolution de $100 \mu\text{m}$. Avec un tel maillage, le temps de retour devient acceptable pour tester plusieurs configurations.

Néanmoins, à cette résolution, la description de la flamme n'est plus suffisante pour obtenir les caractéristiques correctes pour la flamme (voir section 5.1.2). De plus, l'étude menée dans le chapitre 4 a montré qu'une résolution de $100 \mu\text{m}$ implique une modélisation de sous-maille pour la turbulence non négligeable dans la totalité du domaine, c'est-à-dire même en dehors de la zone de jet et d'impact. La description de l'interaction flamme-turbulence s'en trouve d'autant plus affectée. Il devient nécessaire d'utiliser un modèle de sous-maille pour la combustion.

Pour ces travaux, il a été choisi d'utiliser le modèle d'épaississement de flamme, ou *Thickened Flame for Large-Eddy Simulation* (TFLES), couplé avec une approche de chimie multi-espèces et schéma cinétique squelettique. Le modèle TFLES est décrit dans la section 6.1. Cette stratégie permet d'élargir le front de flamme afin de le décrire sur plus de points du maillage. De plus, l'interaction flamme-turbulence non captée du fait de la résolution plus grossière peut se voir restituée via l'utilisation d'une fonction d'efficacité. Cette dernière doit permettre de modéliser l'effet du plissement de sous-maille sur le dégagement de chaleur.

6.1.2 Implantation du modèle TFLES

Pour les besoins de ces calculs, le développement du modèle de combustion TFLES dans le code YALES2 a été nécessaire. Son implantation a soulevé deux questions propres au couplage avec YALES2 et au couplage avec une cinétique complexe.

6.1.2.1 Couplage du modèle TFLES avec l'intégration raide des termes sources

Dans YALES2, le calcul du terme source de l'équation de transport des espèces 3.155 est intégré sur le pas de temps de l'itération via la librairie d'intégration raide CVODE (voir section 3.6.2). Afin d'écrire correctement cette équation dans la situation où elle est couplée au modèle TFLES, on repart de l'Eq. 3.155 en faisant le changement de variable suivant [198] :

$$t \rightarrow \mathcal{F} t, \quad (6.1)$$

$$x \rightarrow \mathcal{F} x. \quad (6.2)$$

En supposant le facteur d'épaissement \mathcal{F} constant en temps et en espace, l'équation devient alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{F} \rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k) + \frac{1}{\mathcal{F}} \dot{\Omega}_k. \quad (6.3)$$

Afin de connaître l'expression du terme source $\dot{\Omega}_k$, on effectue le même changement de variable sur l'Eq. 3.136 :

$$\dot{\Omega}_k = \frac{\mathcal{F}}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t/\mathcal{F}} \dot{\omega}_k \left(\frac{t}{\mathcal{F}} \right) \frac{dt}{\mathcal{F}} = \frac{\mathcal{F}}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t/\mathcal{F}} \mathcal{F} \dot{\omega}_k \frac{dt}{\mathcal{F}} = \frac{\mathcal{F}}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t/\mathcal{F}} \dot{\omega}_k dt. \quad (6.4)$$

En rassemblant les deux dernières expressions, on obtient :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{F} \rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k) + \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t/\mathcal{F}} \dot{\omega}_k dt. \quad (6.5)$$

Une approche similaire peut être réalisée pour la fonction d'efficacité \mathcal{E} . On obtient finalement l'équation de transport des espèces dans un contexte TFLES :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{E} \mathcal{F} \rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k) + \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\mathcal{E}\Delta t/\mathcal{F}} \dot{\omega}_k dt. \quad (6.6)$$

On peut identifier certaines différences entre l'Eq. 3.138 et l'Eq. 6.6 :

- le terme diffusif est multiplié par \mathcal{E} et \mathcal{F} , comme dans l'Eq. 3.124,
- le temps d'intégration du terme source est multiplié par \mathcal{E} et divisé par \mathcal{F} .

Ces aspects ont été implantés dans YALES2. Les coefficients de diffusion sont multipliés par la valeur locale de l'épaissement et de la fonction d'efficacité. L'intégrateur raide est appelé avec en donnée d'entrée le temps d'intégration modifié. La valeur intégrée est ensuite divisée par le pas de temps de l'itération fluide.

6.1.2.2 Définition d'un capteur de flamme pour la chimie complexe

Dans la section 3.5.4 sont présentés les capteurs de flammes utilisés avec le modèle TFLES dynamique : la formulation Arrhenius et celle basé sur la variable de progrès. Ces formulations sont parfaitement adaptées respectivement pour une approche de chimie multi-espèces simple et pour la chimie tabulée mais aucune ne convient pour une approche de chimie complexe. Le capteur basé sur une Arrhenius utilise la fraction massique de carburant. Lorsque celui-ci est entièrement consommé, le capteur indique l'absence de flamme alors que des réactions raides sont toujours en cours. La définition d'une variable de progrès dans une approche chimie complexe s'avère difficile et baser un capteur sur celle-ci est risqué d'erreur.

Dans une approche de chimie complexe, définir un capteur de flamme ne constitue pas une tâche simple. Chaque espèce réagit différemment et à différents instants dans la flamme. Par exemple, le méthane est consommé en début de flamme alors que la recombinaison CO_2/CO a lieu en fin de flamme. Il devient délicat de définir un capteur recouvrant toute la zone de réaction raide. De plus, le capteur de flamme doit se limiter au front de flamme afin de ne pas modifier la dynamique de mélange dans les zones non-réactives.

Pour résumer, le capteur de flamme doit répondre aux contraintes suivantes :

- $\mathcal{S} = 1$ dans la zone de réaction raide,
- $\mathcal{S} = 0$ en aval de la flamme où l'épaissement n'est pas nécessaire (réactions lentes),

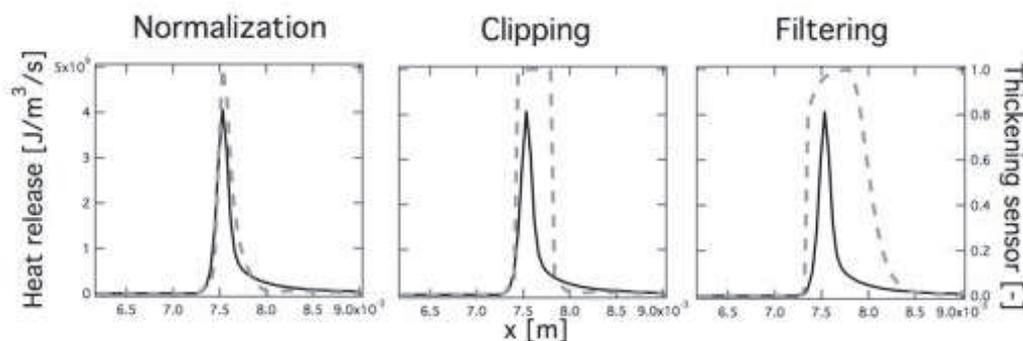


FIGURE 6.1: Procédure de construction du capteur de flamme proposé par Franzelli. Image tirée de [72].

- $S = 0$ en amont de la flamme (zone de diffusion thermique) pour ne pas modifier le mélange et l'interaction flamme-tourbillon.

Cette problématique a déjà été rencontrée par Franzelli [72] et Boucher [19], qui ont apporté des solutions différentes.

Franzelli [72] propose de définir le capteur de flamme à partir du taux de réaction $\dot{\omega}_C = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$. Ce dernier est comparé à la valeur maximum de $\dot{\omega}_C$ obtenue dans une flamme 1D dans les conditions opératoires équivalentes, tel que :

$$S = \min \left(\frac{|\dot{\omega}_C|}{|\dot{\omega}_C^0|}, 1 \right) \quad (6.7)$$

Ensuite la procédure suivante, illustrée par la Fig. 6.1 est répétée deux fois :

1. l'opération de seuillage *si* $S > 0.1$: $S = 1$ est menée, afin d'épaissir le capteur et capturer la zone de préchauffage,
2. le champs de S est ensuite filtré cinq fois.

Le champ de capteur de flamme obtenu est régularisé et correctement situé dans les zones de forts gradients générés par les réactions chimiques.

Boucher [19] a défini un capteur de flamme faisant l'hypothèse de flammelette et basé sur une variable d'avancement \hat{c} , différente de la formulation classique, afin de prendre en compte la chimie des NO_x . Le capteur de flamme S vaut ici :

$$S = \tanh \left\{ \beta \times 46.56 \left[c_{sat}^2 (1 - c_{sat}) \right]^2 \right\} . \quad (6.8)$$

avec le paramètre β égal à 10 et la variable d'avancement \hat{c} ainsi que sa version saturée sont définies comme :

$$\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{W_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{W_{CO}} + 10 \frac{Y_{NO}}{W_{NO}} , \quad (6.9)$$

$$c_{sat} = \min \left(1, \frac{\hat{c}}{\hat{c}|_{x=x_{sat}}} \right) . \quad (6.10)$$

où x_{sat} est l'abscisse de saturation définie comme $x_{sat} = x_{fl} + L_{fl}/2$ avec x_{fl} l'abscisse à laquelle la température atteint la moitié de sa valeur maximale et L_{fl} une zone égale à dix fois l'épaisseur de flamme thermique. Cette version saturée de la variable d'avancement atteint son maximum $c_{sat} = 1$ en $x = x_{sat}$ considérée comme la fin de la zone réactive raide. Comme montré par la Fig. 6.2, cette définition permet

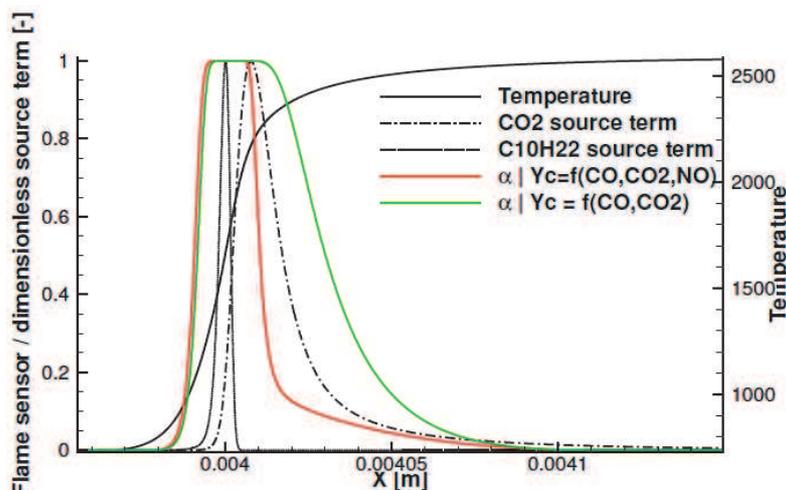


FIGURE 6.2: Comparaison du capteur de flamme, ici appelé α , avec le profil de température et de termes sources d'espèces. Image tirée de [19].

au capteur de flamme de ne pas déclarer une zone de flamme raide là où des zones de faibles réactions ont lieu.

La définition de Boucher [19] ne peut être utilisée dans les simulations 3D du brûleur centimétrique du fait de l'hypothèse de flammelette effectuée. Il a été observé au chapitre précédent que cette hypothèse n'est pas valide dans notre cas. La formulation de Franzelli [72] semble la plus appropriée. Néanmoins, cette définition n'assure pas que le capteur de flamme soit égal à l'unité dans toute la zone de réaction raide comme le montre la Fig. 6.1. Un capteur de flamme légèrement différent est proposé ici.

Le choix s'est porté sur la définition d'un capteur basé sur le terme source d'espèces. La combinaison d'espèces peut être définie par l'utilisateur. Par défaut dans ces travaux, on prendra $\dot{\omega}_C = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO} + \dot{\omega}_{H_2O}$. On utilise une valeur seuil paramétrable $\dot{\omega}_C^0$ sur cette variable de progrès pour définir le capteur de flamme tel que :

$$\begin{cases} \mathcal{S} = 1, & \text{si } \dot{\omega}_C > \dot{\omega}_C^0 \\ \mathcal{S} = 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.11)$$

La zone du capteur $\mathcal{S} = 1$ est ensuite propagée aux nœuds voisins : sur une paire de nœuds, si un nœud a la valeur $\mathcal{S} = 1$ et l'autre $\mathcal{S} = 0$ alors $\mathcal{S} = 1$ est imposé sur les deux nœuds. Cette opération est effectuée deux fois. La propagation peut être conditionnée à la composition locale du mélange afin de ne propager que dans les gaz brûlés. Enfin le capteur est filtré une première fois puis on répète cinq fois la procédure suivante, illustrée par la Fig. 6.3 :

1. Prise du maximum local entre la valeur initiale et la valeur filtrée,
2. Filtrage du champ de capteur de flamme \mathcal{S} .

En pratique, la valeur seuil $\dot{\omega}_C^0$ est prise comme égale à 10% de la valeur maximale de $\dot{\omega}_C$ dans une flamme laminaire 1D dans les mêmes conditions opératoires. De plus, il faut préciser que $\dot{\omega}_C^0$ doit être comparée à la valeur non épaissie de $\dot{\omega}_C$, ce qui revient à comparer $\dot{\omega}_C^0$ à $\mathcal{F}\dot{\omega}_C$.

D'autre part, une évolution temporelle du capteur peut modifier fortement le taux de dégagement de chaleur dans l'approche à faible nombre de Mach : le pas de temps est plus élevé que dans une approche compressible. Des fluctuations importantes peuvent avoir lieu dans les gaz brûlés, ce qui engendre des problèmes de robustesse pour le calcul. Pour palier à cette difficulté, un filtrage temporel est appliqué via

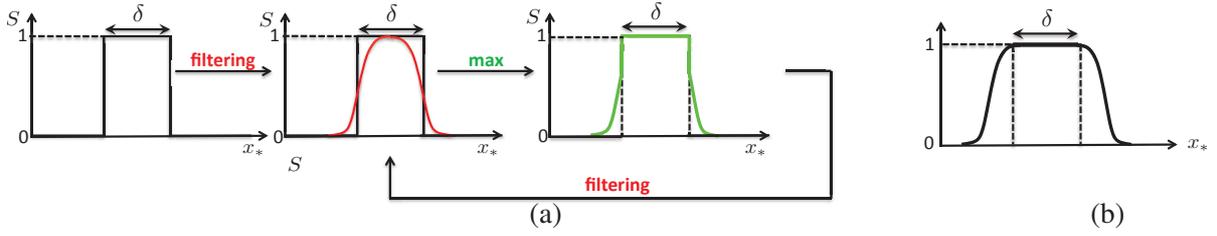


FIGURE 6.3: (a) : Procédure de filtrage du capteur de flamme : filtrage puis prise du maximum entre profil initial et profil filtré. (b) : Capteur de flamme final obtenu.

Résolution [μm]	Épaississement \mathcal{F} [-]	s_L [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]	δ_L [μm]
50	–	0.418	426.2
100	2	0.419	836.7
200	4	0.417	1675
400	8	0.418	3328

TABLE 6.1: Caractéristiques de flamme avec épaississement constant.

un coefficient de relaxation α entre la valeur de \mathcal{S}^n calculée et la valeur utilisée à l'itération précédente \mathcal{S}^{n-1} :

$$\mathcal{S}^n = \alpha \mathcal{S}^n + (1 - \alpha) \mathcal{S}^{n-1}. \quad (6.12)$$

Cela permet de limiter les forts gradients en temps du capteur de flamme, qui peuvent mener à des difficultés numériques. Dans ces travaux, la valeur $\alpha = 0.7$ est choisie.

6.1.3 Validation sur flammes laminaires 1D

L'implantation du modèle TFLES dans le code YALES2 a été validé dans un premier temps sur des flammes laminaires 1D. Un épaississement constant en espace et en temps a d'abord été choisi. Ainsi, l'épaississement constitue une dilatation en temps et en espace d'un facteur égal à l'épaississement \mathcal{F} . La vitesse laminaire et la structure de flamme doivent être identiques à celles de la flamme non-épaissie.

La flamme de référence est la flamme étudiée dans la section 5.1.2 : flamme méthane/air stœchiométrique avec température des gaz frais à 300 K avec une résolution homogène de 50 μm . Des facteurs d'épaississement de 2 et 4 ont été testés, sur des résolutions 2 et 4 fois plus grossières. Les résultats sont rassemblés dans le Tab. 6.1. On constate que la vitesse de flamme est parfaitement constante quelque soit l'épaississement. L'épaississement correspond bien à une dilatation homogène de l'espace : la résolution de la flamme reste identique. L'épaisseur thermique de flamme est bien multipliée d'un facteur \mathcal{F} comme attendu. Les profils de température et d'espèces majoritaires sont montrés dans l'espace physique dilaté et dans l'espace des phases $c = Y_c/Y_{c,eq}$ sur la Fig. 6.4. Tous les profils sont parfaitement superposés, quelque soit l'épaississement choisi. Cela valide l'implémentation du modèle TFLES pour des épaississements constants.

Des épaississements variables sont ensuite testés sur ces flammes 1D afin de valider le capteur de flamme défini dans la section 6.1.2.2. Les résultats sur les caractéristiques de flamme sont rassemblés dans le Tab. 6.2. La vitesse de flamme reste quasiment constante avec moins de 1 % d'écart. L'épaisseur de flamme est bien augmentée du facteur \mathcal{F} , montrant que le capteur de flamme couvre correctement l'ensemble de la zone réactive. Cette observation est démontrée sur les profils de température et d'espèce

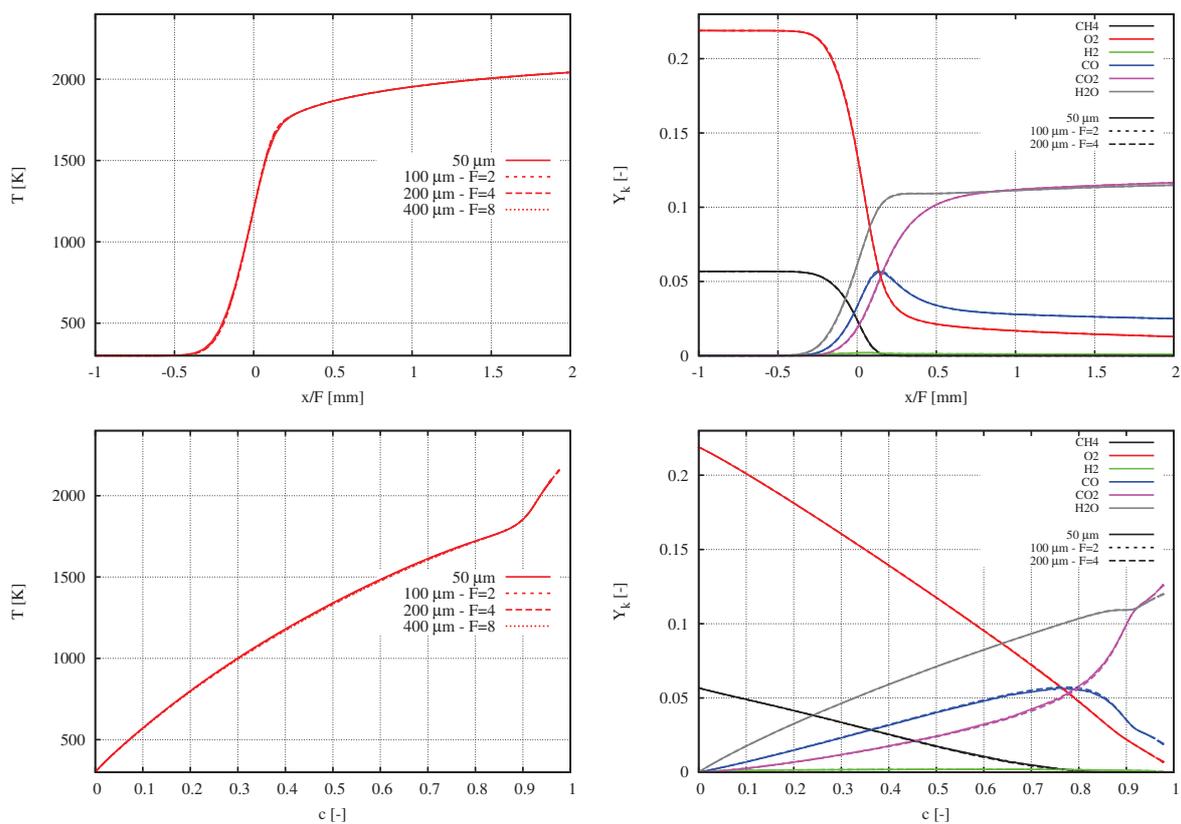


FIGURE 6.4: Comparaison de profils de température (gauche) et d'espèces majoritaires (droite) dans l'espace physique dilaté (haut) et dans l'espace des phases (bas) pour différents épaisseurs constants.

Résolution [μm]	Épaisseur \mathcal{F} [-]	s_L [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]	δ_L [μm]
50	—	0.418	426.2
100	2	0.420	859.0
200	4	0.421	1707
400	8	0.421	3381

TABLE 6.2: Caractéristiques de flamme avec épaisseur locale.

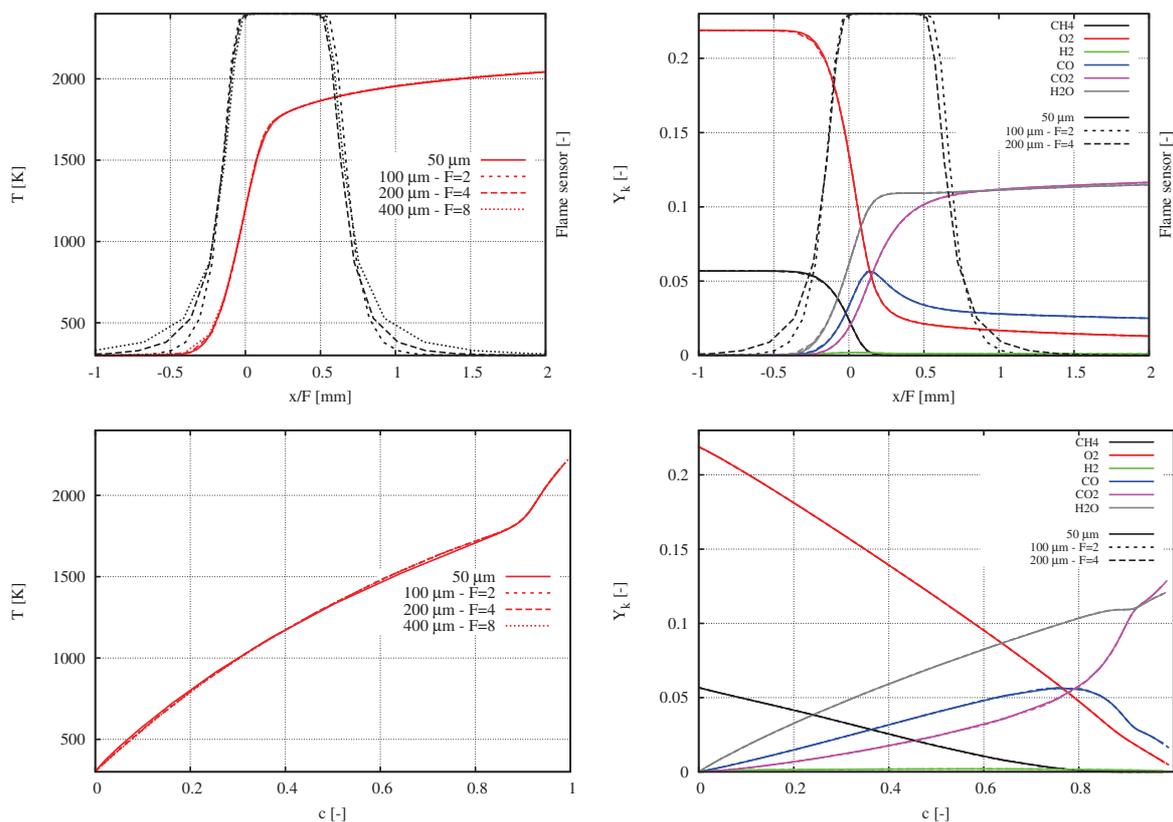


FIGURE 6.5: Comparaison de profils de température (gauche) et d'espèces majoritaires (droite) dans l'espace physique dilaté (haut) et dans l'espace des phases (bas) pour différents épaisseurs locaux.

dans l'espace physique (Fig. 6.5 (haut)) sur lesquels le capteur de flamme a été ajouté (en noir). Pour les épaisseurs de 2, 4 et 8, le capteur indique la même zone à épaisir : la zone où les gradients sont les plus forts, correspondant à la zone de réaction rapide. Les profils dans l'espace physique se superposent parfaitement dans la zone couverte par le capteur. En dehors de cette zone, l'épaisseur est absent donc $\mathcal{F} = 1$ et les profils correspondent toujours à la référence. Les profils dans l'espace des phases sont presque identiques, indiquant que la dynamique de flamme est conservée.

6.1.4 Interaction flamme-turbulence : cas test flamme-tourbillons 2D

La méthode proposée, basée sur un couplage du modèle TFLES dynamique avec l'approche de chimie complexe, est maintenant testée sur un cas test d'étude d'interaction flamme-turbulence : la configuration *flame-vortex* 2D. Il permet de comprendre l'interaction entre la turbulence, ici constituée de deux

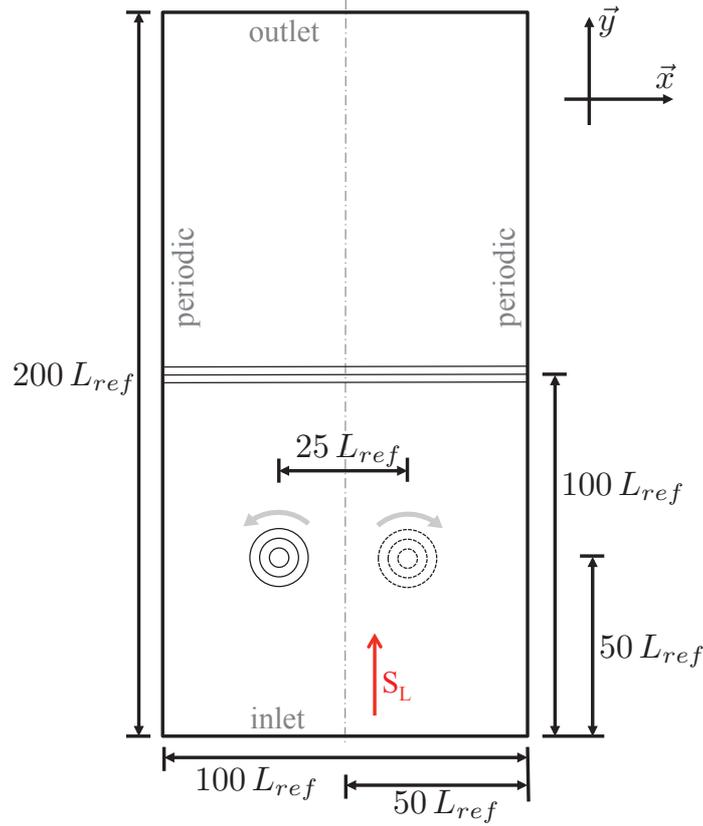


FIGURE 6.6: Schéma du cas test d'interaction flamme-tourbillons.

tourbillons contra-rotatifs, et un front de flamme. L'objectif est d'analyser la réponse du front de flamme à une perturbation aérodynamique et aussi de vérifier l'impact sur le capteur de flamme. Ce cas test a été utilisé pour construire des bases de données DNS et des régimes de combustion [180], valider des méthodes numériques [161, 134, 238, 163] ou des modèles de combustion [42, 154], mais aussi étudié expérimentalement [162, 195, 150].

Ce cas test consiste en une flamme laminaire plane prémélangée avec une vitesse de flamme S_L et épaisseur L_{ref} . Le domaine est rectangulaire de dimension $100 L_{ref} \times 200 L_{ref}$, comme indiqué par le schéma Fig. 6.6. Les gaz frais sont injectés depuis le bas du domaine $y = 0$, une vitesse $u_y = S_L$ afin que la position de la flamme soit constante en temps.

Les profils de vitesse des tourbillons sont imposés grâce aux formules suivantes :

$$\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_L \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ -\frac{\partial \psi}{\partial x} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \psi = C \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2R_C^2}\right), \quad (6.13)$$

où C et R_C représentent respectivement l'amplitude et le rayon des tourbillons. L'ensemble des paramètres utilisés dans cette étude sont les mêmes que dans [161, 134] et sont rassemblés dans le Tab. 6.3.

Un premier calcul DNS a été réalisé pour établir une référence avec un maillage composé de 2048×4096 rectangles, pour une taille de maille moyenne de $23 \mu\text{m}$. La Fig. 6.7 présente les champs de température, taux de dégagement de chaleur et vorticité à différents instants. L'évolution temporelle du taux

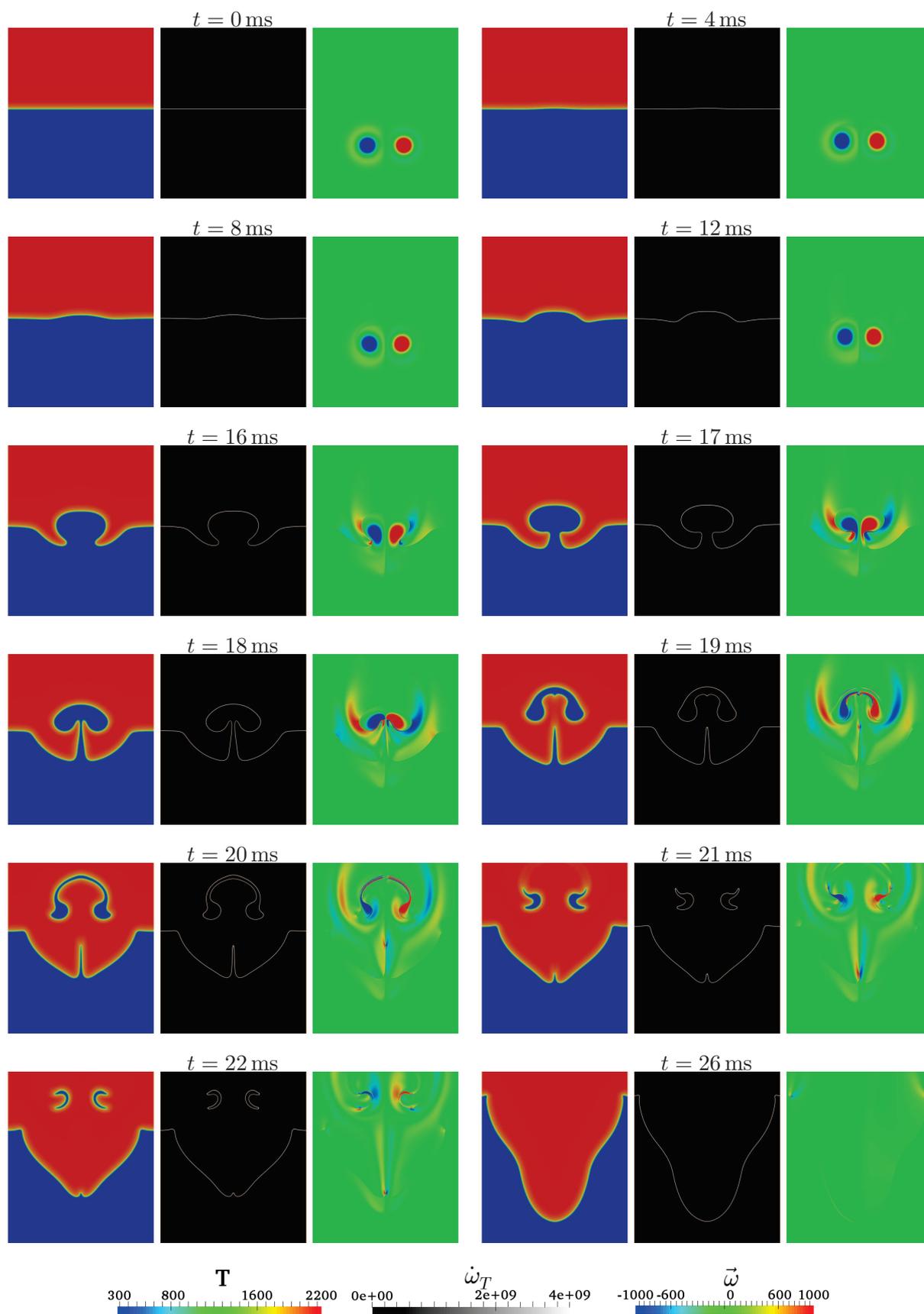


FIGURE 6.7: Champs de température, taux de dégagement de chaleur et vorticit  en fonction du temps, obtenus avec le maillage A1.

L_{ref} [m]	S_L [m.s ⁻¹]	t_{ref} [s]	C [m]	R_C [m]
5.45×10^{-5}	0.416	1.31×10^{-4}	$70 \times L_{ref}$	$5.5 \times L_{ref}$

TABLE 6.3: Paramètres du cas test flamme-tourbillons 2D.

de dégagement de chaleur global et de la surface du front de flamme (construit à partir de l'iso-surface $T = 1200$ K) est présentée sur la Fig. 6.8. L'interaction flamme-tourbillon suit le processus suivant :

1. Le front de flamme reste parfaitement plat jusqu'à environ $t = 5$ ms. Les tourbillons contra-rotatifs progressent en direction du front de flamme, portés par l'écoulement à la vitesse $u_y = S_L$. Le taux de dégagement de chaleur et la surface de flamme restent constants.
2. Entre 5 et 10 ms, la partie centrale du front de flamme commence à se soulever à cause des tourbillons. Le taux de dégagement de chaleur augmente légèrement.
3. A partir de 10 ms, en plus de se soulever vers le haut, au centre du domaine, la front est entraîné vers le bas par les extrémités extérieures des tourbillons. Ce phénomène s'amplifie vers $t = 16 - 17$ ms formant une sorte de "champignon". L'augmentation du dégagement de chaleur s'accélère. Le champs de vorticité indique que chaque tourbillon engendre deux tourbillons de plus faible intensité : un tourbillon proche avec un sens de rotation inverse et un autre plus éloigné mais avec le même sens de rotation que le tourbillon initial.
4. Le pied du champignon, constitué de gaz frais, devient de plus en plus fin jusqu'à se détacher de la partie haute. Cette poche de gaz frais comporte les deux tourbillons, et les gaz brûlés viennent s'enrouler autour de chaque tourbillon.
5. La couronne de gaz frais reliant les deux poches centrées sur les tourbillons s'amincit jusqu'à disparaître juste avant $t = 21$ ms. Ce phénomène provoque une chute brusque du taux de dégagement de chaleur.
6. La surface de flamme se stabilise jusqu'à consommation complète des deux poches de gaz frais à $t = 23$ ms, diminuant d'autant le dégagement de chaleur. Les tourbillons disparaissent suite à l'augmentation de la viscosité au travers du front de flamme.
7. Après $t = 23$ ms, la zone centrale du front de flamme continue de descendre dans le domaine tandis que les extrémités remontent. Cela est dû à la dynamique de l'écoulement apportée par les tourbillons. La surface de flamme augmente linéairement avec le temps.

Ces résultats sont cohérents avec ceux trouvés dans la littérature. Poinot *et al.* [180] et Moureau *et al.* [161] ont observé le phénomène de poche de gaz frais qui s'extrait du front de flamme puis est consommée. L'apparition de tourbillons annexes aux tourbillons initiaux a déjà été analysée dans [238, 163] : on appelle ce phénomène la création de vorticité induite. La Fig. 6.8 montre que la surface de flamme et le taux de dégagement de chaleur sont parfaitement corrélés. En effet, ce calcul DNS se déroule à richesse fixée, température des gaz frais imposée et pression données.

Une étude en raffinement de maillage a d'abord été réalisée, sans modèle TFLES. Les grilles sont composées de 1024×2048 , 512×1024 et 256×512 éléments pour des tailles de maille de 53, 106 et $213 \mu\text{m}$ respectivement. Ces cas sont nommés A1 à A3 et sont comparés au cas de référence A0 (voir Tab. 6.4). Le cas A3, celui avec la plus faible résolution, a une taille de maille trop importante pour la résolution de ce problème. Comme dans le cas 1D, les profils d'espèces et de température sont trop raides. Le calcul du cas A2, avec une résolution de $106 \mu\text{m}$, entraîne de très grandes variations temporelles non

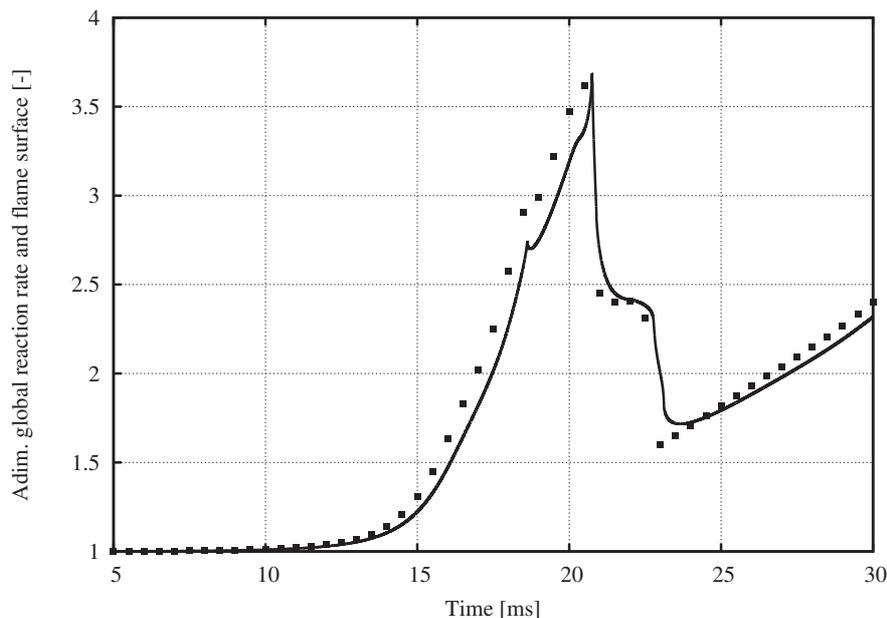


FIGURE 6.8: Taux de dégagement de chaleur (ligne) et surface de flamme (points) en fonction du temps, normalisés par leur valeur à $t = 0$ ms.

Cas	Maillage	Δ_x [μm]	Épaississement [-]	Fonction d'efficacité
A0	2048×4096	26	—	—
A1	1024×2048	53	—	—
A2	512×1024	106	—	—
A3	256×512	213	—	—
B2	512×1024	106	Dynamique $\mathcal{F}_{max} = 2$	—
B3	256×512	213	Dynamique $\mathcal{F}_{max} = 4$	—
B4	128×256	426	Dynamique $\mathcal{F}_{max} = 8$	—
C2	512×1024	106	Dynamique $\mathcal{F}_{max} = 2$	Charlette
C3	256×512	213	Dynamique $\mathcal{F}_{max} = 4$	Charlette
C4	128×256	426	Dynamique $\mathcal{F}_{max} = 8$	Charlette

TABLE 6.4: Cas de calcul de l'interaction flamme-toubillons.

physiques, ce qui démontre une résolution encore insuffisante. Ces résultats ne sont pas montrés ici. Finalement, seul le cas A1 est comparé au cas de référence.

L'évolution du taux de dégagement de chaleur global en fonction du temps est comparée entre A0 et A1 sur la Fig. 6.11. On remarque que la dynamique d'interaction décrite précédemment est parfaitement conservée. De très légères variations existent aux moments de la chute brusque du taux de dégagement de chaleur, liée à la plus faible description du front de flamme.

Ce cas test est reproduit maintenant en utilisant le modèle TFLES, avec seulement l'épaississement activé dans un premier temps. Des maillages plus grossiers sont utilisés, de 512×1024 à 128×256 , couplés à des épaissements variant de 2 à 8 (voir Tab. 6.4). La Fig. 6.10 montre le champ de température et de terme source d'enthalpie sensible pour les différents cas étudiés à l'instant $t = 20$ ms. Comme attendu, plus l'épaississement augmente plus l'épaisseur de flamme obtenue est importante :

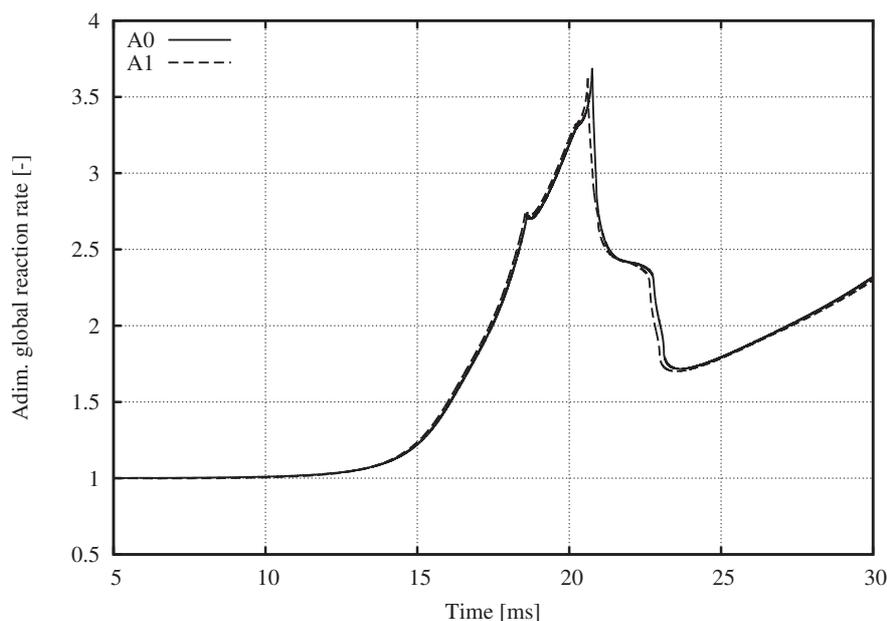


FIGURE 6.9: Taux de dégagement de chaleur en fonction du temps pour les cas A0 et A1.

la description de la structure de flamme reste satisfaisante même avec des maillages grossiers. Néanmoins, les tourbillons ont plus de difficulté à déformer le front de flamme plus épais. Cela engendre une dynamique modifiée de l'interaction flamme-tourbillon, comme décrit dans la section 3.5.3. Cette dynamique est aussi observable sur la Fig. 6.11 présentant le taux de dégagement de chaleur global en fonction du temps : plus l'épaississement augmente, plus la flamme est insensible aux tourbillons. De plus, l'augmentation de la surface de flamme se fait avec un retard de plus en plus important par rapport à la référence.

Ces résultats de l'interaction flamme-tourbillons couplés à l'épaississement démontrent la nécessité d'apporter une correction sur la fluctuation de vitesse en sous-maille. En effet, cette vitesse vient plisser le front de flamme en sous-maille, ce qui doit augmenter d'autant la surface de flamme. Les trois cas précédents ont été reproduits en incluant cette fois la fonction d'efficacité de Charlette [32], avec la correction proposée par Wang *et al.* [221]. Cette formulation évalue la surface de flamme non-résolue en fonction de grandeurs nécessitant une résolution de sous-maille. La fluctuation de vitesse u' est approchée par la vitesse de sous-maille u_{sgs} à partir du modèle de Smagorinsky simplifié (voir Eq. 3.127). Ces cas de calcul, couplant épaississement et fonction d'efficacité, sont appelés C2, C3 et C4 (voir Tab. 6.4). Leur champs de température et terme source d'enthalpie à l'instant $t = 20$ ms est montré sur la Fig. 6.10. Ces cas présentent une flamme épaissie comme précédemment mais moins en retard sur la référence. L'évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global est tracé sur la Fig. 6.11 (droite). Plusieurs observations peuvent être faites :

- Le modèle TFLES affecte l'interaction flamme-turbulence, provoquant une diminution de la surface de flamme mais la fonction d'efficacité tend, au moins partiellement, à rattraper cet effet.
- Le cas C2 présente une dynamique quasiment identique à la référence : la fonction d'efficacité joue pleinement son rôle. Les cas C3 et C4 ont une dynamique légèrement différente mais plus proche de la référence que les cas B3 et B4.
- Le cas C4 montre des oscillations sur le taux de dégagement de chaleur global au début de

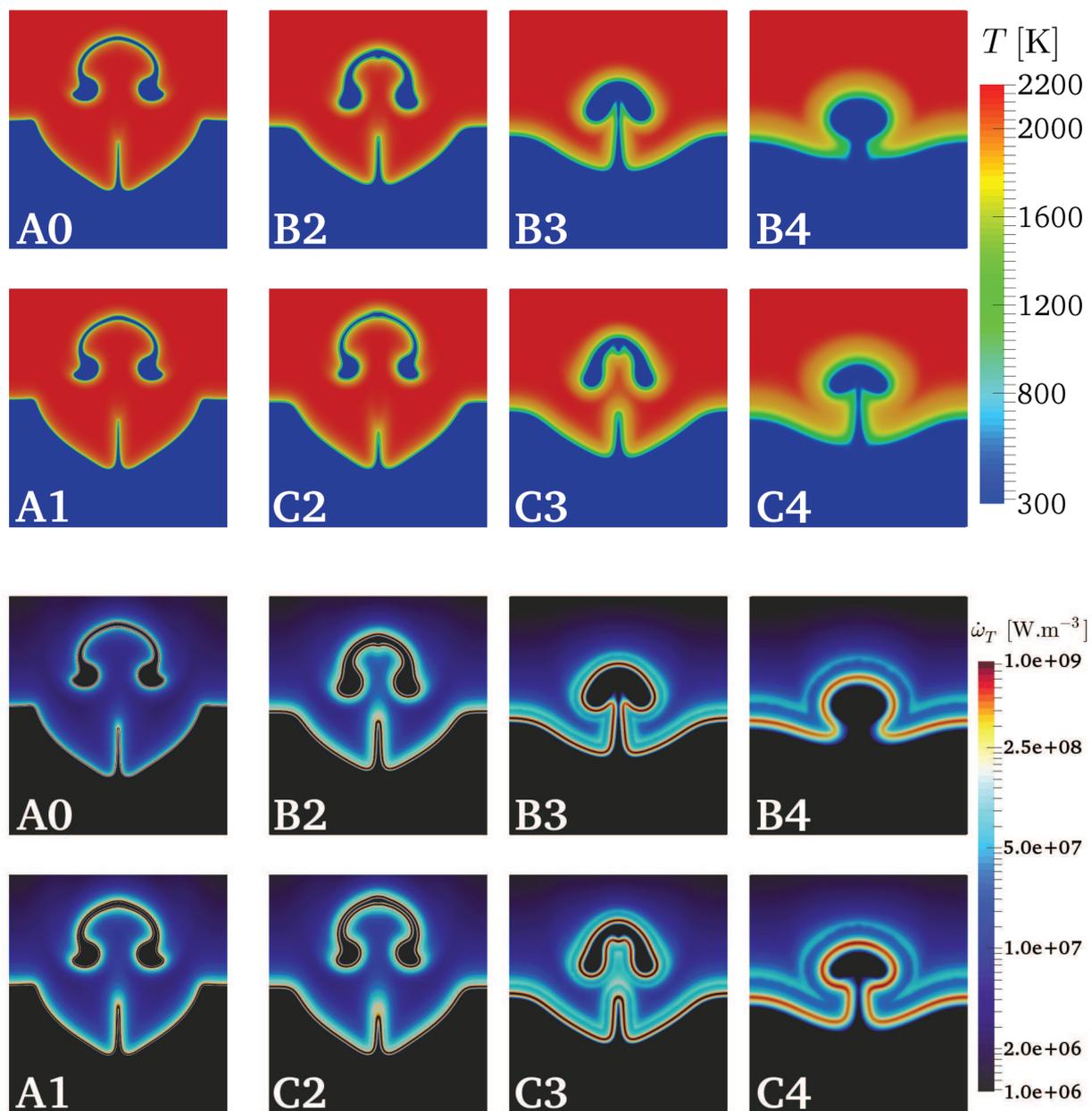


FIGURE 6.10: Comparaison du champs de température (haut) et du taux de dégagement de chaleur local (bas) à l'instant $t = 20$ ms, entre les différents cas de calcul.

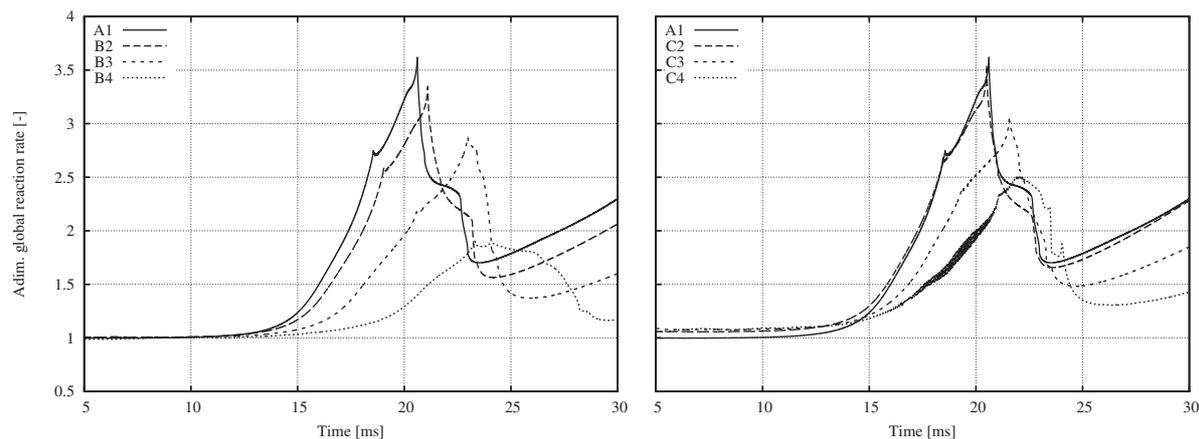


FIGURE 6.11: Taux de dégagement de chaleur en fonction du temps pour les cas B2 à B4 (gauche) et C2 à C4 (droite), comparés au cas A1.

l'interaction, entre 15 et 22 ms. La variabilité du capteur de flamme d'une itération sur l'autre peut être la cause de cet effet. Cela nécessiterait une correction de ce dernier.

- Les cas utilisant la fonction d'efficacité (C2-C4) présentent un taux de dégagement de chaleur de la flamme plane (entre 0 et 12 ms) légèrement supérieur à la référence de 5 – 10 %. Cela est provoqué par une évaluation incorrecte de u_{sgs} car la vitesse de sous-maille s'élève à $u_{sgs} \approx 0.3 \text{ m.s}^{-1}$ dans le front de flamme au lieu d'être nulle. Cela engendre une fonction d'efficacité non unitaire, alors qu'elle devrait valoir $\mathcal{E} = 1$.

L'ensemble de ces résultats montrent la capacité du modèle TFLES à capturer correctement la flamme et l'interaction flamme-turbulence sur des maillages relativement grossiers. En particulier, pour des cas de faibles épaissements, la dynamique de flamme est parfaitement respectée. Le cas C2 (épaissement $\mathcal{F} = 2$ et fonction d'efficacité de Charlette [32]) semble ainsi très prometteur et sera utilisé sur les simulations 3D. Pour des épaissements plus importants, des corrections doivent être apportés pour mieux prendre en compte l'interaction flamme-tourbillons, en changeant de fonction d'efficacité et/ou de formulation pour la vitesse de sous-maille u_{sgs} .

En terme de performances de calcul, le modèle TFLES permet un temps de retour beaucoup plus rapide grâce à l'utilisation de maillages plus grossiers. Les performances pour ce cas test sont rassemblés dans le Tab. 6.5 pour quelques cas. Les valeurs indiquées sont difficilement comparables car aucun paramètre n'a été conservé constant entre les différents cas sauf entre les cas B2 et C2 et entre B3 et C3 : l'ajout de la fonction d'efficacité montre un léger surcoût, attendu car l'intégration de la chimie est un peu plus longue. Cependant, la comparaison du temps de retour montre un gain d'environ 8 en passant d'un maillage à un maillage deux fois plus grossier. Cette valeur s'explique par le facteur 4 sur le nombre d'éléments et du facteur 2 sur le pas de temps convectif.

6.2 Validation de la stratégie sur la configuration MESO-CORIA

6.2.1 Présentation des calculs

L'ensemble de la stratégie de réduction de coût de calcul via l'utilisation du modèle TFLES est maintenant testé sur la configuration 3D du brûleur MESO-CORIA. Le cas de calcul avec le carburant méthane pur est reproduit avec des maillages plus grossiers que dans le chapitre précédent. Le Tab. 6.6

Cas	A1	B2	B3	C2	C3
Nombre d'éléments [$\times 10^3$]	2097	524	131	524	131
Nombre de processeurs	512	64	64	64	64
Pas de temps [μs]	2.1	3.5	8.4	3.3	7.3
Coût de calcul réduit [μs]	855	491	652	498	666
Temps de retour total [hCPU]	5750	522	81	545	87

TABLE 6.5: Performances de calcul de l'interaction flamme-tourbillons avec modèle TFLES.

Maillages	M2	M1	M0
Taille de maille moyenne Δx [μm]	50	100	200
Nombre d'éléments [$\times 10^6$]	34.2	4.28	0.602
Nombre de nœuds [$\times 10^6$]	6.17	0.743	0.108
Épaississement dynamique \mathcal{F}_{max} [-]	—	~ 2	~ 4

TABLE 6.6: Caractéristiques des maillages 3D de la configuration MESO-CORIA avec modèle TFLES.

rassemble les caractéristiques des maillages étudiés. Le maillage M2, composé de 34 millions d'éléments est le même que celui utilisé dans le chapitre 5. Deux maillages ont été testés ici, M1 et M0, possédant une résolution 2 et 4 fois plus grossière que M2. La Fig. Fig. 6.12 présente une visualisation de ces trois maillages homogènes.

Le modèle de sous-maille pour la turbulence demeure le modèle de Smagorinsky dynamique. Le modèle de combustion TFLES est activé avec un épaississement dépendant de la taille de maille locale selon l'Eq. 3.121 et la fonction d'efficacité de Charlette [32]. La valeur locale de l'épaississement et de la fonction d'efficacité est pilotée par le capteur de flamme basé sur le terme source $\dot{\omega}_c$ décrit dans la section 6.1.2.2.

Afin de valider le modèle TFLES sur la configuration du brûleur centimétrique, il est nécessaire que les simulations avec maillages grossiers donnent des résultats similaires aux résultats obtenus avec le maillage M2, sur la dynamique de l'écoulement ainsi que sur les performances globales.

6.2.2 Topologie de l'écoulement

La Fig. 6.13 compare les champs de vitesse instantanée et moyenne dans le domaine sur les plans A, B, C et D (définis sur la Fig. 5.14) et pour les maillages M2, M1 et M0. Il est important de noter que

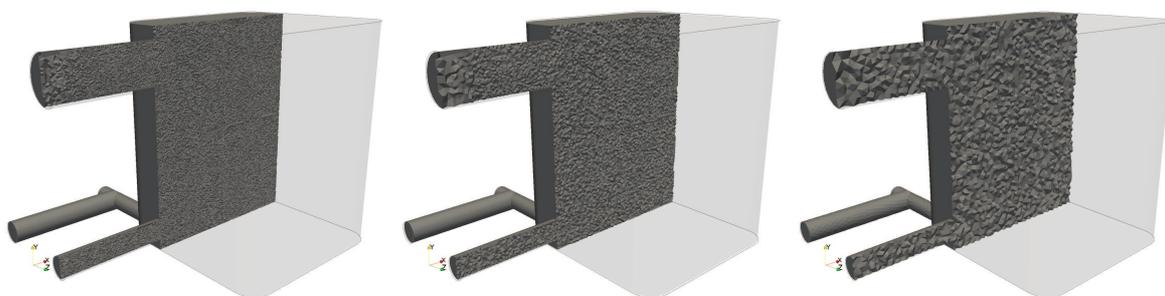


FIGURE 6.12: Comparaison des maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).

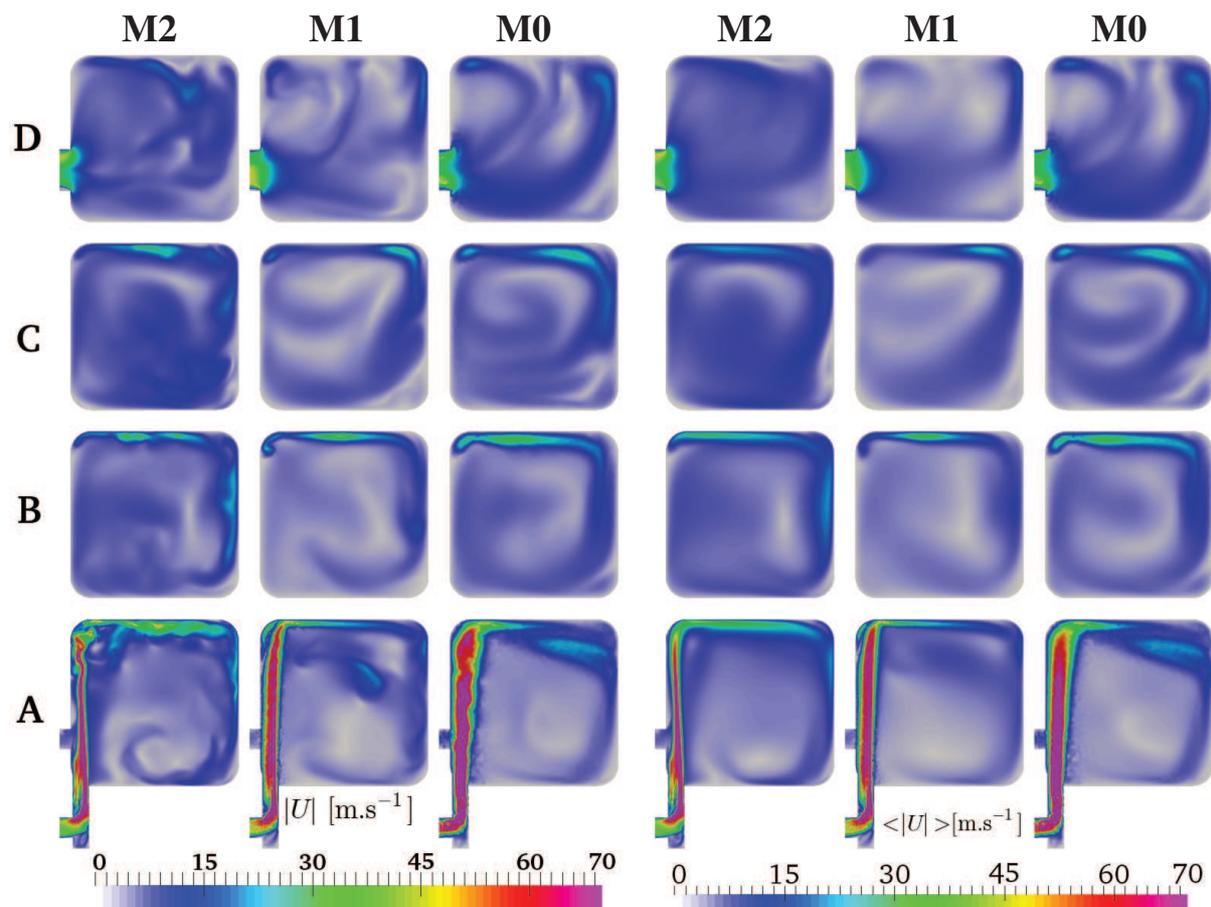


FIGURE 6.13: Comparaison des vitesses instantanée et moyenne sur les maillages M2, M1 et M0.

les champs instationnaires ne sont pas pris au même instant donc l'écoulement instantané ne peut pas être strictement comparé entre les maillages. En revanche, la dynamique instantanée et le comportement moyen entre les différentes résolutions peuvent être confrontés.

Montré sur le plan A, la dynamique du jet d'air est différente suivant le maillage considéré. Plus la résolution est grossière, plus le jet est épais et l'angle d'ouverture important. Cela modifie l'éclatement du jet sur la paroi opposée : beaucoup plus de structures cohérentes sont créées avec le maillage M2 qu'avec les maillages M1 et M0. L'iso-contour de critère-Q tracé sur la Fig. 6.14 pour chaque maillage confirme cette analyse. Avec le maillage M2, le jet d'air génère des tourbillons en entrant dans la chambre, puis impacte le mur faisant apparaître de plus petites structures. Les maillages M1 et M0 sont trop grossiers pour observer cette activité turbulente. En dehors de cette observation, les maillages M1 et M0 sont capables de capter correctement l'écoulement whirlé : après l'injection, les vitesses les plus importantes sont proches des parois menant à l'écoulement tourbillonnaire. Comme attendu, le centre du domaine présente des vitesses très faibles.

Le mélange entre l'air et le méthane est directement impacté par la description de la turbulence. Pour l'étudier, les champs de la fraction de mélange Z instantané et moyenne sur les plans A à D et maillages M2 à M0 sont tracés sur la Fig. 6.15. Dans le plan d'injection A, le mélange semble trop riche avec le maillage M1 et trop pauvre avec le maillage M0, comparé à M2. Avec la faible turbulence en dehors de la zone de jet, le mélange se fait principalement par diffusion moléculaire. De fait, on retrouve globalement l'observation du plan d'injection sur les plans suivants B à D. Cependant, on retrouve sur

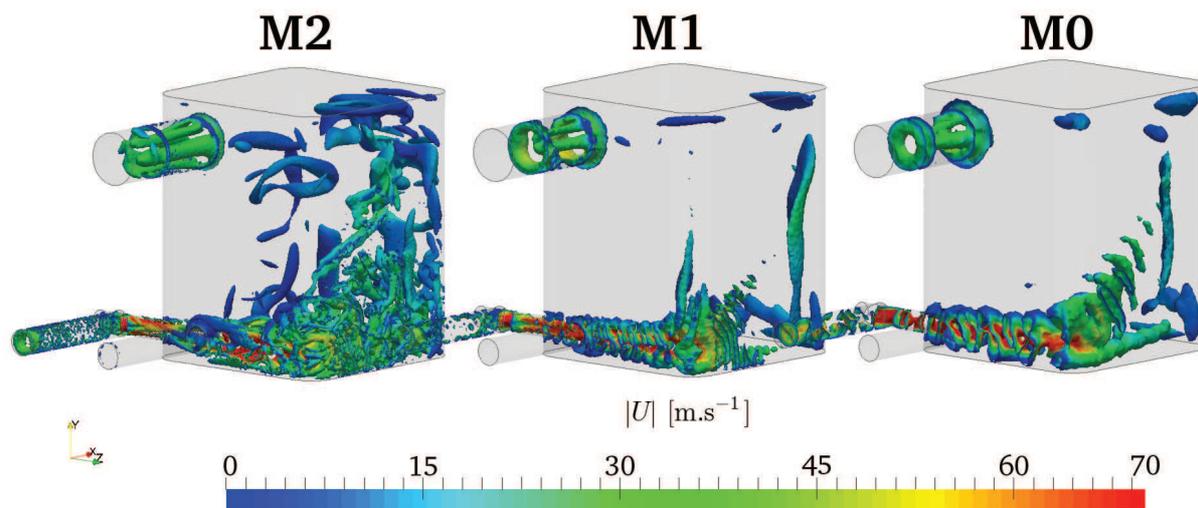


FIGURE 6.14: Iso-contours du critère-Q $Q = 1 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$, coloriés par la vitesse instantanée, sur les maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).

M1 et M0 les grandes caractéristiques du mélange obtenus avec M2 : le carburant injecté est coincé entre la paroi et le jet, créant une zone de recirculation riche le long de l'arête "supérieure gauche" du domaine. L'écoulement whirlé et le mélange par diffusion participent ensuite à l'homogénéisation du mélange.

L'écart de richesse constaté peut dès lors influencer la dynamique de la flamme. La Fig. 6.16 représente les champs de température instantanée et moyenne sur les mêmes plans que précédemment. La dynamique globale semble respectée avec les maillages grossiers couplés au modèle TFLES par rapport aux résultats issus de M2. L'écoulement est chaud dans le cœur central, au-dessus de 1700 K, puis refroidi en se rapprochant des parois dont la température est fixée à $T = 417 \text{ K}$.

L'ensemble des champs instantanés obtenus avec le maillage M1 montrent une grande similitude avec les champs moyens obtenus avec ce même maillage. Cela est encore plus vrai avec le maillage M0. L'utilisation d'un maillage de plus en plus grossier et couplé au modèle TFLES, dont l'épaississement augmente avec la taille de maille, influe sur la dynamique de l'écoulement. Plus le maillage est grossier, plus l'écoulement présente une activité turbulente faible. La flamme s'en retrouve moins déformée, avec un aspect plus laminaire.

La dynamique de la flamme est visible sur la Fig. 6.17, représentant le rendu volumique du taux de dégagement de chaleur dans le domaine 3D. Il est à noter que le dégagement de chaleur local est moins important avec le modèle TFLES car ce dernier est lié au terme source des espèces affecté par l'épaississement. Néanmoins, le taux de dégagement global doit rester le même. La topologie de la flamme obtenue avec les maillage M1 et M0 est la même que celle obtenue avec le maillage M2 : le front de flamme forme une sorte de cube, déformé par l'interaction avec l'écoulement. La flamme épaissie des maillages M1 et M0 présente une plus forte intensité sur trois faces latérales, comme avec M2. Cette observation est confirmée par les champs de dégagement de chaleur sur les plans A-D montrés par la Fig. 6.18.

L'analyse qualitative des champs de vitesse, critère-Q, fraction de mélange, température et taux de dégagement de chaleur ont montré que les caractéristiques globales de l'écoulement sont conservées avec des maillages grossiers couplés au modèle TFLES, par rapport aux résultats du chapitre précédent. Ces résultats ont montré aussi une influence sur la dynamique de l'écoulement.

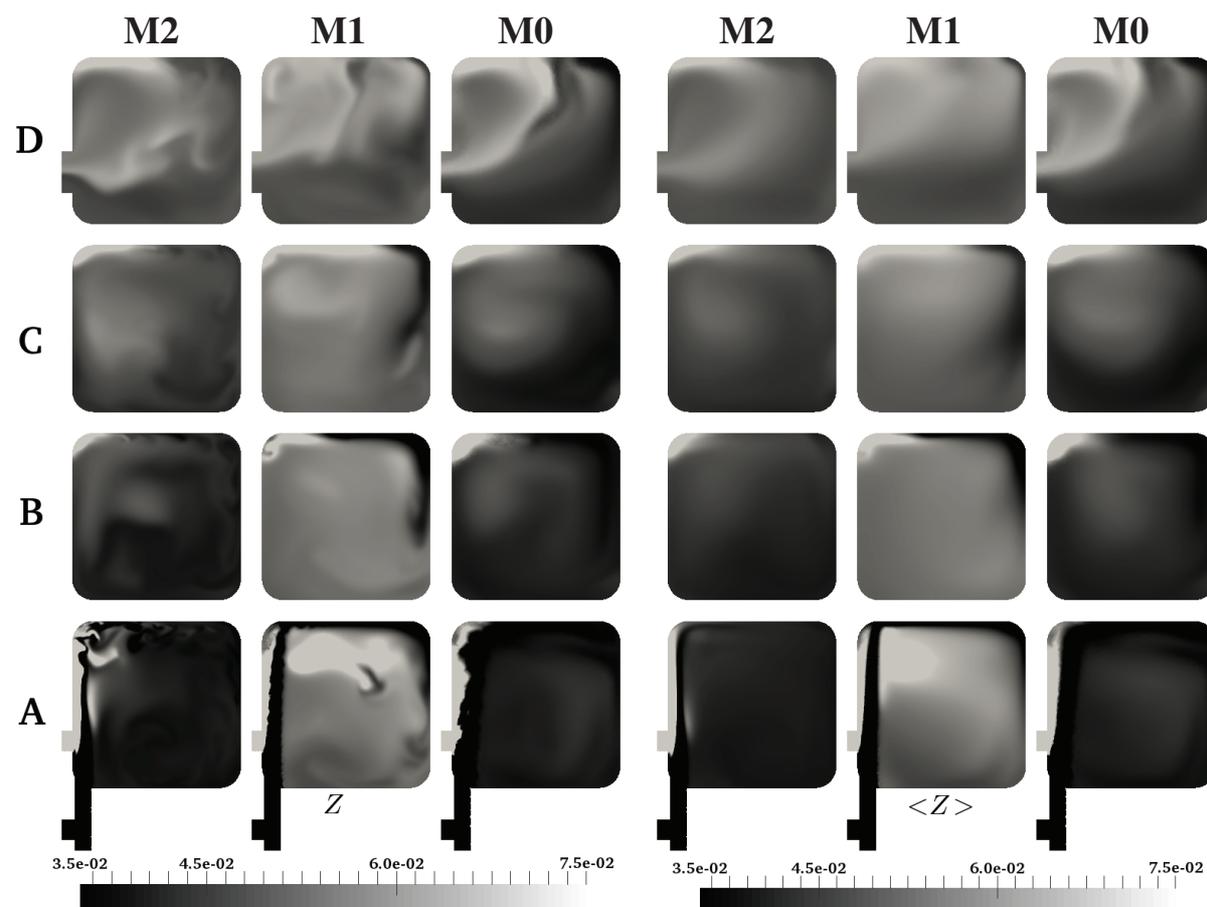


FIGURE 6.15: Comparaison de la fraction de mélange instantanée et moyenne sur les maillages M2, M1 et M0.

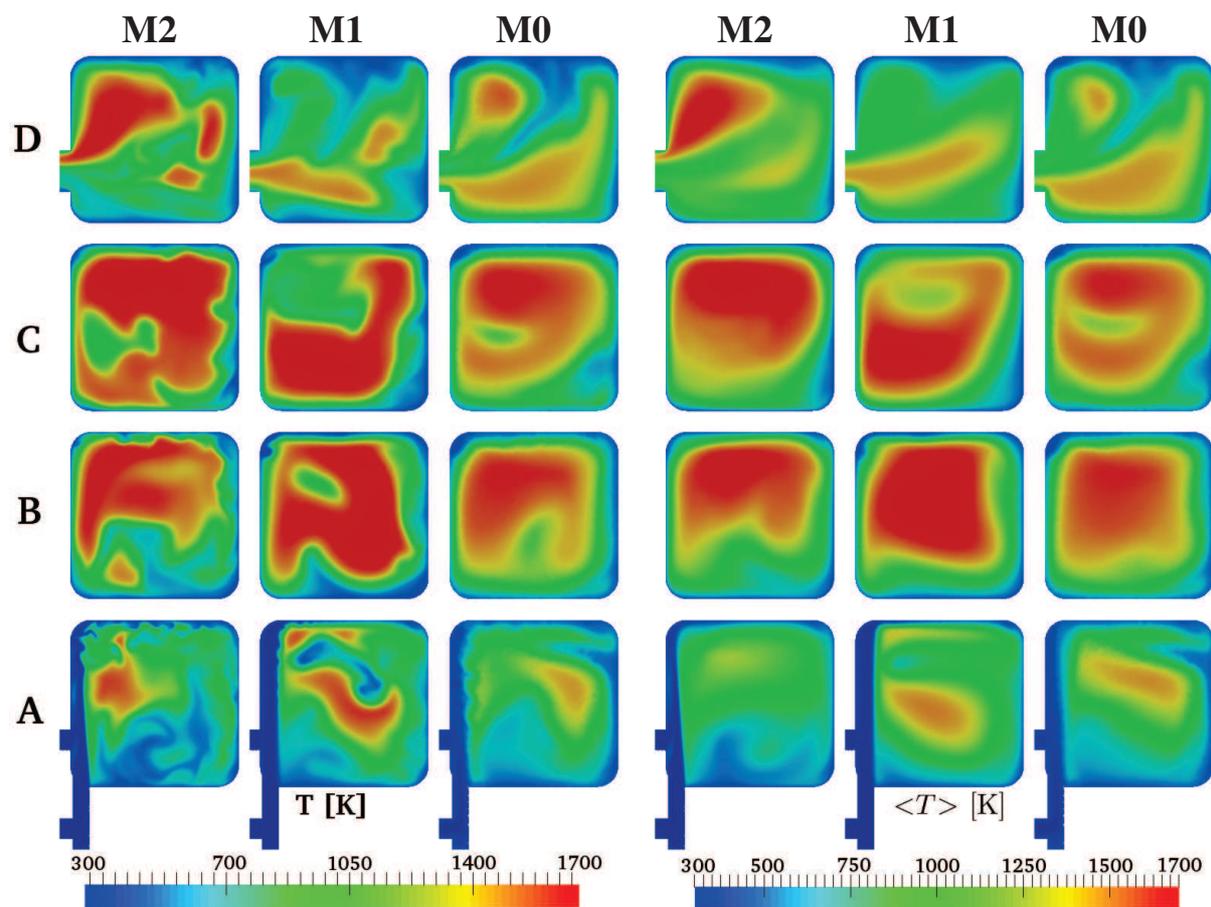


FIGURE 6.16: Comparaison des maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).

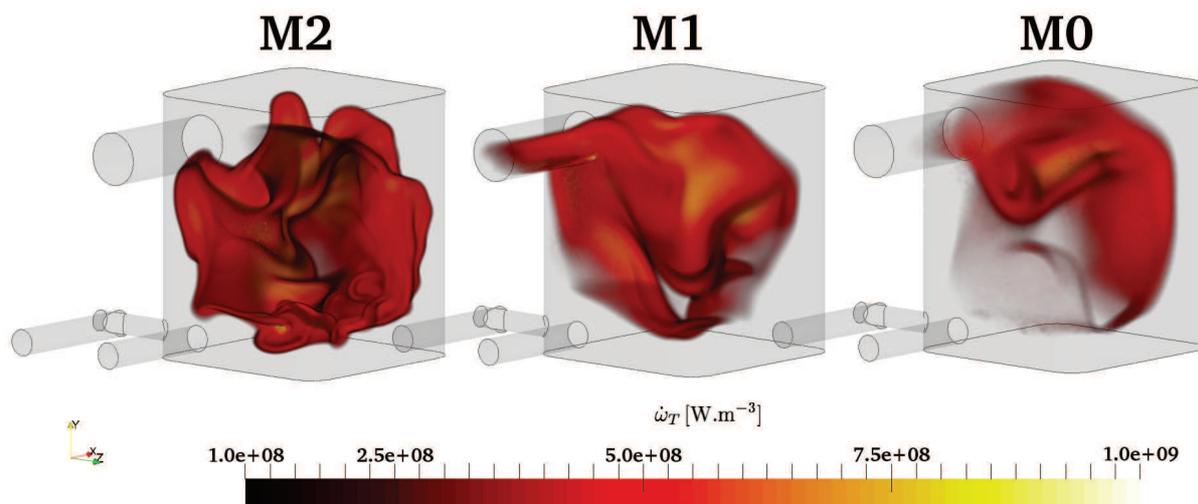


FIGURE 6.17: Rendu volumique du taux de dégagement de chaleur local $\dot{\omega}_T$ sur les maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).

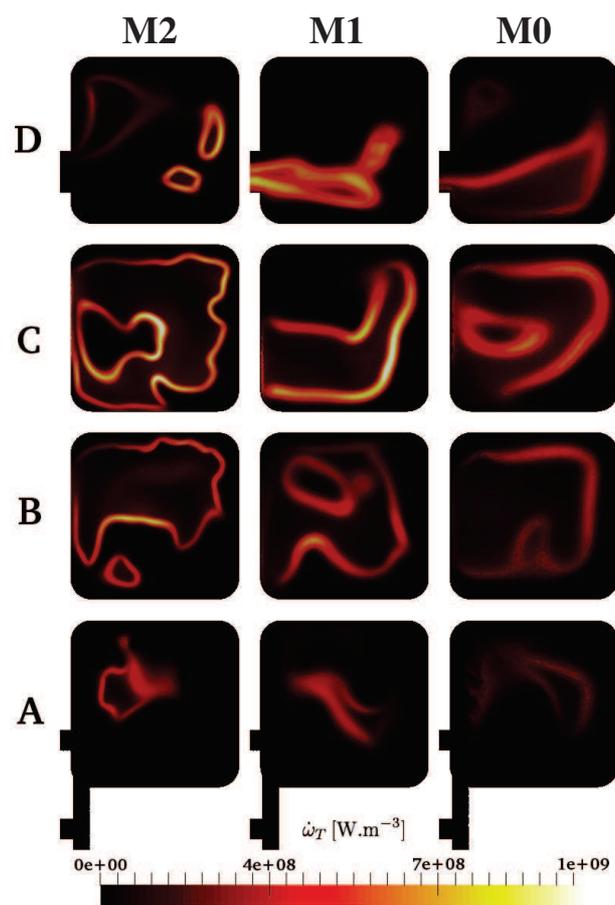


FIGURE 6.18: Champs de dégagement de chaleur local $\dot{\omega}_T$ sur les plans A-D et maillages M2-M0.

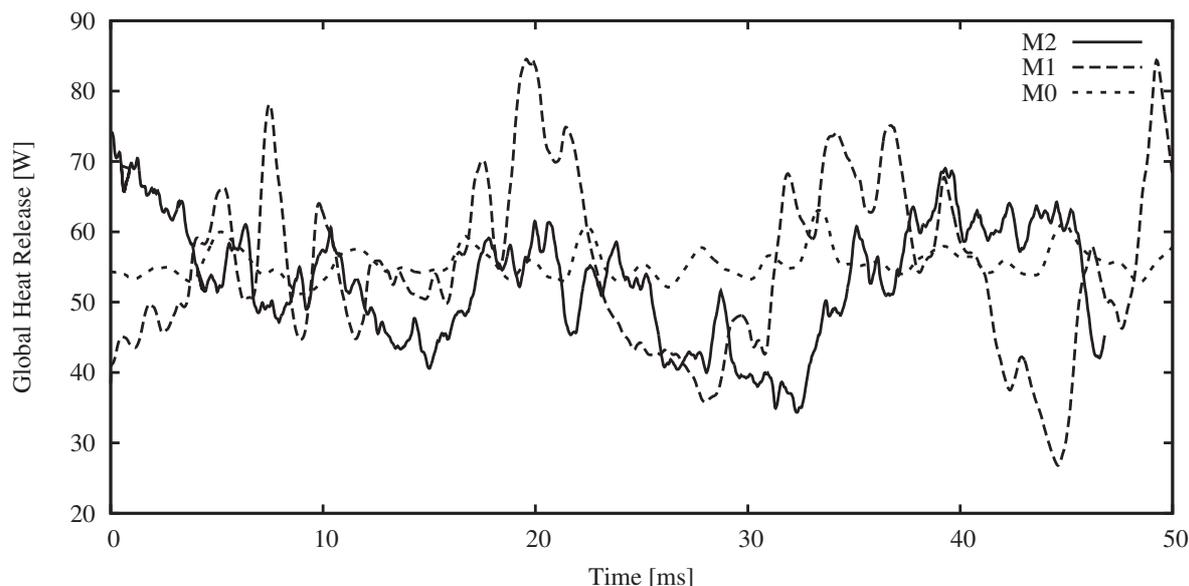


FIGURE 6.19: Evolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global pour chaque maillage.

Pour approfondir cette analyse, la Fig. 6.19 compare l'évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global obtenu avec chaque maillage. Il est important de noter que le champ initial n'est pas le même entre les différents cas de calcul donc l'écoulement ne suit pas la même évolution. En revanche la dynamique du signal peut être comparée. La Fig. 6.19 montre clairement que le taux de dégagement de chaleur global oscille beaucoup moins autour de la valeur moyenne avec le maillage M0 qu'avec les maillages M2 et M1 : l'amplitude entre la valeur minimale et maximale est de l'ordre de 10 W comparé à 40 et 50 W, respectivement. De plus la fréquence du signal de M0 semble beaucoup plus faible qu'avec les maillages plus résolus. D'autre part, les oscillations à basses fréquences du signal M2 semblent similaires à celles du signal M1. Le signal M2, de part sa meilleure résolution présente en plus des variations hautes fréquences.

Du fait de sa dynamique plus proche de l'écoulement de référence, les cas de calcul effectués avec le maillage M1 semblent montrer un meilleur potentiel que celui avec le maillage M0.

6.2.3 Performances globales et polluants

Afin de valider la stratégie de réduction de coût de calcul, il est nécessaire que les résultats globaux obtenus soient fidèles aux résultats de référence. Le Tab. 6.7 réunit l'ensemble des puissances obtenues, les fractions massiques des polluants en sortie et les rendements associés pour chaque cas de calcul. Dans un premier temps, on remarque que l'ensemble de ces données sont toujours similaires aux valeurs du calcul de référence avec une erreur ne dépassant pas 30 %.

Le calcul réalisé avec le maillage M1 montre un plus grand taux de dégagement de chaleur et légèrement moins de pertes thermiques par rapport à M2. Les rendements déduits de ces puissances sont ainsi meilleurs que pour le calcul de référence. Le calcul effectué avec M0 présente des résultats plus proches de la référence, en dehors du rendement chimique où le résultat obtenu avec M1 est plus proche de la référence.

Même si ces résultats diffèrent légèrement de la référence, les tendances obtenues sont cohérentes et peuvent être exploitées dans d'autres configurations de calcul. Cela valide la stratégie de réduction

Maillage	M2	M1	M0
Puissance chimique injectée P_{in} [W]	87.0	87.0	87.0
Puissance émise par la flamme P_r [W]	53.0	57.0	55.1
Pertes thermiques pariétales P_{loss} [W]	30.1	27.6	31.7
Bilan de chaleur entrée/sortie P_{out} [W]	22.9	29.4	23.4
Fraction massique de H ₂ O en sortie Y_{H_2O} [%]	8.3	9.2	8.6
Fraction massique de CO ₂ en sortie Y_{CO_2} [%]	8.0	8.7	8.9
Fraction massique de CO en sortie Y_{CO} [%]	1.8	2.1	1.3
Fraction massique de UHC en sortie Y_{UHC} [%]	1.7	1.2	1.7
Rendement de conversion $\eta_{conv} = P_r/P_{in}$ [%]	60.9	65.5	63.3
Rendement chimique $\eta_{chem} = [CO_2]/([CO_2] + [CO] + [CH_4])$ [%]	52.0	56.5	57.0
Rendement thermique $\eta_t = P_{out}/P_r$ [%]	43.2	51.6	42.5
Rendement global $\eta_g = \eta_{conv}\eta_t$ [%]	26.3	33.8	26.9

TABLE 6.7: Performances globales moyennes obtenus avec les maillages M1 et M0 couplés au modèle TFLES, comparé au calcul de référence avec M2.

de calcul du point de vue des résultats. Dans la suite du manuscrit, une résolution de l'ordre de celle du maillage M1, $\Delta x = 100 \mu\text{m}$, sera préférée car elle permet de mieux transcrire la dynamique de l'écoulement. Avec la taille de maille de M0, trop peu de points sont insérés dans les tubes d'injection et dans la zone de jet, menant à une description insuffisante de l'activité turbulente.

6.2.4 Performances de calcul

Les performances de calcul sont rassemblées dans le Tab. 6.8. Les simulations ont été effectuées sur la machine Antares du CRIHAN, présentant des performances comparables à la machine Curie sur laquelle ont été obtenus les résultats de référence. On remarque que le passage du maillage M2 au maillage M1 entraîne un coût de calcul réduit similaire. Le temps de retour est 16 fois plus faible avec M1, ce qui correspond au facteur 8 sur le nombre d'éléments et 2 sur le pas de temps. Le maillage M0 permet un gain sur le temps de retour de seulement 8.8 par rapport à M1. Deux raisons expliquent ce résultat :

- La plus faible résolution du maillage M0 entraîne une valeur de vitesse maximale plus grande d'environ 30 % par rapport à M2 et M1. Même si cette vitesse maximum est très localisée et n'impacte pas forcément l'écoulement, elle ne permet pas de gagner le facteur 2 sur le pas de temps convectif.
- L'augmentation progressive du pas de temps en passant de M2 à M1 puis à M0 engendre un temps d'intégration de plus en plus important de la chimie, ce qui affecte les performances. Dans le Tab. 6.8, on remarque que la part du calcul des termes sources passe de 39 % avec M2 à 52 % avec M0.

Le rapport qualité des résultats - temps de retour montré par le maillage M1 est très satisfaisant. La stratégie de calcul "maillage avec une résolution de $100 \mu\text{m}$ et modèle TFLES" permettra de calculer de nombreuses configurations.

Maillage	M2	M1	M0	
Nombre d'éléments [$\times 10^6$]	34.2	4.28	0.602	
Nombre de processeurs	1024	256	128	
Pas de temps [μs]	0.168	0.320	0.462	
Coût de calcul réduit [μs]	1030	981	1103	
Temps de retour [hCPU/ms]	9921	634	72	
Répartition	Scalaires [%]	76	88	84
	dont Termes sources [%]	39	45	52
	dont Advection [%]	13	15	12
	dont Diffusion [%]	16	17	11
	Communications [%]	13	11	13
	Equation de Poisson [%]	11	4	8

TABLE 6.8: Synthèse des performances de calcul pour la configuration MESO-CORIA avec maillages grossiers couplés au modèle TFLES et comparé au résultat de référence.

6.3 Amélioration de la forme du brûleur

6.3.1 Méthodologie

6.3.1.1 Constat

L'objectif du projet MESOTHERM dans lequel s'inscrit cette thèse est à la base de réaliser un démonstrateur de générateur d'électricité constitué d'une chambre de combustion et des matériaux thermoélectriques convertissant directement la chaleur issue de la combustion en électricité. Aujourd'hui, le rendement maximal que l'on peut obtenir avec ce type de matériaux ne dépasse pas 10 %. Le rendement global du système s'en trouve fortement impacté. Une première condition est que tous les composants du système doivent tirer les meilleures performances possibles afin d'optimiser au mieux le système.

La chambre de combustion, qui est l'un de ces systèmes, a pour objectif de convertir le maximum de carburant injecté en chaleur en sortie afin de garantir un rendement maximal. Le brûleur MESO-CORIA était une première piste d'étude pour prendre place en tant que chambre de combustion dans le projet MESOTHERM. Or, il a été vu dans les sections précédentes que le rendement de conversion de cette chambre avec du méthane ne dépasse guère 60 %. Tout le carburant injecté n'est pas consommé et de nombreux produits de combustion imbrûlés sont présents à la sortie. Grâce aux simulations précédentes, on a constaté que le mélange des réactifs n'était pas optimal, ce qui semble être dû à des recirculations de coins ainsi qu'à une faible activité turbulente.

De plus, on a observé que le rendement thermique du brûleur MESO-CORIA est de l'ordre de 40 % : plus de chaleur est perdue aux parois que de chaleur n'est transmise en sortie. La cause principale de ce comportement est la perte d'énergie de la flamme vers les parois froides de la chambre. Les simulations LES ont montré que le flux de chaleur à la paroi pouvait s'élever à la valeur maximale du flux perdu par une flamme impactant de façon normale une paroi. L'écoulement tourbillonnaire whirlé ne joue pas ici son rôle de barrière thermique protectrice entre la paroi et les gaz brûlés du cœur central.

6.3.1.2 Approche

Au vu de l'ensemble de ces observations, il est nécessaire d'améliorer au mieux la chambre de combustion jusqu'à maintenant étudiée afin d'en tirer les meilleures performances possibles. De nombreuses pistes d'améliorations sont envisagées.

L'enrichissement du mélange de carburant en hydrogène est l'une d'entre elles. L'étude menée dans la section 5.3 a montré une amélioration des performances, mais uniquement pour une certaine plage d'enrichissement, et sans atteindre des résultats pleinement satisfaisants.

D'autres solutions sont possibles, comme le changement du point de fonctionnement. Par exemple, le brûleur pourrait fonctionner à une richesse pauvre, ce qui assurerait de brûler tout le carburant injecté et limiter les polluants à condition de limiter l'extinction de flamme à la paroi. On peut aussi imaginer que des débits plus forts favoriseraient l'activité turbulente et ainsi le mélange des réactifs. Dans ce cas, le temps de séjour dans la chambre s'en trouverait diminué et pourrait provoquer une combustion encore plus incomplète.

L'isolation thermique du brûleur constitue une voie d'amélioration. Les flux thermiques aux parois seraient réduits, ce qui améliorerait de fait le rendement thermique. Une telle solution est tout de même limitée par la capacité du matériau constituant le brûleur à soutenir des températures élevées. L'isolation thermique entraîne aussi une élévation de température du fluide dans le domaine et donc du fluide en sortie, ce qui peut constituer un problème pour l'échange thermique avec les matériaux thermoélectriques.

Une autre voie d'amélioration consiste en la modification de la géométrie. En effet, la géométrie cubique utilisée montre certains défauts : recirculations de coins, mauvais mélange des réactifs, écoulement tourbillonnaire imparfait. De toute évidence, dictée par des problématiques d'accès optiques, le choix de cette géométrie ne se révèle pas le meilleur. D'autres formes de chambre peuvent être envisagées. Comme dans les travaux de Wu *et al.* [231], Yetter *et al.* [236] ou Cozzi *et al.* [49], une géométrie cylindrique permettrait de favoriser l'écoulement tourbillonnaire whirlé. On peut penser que cela améliorerait le mélange et que les gaz frais isoleraient mieux thermiquement le cœur chaud des parois. Des changements géométriques plus légers peuvent aussi être analysés : variations du rayon, de la longueur du cylindre, du diamètre des entrées/sorties...

Toutes les solutions proposées ici présentent des avantages et des inconvénients, mais elles mériteraient toutes d'être étudiées. Dans un souci de temps et de coût, seule le changement de la forme de la chambre de combustion a été étudié dans ces travaux et différentes configurations ont été testées.

6.3.2 Configurations étudiées

Le point de départ de cette optimisation est le passage du brûleur MESO-CORIA cubique à une forme cylindrique de rayon $r = 5$ mm et tronquée de 1 mm afin de modéliser un accès optique plat (voir Fig. 6.20). Cette configuration est appelée CYL1. Les autres paramètres sont conservés identiques : diamètres et emplacements des entrées et sorties.

A partir de la configuration CYL1, d'autres configurations ont été déclinées, représentées sur la Fig. 6.20. La géométrie CYL2 est identique à CYL1 mais l'entrée d'air est parfaitement tangente au cylindre. La configuration CYL3 reprend la géométrie de CYL2 mais avec un cylindre complet, non tronqué. La dernière configuration testée, CYL4, est similaire à CYL3 mais avec l'injection de carburant directement dans le tube d'entrée d'air.

Le Tab. 6.9 rassemble les caractéristiques géométriques de ces quatre configurations.

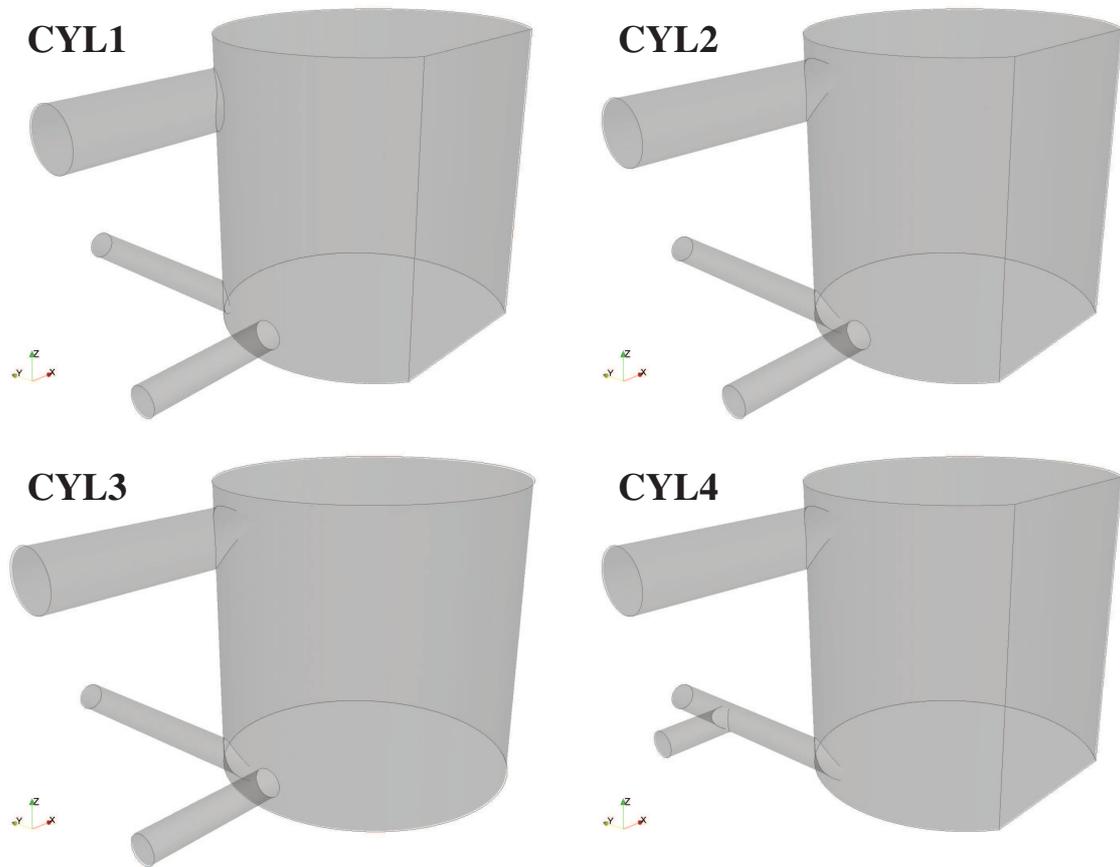


FIGURE 6.20: Visualisation 3D des nouvelles configurations cylindriques étudiées.

Configuration	CYL1	CYL2	CYL3	CYL4
Volume V [mm^3]	744.5	744.5	785.4	744.5
Surface S_w [mm^2]	52.9	53.7	54.9	52.9
Particularité	Cyl. tronqué	Cyl. tronqué, inj. air tangente	Cyl. entier, inj. air tangente	Cyl. tronqué inj. air tangente inj. carb. dans air
Elements [$\times 10^6$]	6.34	5.03	5.28	5.02
Nœuds [$\times 10^6$]	1.80	1.44	1.50	1.44
Δx [μm]	89.2	96.2	96.4	96.3

TABLE 6.9: Caractéristiques géométriques et de maillages des configurations cylindriques.

6.3.3 Paramètres physiques et numériques

Des maillages tétraédriques ont été produits pour chaque configuration avec une taille de maille approchant $100\ \mu\text{m}$. Le nombre d'éléments est compris entre 5 et 6.3 millions (cf. Tab. 6.9).

Afin d'être comparable à la géométrie cubique de la section précédente, le point de fonctionnement est conservé : la puissance chimique injectée est de 87 W et la température de paroi fixée à 417 K.

Les paramètres numériques sont également gardés constants. Le modèle TFLES dynamique est utilisé comme dans la section 6.2 : épaisseur variable en fonction de la taille de maille et du capteur de flamme, et fonction d'efficacité de Charlette [32].

En revanche la stratégie d'allumage est différente pour ces configurations cylindriques que pour la configuration MESO-CORIA. En effet, l'écoulement réactif dans la géométrie MESO-CORIA sur le maillage M1, de 4 millions d'éléments, a été obtenu sans difficulté particulière par interpolation du résultat obtenu avec le maillage M2, de 35 millions d'éléments. Pour les configurations cylindriques, l'allumage doit s'effectuer directement sur le maillage grossier. Un allumage trop fort implique des gradients plus raides sur certaines variables comme la température ou la vitesse. La procédure d'allumage peut dans ce cas faire diverger le calcul. A l'opposé, un allumage trop faible voit le noyau d'allumage soufflé par l'écoulement. Beaucoup de temps a été nécessaire pour trouver le bon compromis et une stratégie d'allumage efficace pour obtenir l'écoulement réactif dans ces nouvelles géométries. De plus, il sera vu par la suite que le mélange entre réactifs est peu efficace, ce qui affecte d'autant plus la réussite de l'allumage.

6.3.4 Etude de l'écoulement réactif

La Fig. 6.21 montre les lignes de courant passant par le tube d'injection d'air dans chaque configuration cylindrique. L'écoulement tourbillonnaire est parfaitement respecté dans toutes les géométries cylindriques et aucune recirculation de coin, observable dans la géométrie cubique, n'est visible.

L'écoulement whirlé est aussi apparent sur la Fig. 6.22 représentant le champ de vitesse moyenne dans le plan d'injection. L'injection d'air à forte vitesse, supérieure à $40\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, laisse place à un écoulement rapide proche des parois ($30\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) et au cœur central calme. Le caractère tronqué du cylindre sur les configurations CYL1, CYL2 et CYL4 n'affecte pas particulièrement l'écoulement comme le montre le champ de vitesse sur CYL3 : l'écoulement ne se décroche pas de la paroi.

Contrairement à la géométrie cubique, le jet d'air n'impacte pas la paroi opposée à l'injection. De plus, le coude présent dans le tube d'injection sur la configuration MESO-CORIA était responsable de la création de structures cohérentes. Pour ces deux raisons, l'activité turbulente dans les géométries cylindriques est beaucoup plus faible. Comme le montre le champ de vitesse RMS dans le plan d'injection de la Fig. 6.23, les vitesses RMS n'excèdent pas $2\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, hormis la configuration CYL4 où elles peuvent atteindre $4\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ car les débit de carburant et d'air sont combinés. Dans la configuration MESO-CORIA, les vitesses RMS dépassent $10\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ dans toute la zone du jet d'air et sont d'environ $5\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ en proche paroi dans le reste du domaine. Cette plus faible activité n'est a priori pas favorable au mélange entre réactifs et à l'augmentation de la surface de flamme.

La Fig. 6.24 montre la fraction de mélange Z dans le plan d'injection pour chaque configuration cylindrique. Avec la géométrie CYL1, comme l'injection d'air n'est pas tangente au cylindre, une zone de méthane pur se crée entre le jet d'air et l'injection de carburant. Cette zone contourne le jet d'air, provoquant une zone riche en méthane visible dans le plan d'injection. Le mélange est très inhomogène. Dans les configurations CYL2 et CYL3, où l'injection d'air est tangente au cylindre, le jet d'air emporte

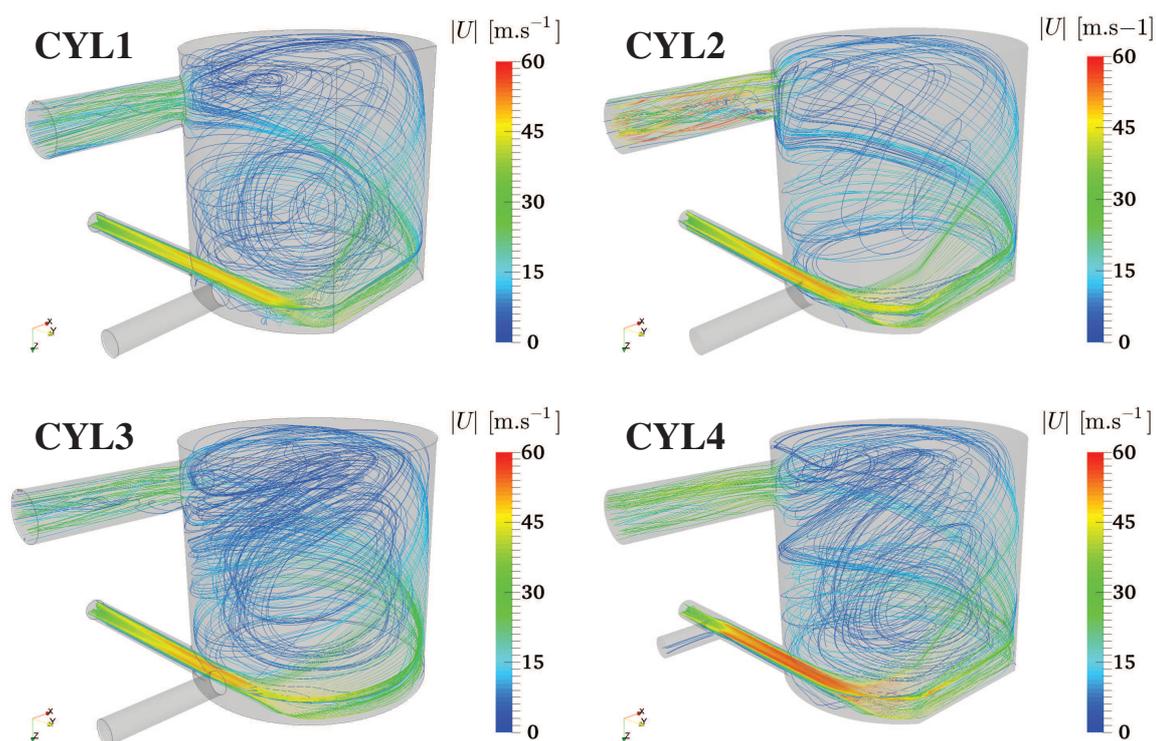


FIGURE 6.21: Visualisation des lignes de courant dans les configurations cylindriques.

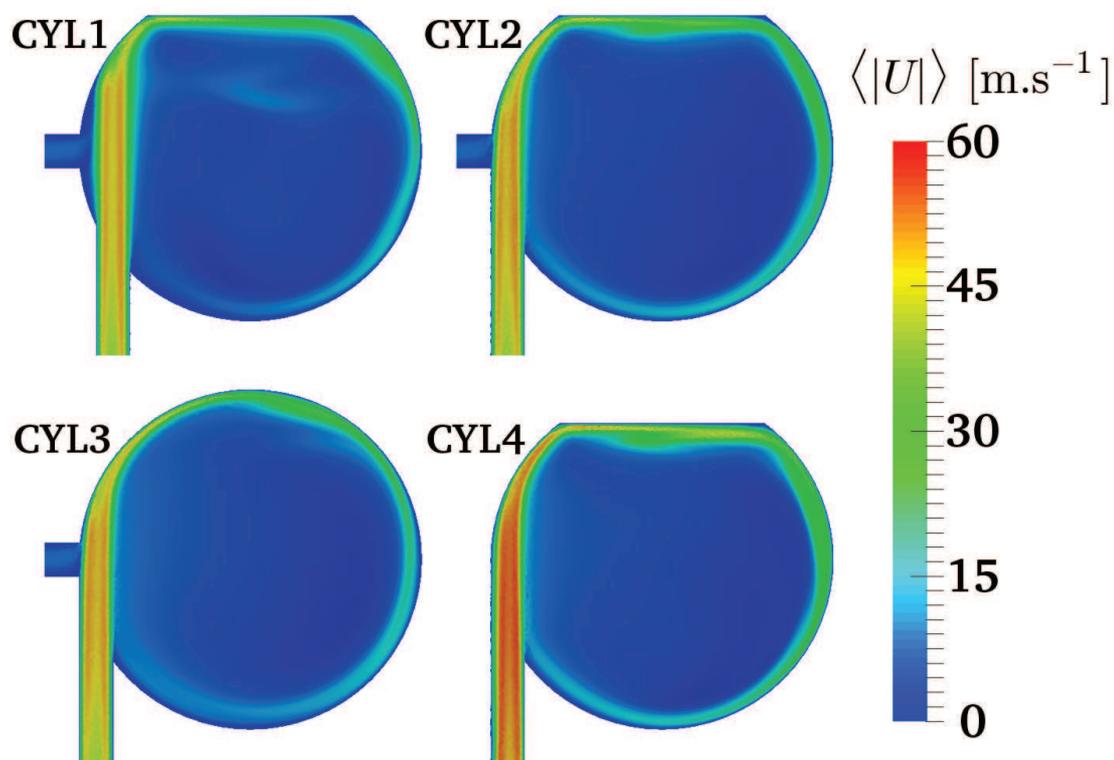


FIGURE 6.22: Champs de vitesse moyenne dans le plan d'injection pour chaque géométrie cylindrique.

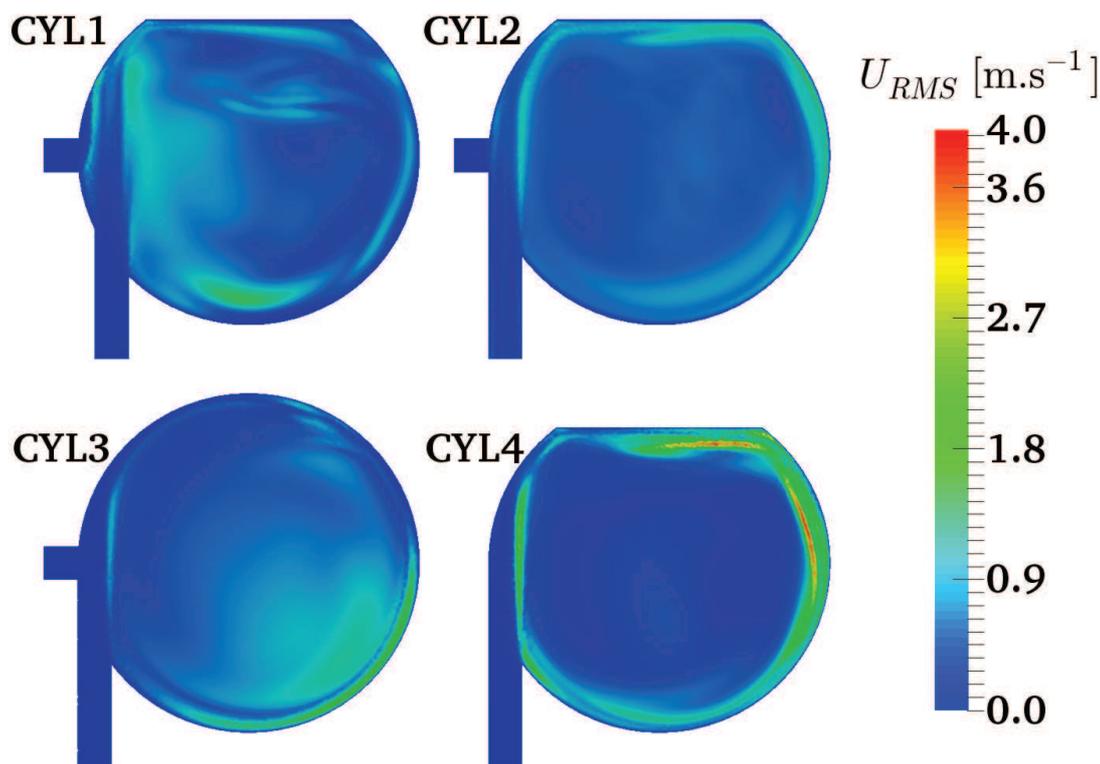


FIGURE 6.23: Champs de vitesse RMS dans le plan d'injection pour chaque configuration cylindrique.

des poches de méthane. Cette dynamique permet un meilleur mélange des réactifs. Avec la géométrie CYL4, on observe une zone pauvre et une zone riche côte-à-côte dans le tube d'injection unique. Même si le fluide rentrant dans la chambre n'est pas parfaitement mélangé, le champ de fraction de mélange dans le reste du plan d'injection est assez homogène. C'est cette configuration, avec CYL2, qui semble présenter le meilleur mélange parmi les quatre géométries étudiées.

Après la séquence d'allumage, l'écoulement est convergé pendant quelques temps de passage soit environ 20 ms. Au cours de cette phase de convergence, la flamme s'est éteinte dans les configurations CYL1 et CYL3. Cette extinction s'explique par le mélange peu efficace entre réactifs et à la trop faible surface de flamme. Dans la suite, seuls les résultats des configurations CYL2 et CYL4 sont présentés.

La Fig. 6.25 présente le champ de température dans le plan médian ($z = 5$ mm) pour ces deux géométries. Les réactifs froids se concentrent en proche paroi et s'enroulent autour du cœur central chaud, comme attendu avec l'écoulement whirlé. A l'interface de ces deux zones, la flamme s'installe comme le révèle le rendu volumique du taux de dégagement de chaleur local sur la Fig. 6.26 ou le champ de dégagement de chaleur dans le plan médian de la Fig. 6.27. Ces figures montrent que la flamme a une forme cylindrique et laminaire. La flamme dans la configuration MESO-CORIA apparaît ainsi beaucoup plus plissée que dans les configurations cylindriques. Le manque d'intensité de la turbulence peut expliquer ce phénomène.

6.3.5 Performances

A partir des simulations sur les configurations cylindriques, un bilan énergétique est effectué de la même manière que pour la géométrie MESO-CORIA. L'évolution temporelle du taux de dégagement de

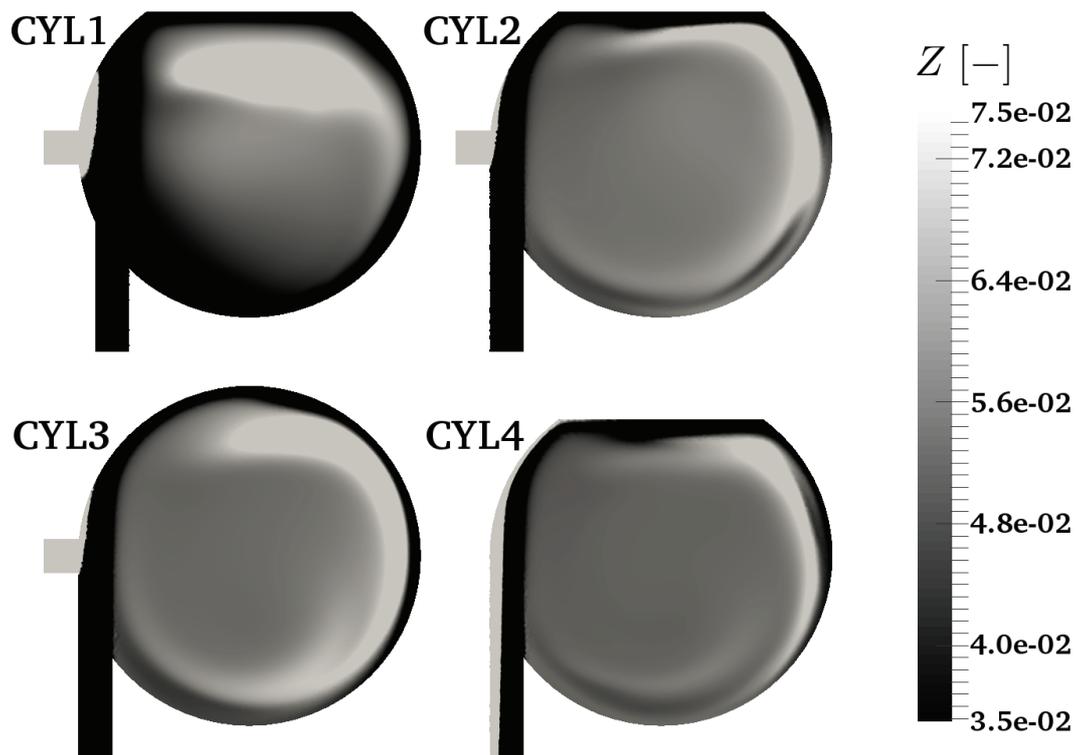


FIGURE 6.24: Champs instantanés de fraction de mélange Z dans le plan d'injection des configurations cylindriques.

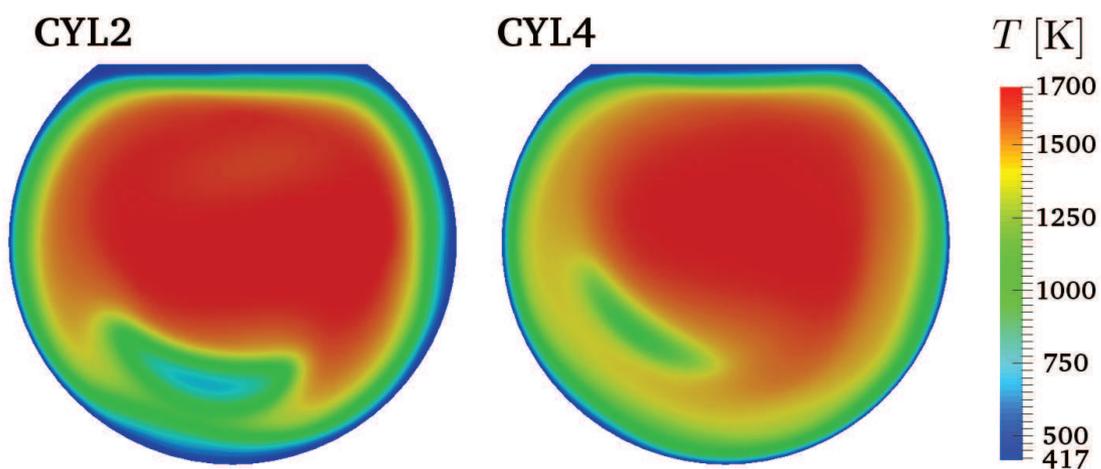


FIGURE 6.25: Champs instantanés de température T dans le plan médian pour les configurations CYL2 et CYL4.

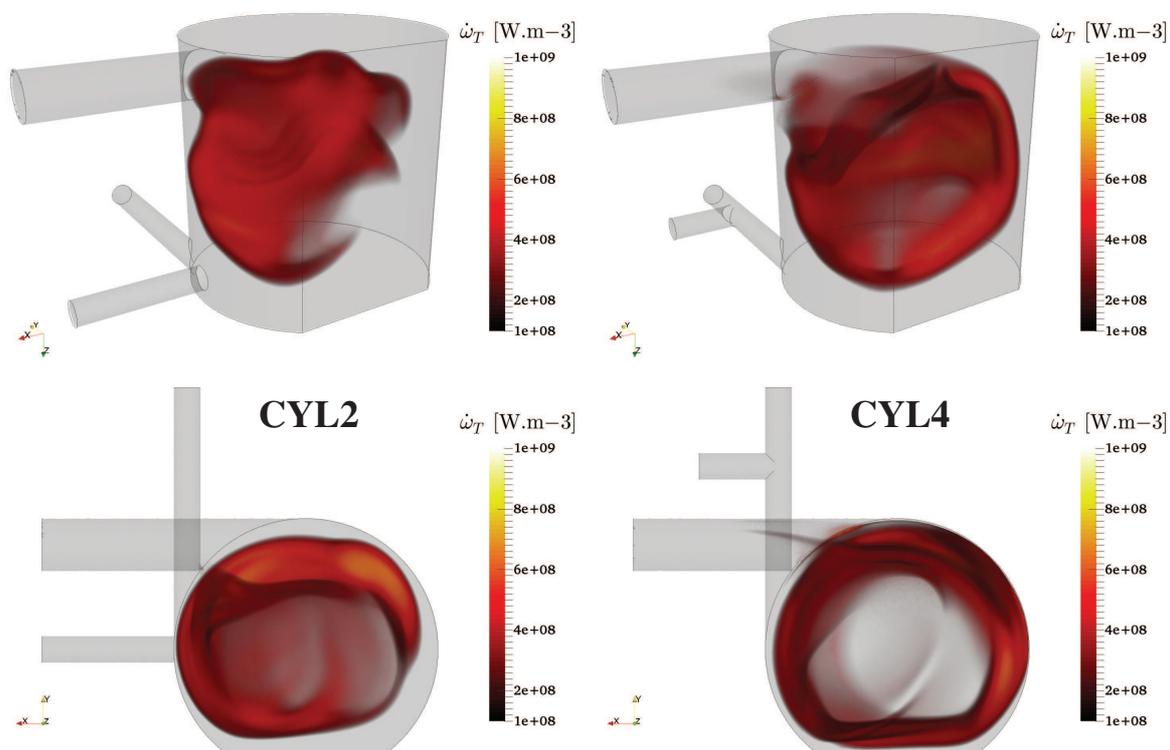


FIGURE 6.26: Rendu volumique 3D du taux de dégagement de chaleur local représentant la flamme des configurations CYL2 et CYL4.

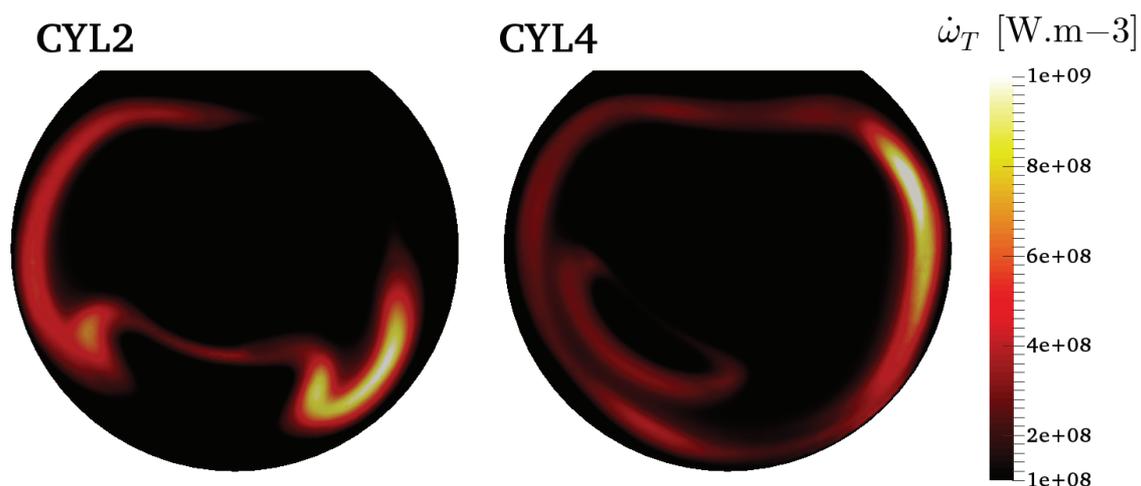


FIGURE 6.27: Taux de dégagement de chaleur local instantané dans le plan médian pour les configurations CYL2 et CYL4.

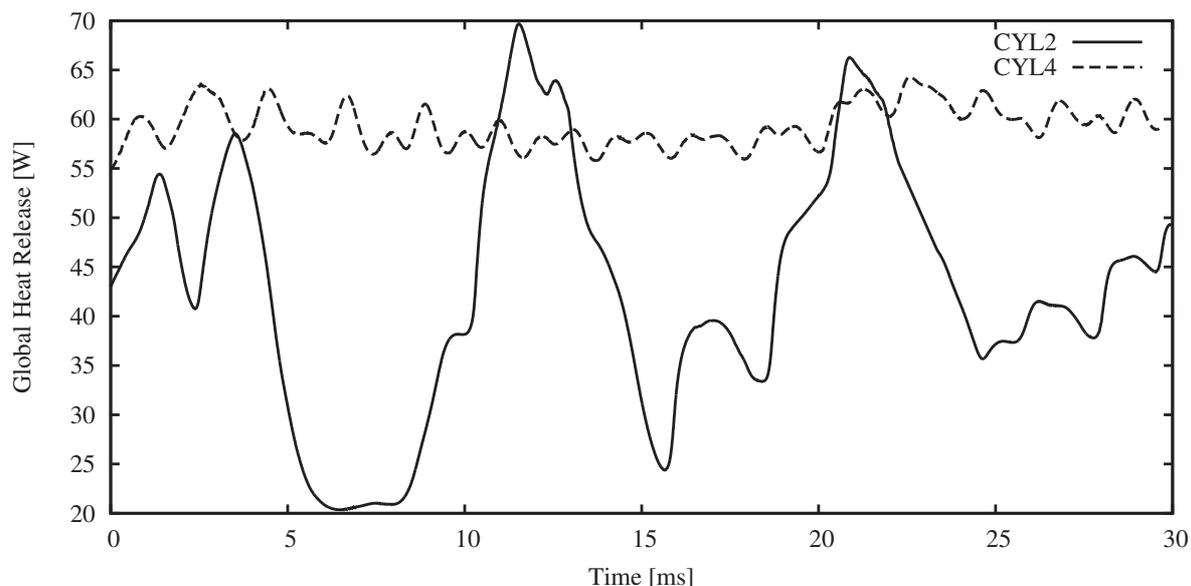


FIGURE 6.28: Evolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global pour les configurations CYL2 et CYL4.

Configuration	CYL1	CYL2	CYL3	CYL4
Puissance chimique injectée P_{in} [W]	87.0	87.0	87.0	87.0
Dégagement de chaleur global P_r [W]	–	40.9	–	59.2
Pertes thermiques pariétales P_{loss} [W]	–	26.6	–	41.5
Bilan de chaleur entrée/sortie P_{out} [W]	–	14.3	–	17.7
Rendement de conversion $\eta_{conv} = P_r/P_{in}$ [%]	–	47.0	–	68.0
Rendement thermique $\eta_t = P_{out}/P_r$ [%]	–	35.0	–	29.9
Rendement global $\eta_g = P_{out}/P_{in}$ [%]	–	16.4	–	20.3

TABLE 6.10: Performances globales moyennes obtenues sur les configurations cylindriques.

chaleur global est tracé sur la Fig. 6.28. Ce dernier est très variable sur la configuration CYL2, allant de 20 à 70 W. Dans le cas de la configuration CYL2, le taux de dégagement de chaleur global reste compris entre 55 et 65 W. La seule différence entre ces deux géométries réside dans l'emplacement de l'injection de méthane : directement dans la chambre pour CYL2 et dans l'injection d'air pour CYL4. D'après la Fig. 6.24, le mélange des réactifs de meilleure qualité pour la configuration CYL4 permet à la flamme d'être plus stable que pour la configuration CYL2.

Les performances globales moyennées en temps sont rassemblées dans le Tab. 6.10. On retrouve le taux de dégagement de chaleur global différents pour les deux configurations dont l'allumage a tenu : environ 41 % pour CYL2 et 58 % pour CYL4. Ces résultats montrent un meilleur rendement de conversion pour la géométrie CYL4. Sur la chaleur produite par la flamme, 27 W sont perdus aux parois pour CYL2 contre 42 W pour CYL4. Le rendement thermique est meilleur pour CYL2 que pour CYL4. Si l'on regarde le rendement global, la configuration CYL4 s'avère meilleure que CYL2, avec 20 % contre 16 %. Ces valeurs sont inférieures à celle obtenue avec la configuration MESO-CORIA, de l'ordre de 25 %. Ces nouvelles configurations n'apportent ainsi finalement pas de gain sur le rendement global.

6.4 Conclusion

Ce chapitre s'intéresse à l'amélioration de la forme du brûleur centimétrique afin d'en améliorer les performances. Dans cet objectif, une stratégie de réduction du coût de calcul a été mise en place. L'idée est d'utiliser des maillages plus grossiers que dans les chapitres précédents, couplés au modèle d'épaississement de flamme TFLES. Dans le cadre de la chimie complexe, cette stratégie a nécessité une attention particulière pour son utilisation dans YALES2 ainsi que le développement d'un capteur de flamme adapté. Cette méthode de réduction du coût de calcul a été testée sur des flammes laminaires 1D et un cas test d'interaction flamme-tourbillons 2D. Ce dernier a montré une réponse correcte du modèle, mais seulement pour des résolutions et épaissements modestes. En effet, pour des facteurs d'épaississement supérieurs à quatre, la dynamique de l'interaction est trop éloignée de celle du calcul de référence. La fonction d'efficacité ne semble plus capable de rendre compte de l'effet du plissement de la flamme.

La stratégie a ensuite été testée sur la configuration 3D MESO-CORIA, avec des résolutions deux et quatre fois plus grossières que celle utilisée dans le chapitre 5. Les résultats obtenus avec ces deux maillages sont très proches de la solution de référence. Cependant, le gain de calcul apporté par chaque niveau de déraffinement n'est pas le même. Le meilleur compromis précision des résultats / coût de calcul nous est apparu être le cas avec le maillage à $100 \mu\text{m}$.

Afin d'optimiser les performances du brûleur centimétrique MESO-CORIA, quatre configurations cylindriques avec différentes caractéristiques géométriques ont été choisies. Ces géométries ont été simulées en adoptant la stratégie de réduction de coût de calcul et des maillages dont la taille de maille typique est de $100 \mu\text{m}$. La topologie whirlée de l'écoulement est obtenue, sans zones de recirculation. Après une phase d'allumage délicate, deux configurations sur les quatre ont vu la flamme s'éteindre. La faible activité turbulente liée au changement de géométrie affecte le mélange entre réactifs et diminue la surface de flamme. Cet effet mène à l'extinction de la flamme ou à une combustion instable dans le domaine. Seule la configuration où l'injection d'air se fait à l'intérieur du tube d'entrée d'air conduit à une flamme stable et un meilleur rendement global. Néanmoins, aucune des configurations testées ne présente des performances plus élevées que la géométrie cubique MESO-CORIA. Ce résultat est a priori inattendu au vu de la bibliographie sur les chambres de combustion mésoscopiques cylindriques. Néanmoins, il a été remarqué que le méthane s'avère le carburant le plus difficile à mettre en œuvre par rapport à l'hydrogène ou au propane. Certaines études ont montré la nécessité d'enrichir en oxygène l'air jusqu'à 40 % en volume afin de stabiliser la flamme [231].

Pour améliorer ce concept de chambre de combustion whirlé, l'augmentation de la turbulence dans le jet d'air semble importante à la fois pour le mélange et pour la surface de flamme. Cette idée peut être mise en place facilement en modifiant la géométrie du tube d'entrée d'air. Le manque de système d'accroche-flamme paraît aussi un point important de conception de ces systèmes. Les recirculations de coins dans la géométrie cubique pouvaient d'ailleurs jouer sensiblement ce rôle.

L'amélioration du mélange entre réactifs peut aussi passer par un changement du système d'injection dans la chambre. Des systèmes de micro-mélange passifs de type chaotique [119] ou de type blocs 3D alternant tourbillons et re-laminarisation de l'écoulement [30] semblent de parfaits candidats dans cet objectif.

Des formes de chambre de combustion plus originales peuvent aussi être imaginées, tout en conservant la caractéristique whirlée de l'écoulement. Un exemple pourrait consister en l'utilisation de multi-perforations le long de la surface circulaire permettrait d'injecter de l'air froid le long des parois. Présente dans les moteurs aéronautiques, cette technique crée un film de protection thermique entre la paroi et le

reste du domaine.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

7.1 Conclusions

L'étude effectuée lors de cette thèse a permis d'analyser l'écoulement réactif dans un brûleur centimétrique cubique grâce à des simulations numériques LES et DNS, et d'en étudier les performances. Des pistes d'amélioration ont été proposées et l'enrichissement en hydrogène ainsi que le changement de forme ont été testés. L'ensemble de cette étude a exigé l'ajout de nouvelles fonctionnalités dans le code de calcul YALES2. L'implémentation, la validation sur cas tests et la diminution du temps de calcul ont ainsi été nécessaires. Parmi ces développements, les plus importantes contributions concernent la répartition de charge de calcul des termes sources de la chimie complexe, le modèle d'épaississement de flamme et l'adaptation automatique et parallèle de maillage. Cette thèse s'est ainsi déroulée en plusieurs parties.

Dans un premier temps, nous avons étudié l'écoulement non-réactif dans le brûleur cubique par simulation DNS. La topologie tourbillonnaire whirlee de l'écoulement est correctement retrouvée avec une zone de recirculation centrale. Les premières analyses du mélange entre les fluides entrant par chaque entrée et de la distribution en temps de séjour ont montré des conditions non optimales pour la configuration réactive. Des chemins préférentiels de l'écoulement favorisent des inhomogénéités de mélange tandis que des recirculations de coins peuvent mener à des temps de séjour très longs pour certaines particules fluides.

Dans la perspective de la simulation de l'écoulement réactif, des études de sensibilité au maillage et au modèle de sous-maille pour la turbulence ont été réalisés. Un premier pas vers l'amélioration du compromis précision des résultats / coût de calcul a été effectué.

Dans ce même objectif, une stratégie innovante d'adaptation de maillage automatique et parallèle a été développée à l'aide de la librairie MMG3D [51], implantée de façon modulaire dans YALES2. Basée sur des critères physiques et numériques, cette méthode permet le remaillage d'une grille composée de tétraèdres en modifiant la densité locale de nœuds. Grâce à une répartition dynamique des éléments, le caractère parallèle de cette stratégie permet le traitement rapide de maillages de plusieurs millions d'éléments. Appliquée à un maillage grossier du brûleur centimétrique cubique, cette méthode a montré des résultats très prometteurs. Même si la thématique de l'adaptation de maillage n'est pas récente [9, 62, 84], le couplage direct avec le solveur fluide et la parallélisation automatique de la méthode constituent des avancées majeures.

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés à l'étude de l'écoulement réactif dans le brûleur centimétrique cubique. Une modélisation de la chimie via une cinétique complexe a été adoptée, avec un maillage suffisamment fin pour capter correctement la dynamique de la flamme sans l'utilisation de modèle de combustion. L'implémentation des effets thermodiffusifs Soret et Dufour a montré la faible influence de ces phénomènes dans l'interaction flamme-paroi à nos conditions de fonctionnement. Pour les besoins des calculs 3D, une stratégie de répartition de charge de calcul des termes sources de la chimie entre processeurs s'est avérée nécessaire et a été optimisée afin d'être efficace sur plusieurs milliers de processeurs.

Les simulations réactives LES, avec modèle de sous-maille uniquement pour la turbulence, ont permis l'étude de la flamme dans le brûleur cubique. L'écoulement whirlé s'avère efficace car il permet la stabilisation de la flamme en concentrant les gaz brûlés chauds au centre et les gaz frais froids proches des parois. Le régime de combustion est majoritairement prémélangé et s'effectue à une richesse inférieure à la richesse globale. Néanmoins, dans le cas d'une combustion méthane-air les performances du brûleur ne sont pas satisfaisantes. Le mélange imparfait des réactifs ainsi que les trop grandes pertes thermiques pariétales ne permettent pas d'obtenir une combustion complète. Une partie non négligeable du carburant injecté sort directement du domaine sans avoir rencontré la flamme. Cet effet mène à un rendement global du brûleur de l'ordre de 26 %.

Pour améliorer ces performances, l'augmentation de la réactivité du brûleur grâce à l'enrichissement en hydrogène du mélange de carburant a été étudiée. Deux taux d'enrichissement à puissance chimique similaire ont été testés, donnant deux réponses différentes. Pour un mélange de carburant composé de 50% d'hydrogène et 50% de méthane en volume, la puissance émise par la flamme augmente et la combustion devient plus complète. Les émissions polluantes sont réduites, le rendement global de la chambre de combustion se trouve amélioré. Avec un mélange de carburant de 90% d'hydrogène et 10% de méthane, la topologie de la flamme se trouve modifiée. La très forte réactivité de la flamme fait qu'elle se stabilise autour du jet d'air et brûle sur une plage de richesse très large. Le domaine est alors entièrement rempli de gaz brûlés chauds. Les gaz frais ne pouvant créer une protection thermique entre la flamme et la paroi, les pertes thermiques sont amplifiées. Le rendement global, de même que les émissions polluantes, sont encore moins satisfaisants que dans le cas avec méthane pur. Cette analyse sur l'enrichissement en hydrogène est en accord avec les résultats expérimentaux obtenus sur ce même brûleur.

Ce dernier point constitue une innovation de ces travaux. En effet, l'utilisation d'une chimie réduite comme celle du schéma cinétique Coffee (une dizaine d'espèces, quelques dizaines de réactions), s'avère suffisante pour modéliser et capturer les phénomènes étudiés. Un tel niveau de complexité, à la fois physique et numérique, n'avait pas encore été atteint sur des configurations complexes de cette taille.

L'amélioration des performances a aussi été étudiée grâce au changement de la forme de la chambre de combustion. Pour multiplier le nombre de configurations calculées et diminuer le temps de retour, l'utilisation de maillages plus grossiers que précédemment, couplés au modèle d'épaississement de flamme TFLES, a été mise en place et validée sur la chambre de combustion cubique. Quatre géométries cylindriques ont été testées, en conservant le même point de fonctionnement avec méthane pur que la configuration cubique. La forme cylindrique peut a priori favoriser l'écoulement whirlé en évitant les chemins préférentiels et les recirculations de coin. Cependant, les calculs LES réalisés ont montré la grande influence sur l'écoulement réactif des quelques éléments géométriques qui diffèrent entre ces

quatre géométries. Dans la moitié des configurations, la flamme est trop instable et s'est éteinte. Sur les deux géométries restantes, une première présente une flamme très instable, tandis que l'autre montre une flamme stable mais dont le rendement global est sensiblement inférieur à celui de la géométrie cubique. Néanmoins, des enseignements ont été tirés sur la forme de chambre de combustion centimétrique à utiliser :

- l'injection d'air semble devoir se faire de façon parfaitement tangente au cylindre, afin d'éviter un chemin préférentiel du carburant de son entrée directement vers la sortie en longeant la paroi,
- le rapprochement des entrées d'air et carburant en amont de la chambre favorise le mélange entre réactifs. Néanmoins, cette solution peut poser des problèmes en terme de sécurité avec le possible phénomène de *flashback*.
- l'injection turbulente de l'air dans la chambre doit être favorisée afin de maximiser le mélange et augmenter la surface de flamme.
- l'accrochage de la flamme dans le domaine doit être suffisant pour ne pas s'éteindre du fait de trop fortes fluctuations en richesse ou en température.

Dans ces travaux, seule une adaptation de forme de type paramétrique a été réalisée : changement de la forme générale, des positions des entrées... Au vu du coût de calcul de chaque configuration, ce type d'optimisation semble a priori le seul envisageable aujourd'hui pour de tels écoulements réactifs. L'optimisation de forme de type géométrique ou de type topologique reposent sur des algorithmes dont le nombre de simulations à réaliser est plus important.

7.2 Perspectives

L'état actuel de l'étude permet de dresser de nombreuses perspectives parmi deux thématiques principales traitées au cours de cette thèse : l'amélioration des performances de brûleurs centimétriques et l'adaptation de maillage.

7.2.1 Amélioration des performances de brûleurs centimétriques

Il a été vu que la forme de la chambre de combustion a une grande influence sur la topologie de l'écoulement. Une modification légère des conditions d'injection peut avoir un impact important sur la stabilité de la flamme. Favoriser la turbulence à l'injection de l'air dans la chambre paraît une piste importante. Augmenter la vitesse d'injection permettrait d'augmenter la turbulence, amplifier le mélange entre réactifs et augmenter la surface de flamme. Cette augmentation doit se faire dans la limite d'un temps de séjour suffisant pour que la combustion soit complète. Cette problématique de la combustion à petite échelle constitue un défi très important. L'augmentation de la turbulence peut se faire également par l'utilisation d'obstacles dans les tubes d'injection comme le cas du coude dans le tube d'injection d'air de la géométrie cubique étudiée. L'ajout de mécanismes d'accroche-flamme constituent une autre piste à explorer. La géométrie pourrait être modifiée localement afin de favoriser une recirculation de l'écoulement et favoriser l'accrochage de la flamme.

Des formes de chambre de combustion plus originales pourraient être aussi envisagées. Par exemple, l'utilisation de multiperforations créant un film d'air froid le long de la paroi permettrait de limiter fortement les transferts de chaleur. Cette perspective est aujourd'hui permise grâce au développement de méthodes de fabrication additives de plus en plus performantes.

L'amélioration des performances de brûleurs centimétriques peut aussi passer par l'exploitation de points de fonctionnement différents comme une richesse globale pauvre par exemple. L'utilisation d'autres carburants peut aussi être envisagée. Dans la littérature, le propane a montré dans certains cas de meilleurs résultats que le méthane [231, 48].

Un dernier aspect porte sur l'isolation thermique des parois. Une température plus élevée des murs diminuerait le gradient thermique à l'intérieur de la chambre et permettrait de diminuer les pertes de chaleur. Cependant, deux problèmes se posent : le matériau solide doit être capable de supporter de plus fortes températures et la température des gaz de sortie augmente, ce qui n'est pas favorable dans certains cas. Un compromis doit être trouvé dans la gestion thermique de la chambre de combustion.

Afin d'accélérer la phase de conception de chambres de combustion centimétriques plus performantes, des outils moins chers en ressources de calcul que la LES peuvent être imaginés, ce qui multiplierait les possibilités de test. On peut penser notamment aux modèles 0D. En effet, un calcul 0D consiste en la modélisation d'un réacteur à partir d'un jeu de données simplifié (volume, surface, débits entrant...). Les performances globales sont alors obtenues en sortie du modèle. Au cours de cette thèse, des tests ont été réalisés avec un modèle de type réacteur parfaitement homogène instationnaire (ou CSTR pour *Continuously-Stirred Tank Reactor*) avec prise en compte des pertes thermiques. Les résultats obtenus n'ont pas permis de retrouver les caractéristiques trouvées expérimentalement sur le brûleur MESO-CORIA en termes de puissances et rendements, alors que ces informations sont fondamentales pour la conception. L'hypothèse de mélange homogène dans le brûleur constitue une approximation trop forte, notamment au vu des résultats LES. L'utilisation de modèles plus complexes, de type PaSR (*Partially Stirred Reactor Model*) donc prenant en compte le mélange dans le réacteur, constitueraient sans doute de meilleurs candidats pour retrouver les bonnes caractéristiques globales.

7.2.2 Adaptation de maillage

L'augmentation des capacités de calcul et l'amélioration des algorithmes de résolution fait de l'adaptation de maillage en parallèle une thématique innovante qui peut prendre de l'importance dans les années à venir. La stratégie proposée dans ce manuscrit est un premier pas vers l'adaptation de maillage en cours de calcul. Cet aboutissement ne peut être atteint qu'à certaines conditions :

- l'adaptation des surfaces est indispensable afin de pouvoir modifier le maillage de paroi ou pour des calculs en deux dimensions. Dans ce cas, la gestion des périodicités devient un problème numérique important.
- l'interpolation des données d'une grille initiale vers une grille adaptée doit aussi être améliorée afin d'éviter des problèmes numériques (application du théorème de Nyquist-Shannon notamment). Actuellement l'interpolation linéaire est utilisée. A l'avenir, des méthodes d'interpolation d'ordre élevé sont envisagées.
- l'adaptation en cours de calcul ne saurait être rentable que si le temps de production d'un maillage adapté est inférieur au temps de calcul sur un maillage plus fin. Des efforts sont encore à fournir pour répondre à cet objectif de performance.

Une perspective attendue demeure l'adaptation de maillage dans le cas d'écoulements réactifs. En effet, le front de flamme nécessite souvent une résolution de maillage plus fine que le reste de l'écoulement. Afin de minimiser le nombre d'éléments du maillage, il faudrait que cette résolution suive dynamiquement le front de flamme au cours du temps. Cette fonctionnalité a commencé à être traitée avec YALES2. La Fig. 7.1 montre un cas test de noyau de gaz frais entouré de gaz brûlés : la flamme, présente à l'inter-

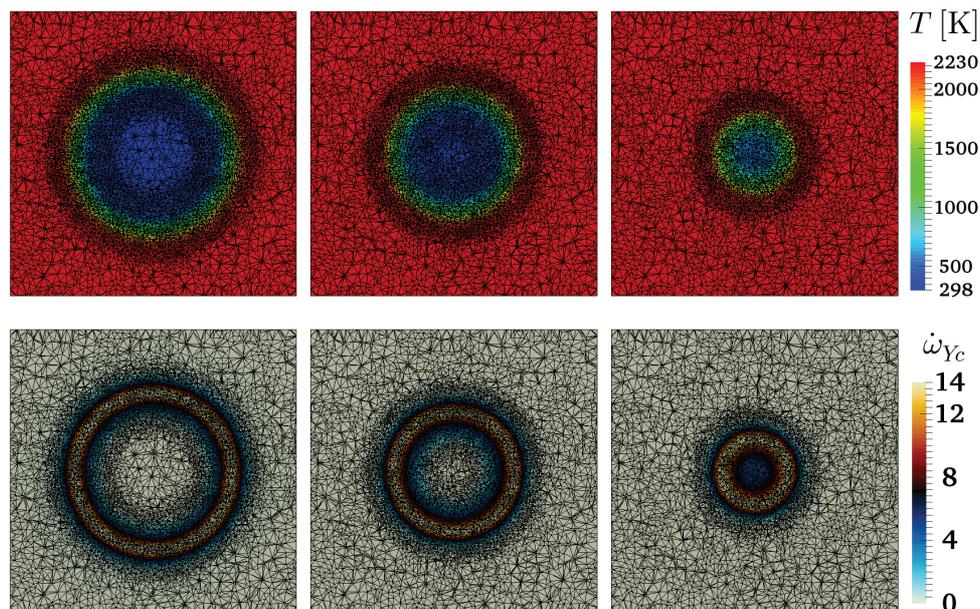


FIGURE 7.1: Noyau de gaz frais entouré de gaz brûlés : champs de température T et terme source chimique $\dot{\omega}_{Y_c}$ superposés au maillage, à différents instants. Calcul réalisé sur 10 processeurs avec adaptation dynamique de maillage et répartition automatique des éléments.

face de ces deux zones, consomme progressivement l'intégralité des réactifs. Le maillage suit l'évolution du front de flamme au cours du temps grâce aux remaillages successifs effectués toutes les 25 itérations.

Beaucoup de travail reste à effectuer pour rendre l'adaptation de maillage totalement automatique dans des géométries complexes. Le développement de ces méthodes est toujours en cours dans le cas de simulations avec chimie complexe.

Une autre problématique constatée au cours de cette thèse réside dans la diminution de la taille de plus petite taille de maille, et par conséquent du pas de temps du calcul. Cela engendre un temps de retour plus élevé des simulations. Le développement de nouvelles méthodes d'intégration temporelle implicites permettrait de s'affranchir de cette difficulté.

D'autre part, il serait intéressant de savoir si le processus d'adaptation présenté dans cette thèse converge toujours vers le même maillage final. Autrement dit, est-ce que le maillage adapté dépend du maillage initial ? Si cette affirmation est vérifiée, la simulation pourrait ainsi devenir indépendante de l'utilisateur.

Annexe A

Algorithme de répartition de charge

A.1 Principe

Dans les calculs parallèles, la synchronisation entre processeurs est importante pour obtenir les meilleures performances possibles. Dans YALES2, l'équilibrage de charge est normalement effectué par la double décomposition de domaine. Cependant, pour certaines tâches, cette double décomposition ne convient pas. C'est notamment le cas de l'intégration des termes sources de la chimie. Pour remédier à cela, un algorithme a été développé dans YALES2 pour mieux répartir cette charge de travail. La stratégie présentée ici est adaptée aux problèmes de calculs CPU intensifs avec peu d'entrées/sorties. On peut trouver cette méthode sous le nom de *Scheduler dynamique*.

L'objectif de l'algorithme de répartition de charge est de distribuer à chaque processeur une quantité de travail globale. Cette méthode permet de mieux synchroniser les processeurs entre eux. Les gains observés peuvent être importants malgré le surcoût de communications MPI supplémentaires.

La méthode de répartition, appliquée à l'intégration de la chimie, peut être résumée de cette façon :

- chaque processeur ne calcule pas les termes sources de ses propres nœuds du maillage, mais se met au service d'un processeur maître,
- ce maître distribue les nœuds qu'il possède aux autres processeurs afin de calculer les termes sources,
- le rôle de "processeur maître" tourne entre tous les processeurs afin que chacun le soit une seule fois.

Il est important de noter que plusieurs maîtres peuvent exister simultanément : l'algorithme ne force pas à l'existence unique de ce rôle.

A.2 Détails de l'algorithme

L'algorithme de répartition de charge implanté dans le code YALES2 est détaillé sur la Fig. A.1. Un processeur peut avoir deux rôles : maître ou esclave. Un processeur a le rôle de maître pendant que les autres sont esclaves, sauf si un précédent maître n'a pas terminé son travail. Le rôle de maître change de façon à ce que chaque processeur le soit une fois pendant une itération.

Si le processeur est esclave, il doit :

1. dire au maître qu'il est prêt à effectuer du travail ;
2. écouter ce que le maître lui dit, ce qui se réduit à trois possibilités :

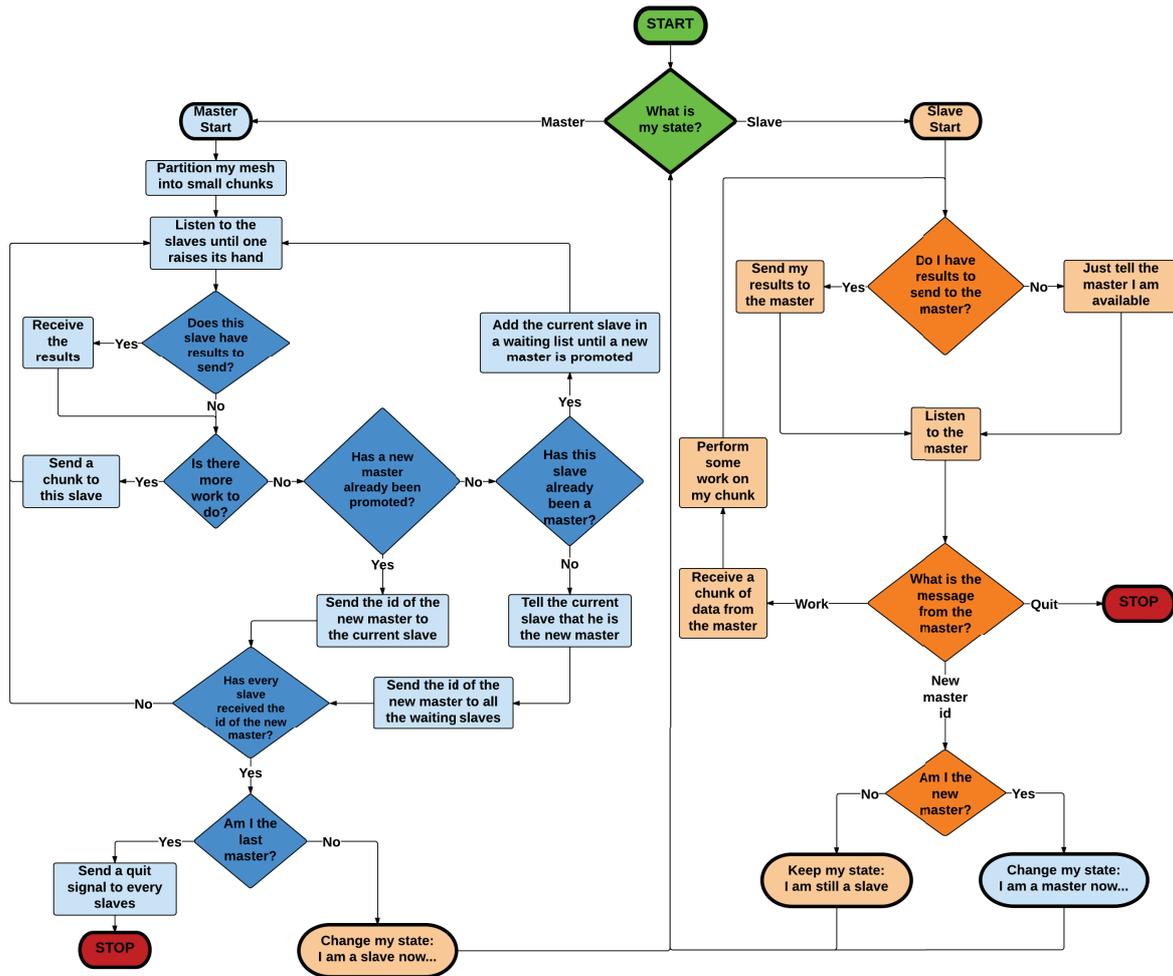


FIGURE A.1: Algorithme complet du scheduler dynamique.

- a) le maître lui envoie du travail. L'esclave l'exécute puis renvoie les résultats obtenus au maître. Il repart à l'étape 1 ;
- b) le maître lui envoie le signal de tout arrêter ;
- c) le maître lui envoie l'identité du nouveau maître ;
 - i. si l'esclave est le nouveau maître, il change son état ;
 - ii. sinon, il retourne à l'étape 1.

Si le processeur est maître, il doit :

1. découper le maillage en sous-domaines définis par le paramètre de granularité ;
2. attendre qu'un processeur esclave lui envoie un signal ;
3. récupérer le travail effectué par l'esclave si celui-ci a déjà travaillé pour le maître ;
- 4i. s'il a toujours du travail, envoyer un sous domaine à l'esclave pour qu'il le traite et retourner ensuite à l'étape 2 ;
- 4ii. s'il n'a plus de travail, trois situations s'offrent à lui :
 - a) aucun processeur n'a été déclaré en tant que nouveau maître. Il doit alors regarder si l'esclave a déjà été maître durant l'itération. Si tel est le cas, l'esclave est placé dans une liste d'attente jusqu'à ce qu'un nouveau maître soit défini. Le maître se rend ensuite à l'étape 2 ;
 - b) si aucun processeur n'a été déclaré comme nouveau maître et dans le cas où le processeur esclave n'ait pas encore été maître, il doit dire au processeur esclave qu'il a été promu au rang de maître et informer tous les processeurs en attente qu'un nouveau maître a été désigné ;
 - c) si un nouveau maître a été désigné, il doit envoyer à l'esclave demandant du travail l'identité du nouveau maître.
- 5i. si tous les esclaves ne connaissent pas l'identité du nouveau maître, le retour à l'étape 2 est nécessaire ;
- 5ii. si tous les esclaves connaissent l'identité du nouveau maître, alors :
 - a) si le maître n'est pas le dernier maître, le processeur passe à l'état d'esclave ;
 - b) si le maître est le dernier maître, il envoie un signal à tous les esclaves puis se quitte lui-même.

Pour maximiser les performances, il est capital que plusieurs processeurs puissent avoir le rôle de maître simultanément. Cela permet aux communications MPI de se chevaucher et d'éviter que tous les processeurs soient en attente qu'une petite partie d'entre eux finissent leur travail.

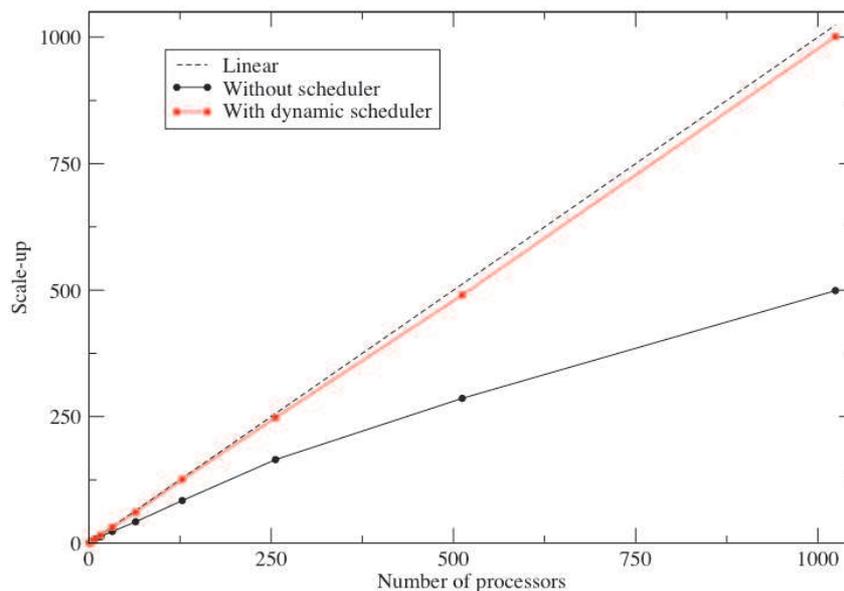
Le message envoyé du maître vers l'esclave regroupe l'information de plusieurs nœuds regroupés en un groupe de nœuds. L'information d'un nœud est constitué du système 3.140. Le nombre de nœuds constituant ce groupe, appelé *chunk*, représente la granularité. A la fin du calcul de l'esclave, ce dernier renvoie ces systèmes avancés en temps vers le maître. Le *chunk* est donc un paramètre important du scheduler. Il doit être choisi en fonction de la taille du schéma cinétique et de la latence du réseau du calculateur, afin de trouver le meilleur compromis entre le rapport opérations de calcul/nombre de communications et la bonne répartition de charge (voir Tab. A.1).

A.3 Performances avant optimisation

Le scheduler a d'abord été testé sur le cas test de la flamme Bunsen (voir section 5.1.4) sur le calculateur Turing (IDRIS) avec un nombre de processeurs variant de 1 à 1024. La courbe de *scale-up*,

<i>chunk</i>	Ratio opérations/communications	Répartition de charge
--	Mauvais ☹️	Bonne 😊
++	Bon 😊	Mauvaise ☹️

TABLE A.1: Compromis à faire sur la taille du chunk.

FIGURE A.2: *Scale-up* du cas brûleur Bunsen 2D obtenu sur la machine Turing (IDRIS).

représentant l'accélération obtenue en utilisant plus de processeurs, est présentée Fig. A.2. Sans scheduler dynamique, les performances de calcul se dégradent : l'augmentation du nombre de processeurs permet d'obtenir le résultat plus rapidement mais l'évolution n'est pas linéaire. Au contraire, l'utilisation du scheduler apporte un gain important, la courbe de *scale-up* est presque idéale : multiplier le nombre de processeurs par deux permet d'obtenir le résultat deux fois plus rapidement.

Sur le cas du brûleur centimétrique 3D, la courbe d'accélération obtenue avec le calculateur Curie (CCRT) pour un nombre de cœurs s'étalant de 512 à 8192 est présentée Fig. A.3. Avec 512 processeurs, on constate l'apport du *scheduler* avec un gain de 50 % sur le temps de calcul. Avec 1024 cœurs les performances sont similaires avec et sans *scheduler*. Pour des nombres de processeurs plus importants, les performances sans scheduler sont dégradées, bien en dessous de la courbe idéale. Avec scheduler, le *scaling* est encore plus mauvais. La courbe est même décroissante à partir de 4096 processeurs. Pour les calculs avec plus de 1024 processeurs, le coût des communications est supérieur au coût de calcul de l'intégration des termes sources : l'activation du scheduler devient alors plus coûteux que le calcul des termes sources lui-même.

A.4 Optimisation

A.4.1 Ajout de communicateurs internes

Le problème de performances vient du fait que dans le *scheduler*, chaque processeur communique avec tous les autres processeurs. Sur un nombre important de cœurs, cela engendre de grandes possibilités

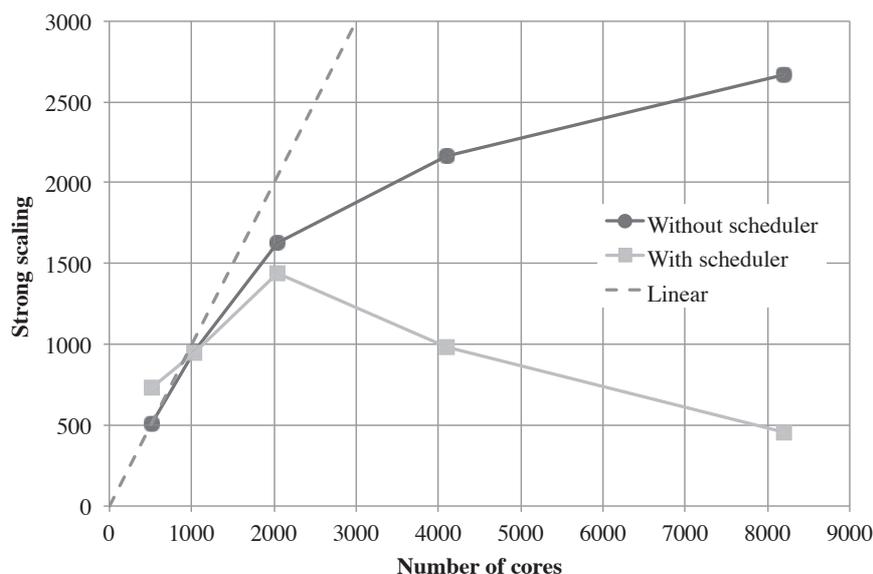


FIGURE A.3: Comparaison du *strong scaling* avec et sans scheduler sur la configuration du brûleur centimétrique 3D, obtenu sur la machine Curie (CCRT) avant optimisation. La référence est choisie comme le calcul sans scheduler et 512 processeurs.

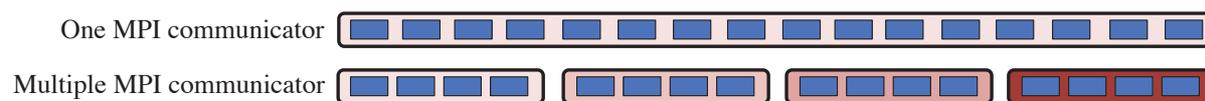


FIGURE A.4: Schéma de la double décomposition des processeurs. Haut : tous les processeurs sont réunis dans un seul communicateur. Bas : les processeurs sont séparés entre plusieurs communicateurs.

de communications point à point que le réseau ne peut assurer correctement : le processeur maître a trop de communications à assurer avec ses esclaves. Une optimisation du scheduler a donc été apportée lorsqu’il est utilisé sur de grands nombres de processeurs.

L’objectif de l’optimisation est d’améliorer les performances du *scheduler* en limitant le nombre de communications d’un processeur vers d’autres. L’idée est alors de créer des communicateurs internes, c’est-à-dire constituer des groupes de processeurs. Chaque processeur communiquerait alors seulement avec les autres processeurs de son sous-communicateur et non plus avec tous les autres du calcul. La Fig. A.4 illustre ce propos. Avec un seul communicateur (zone rouge clair) réunissant seize processeurs, chaque cœur (carré bleu) communique avec les quinze autres. Avec quatre communicateurs composés de quatre cœurs (zones rouge clair à rouge foncé), chaque cœur communique uniquement avec trois processeurs.

Cette stratégie d’optimisation ne fonctionne qu’à condition que les communicateurs soient équilibrés en charge de calcul. Les groupes de processeurs sont alors constitués en se basant sur la charge CPU mesurée à l’itération précédente. A partir de cette mesure, un algorithme de tri répartit les cœurs en groupes de charges égales.

La taille des communicateurs est un paramètre clé pour la bonne performance du scheduler avec communicateurs internes. Des communicateurs constitués d’un faible nombre de processeurs ne permet

Nb. proc. dans comm. interne	Nb. groupes de procs.	Répartition de charge	Travail du maître
--	++	Mauvaise ☹️	Faible 😊
++	--	Bonne 😊	Elevé ☹️

TABLE A.2: Compromis à faire sur la taille des communicateurs internes.

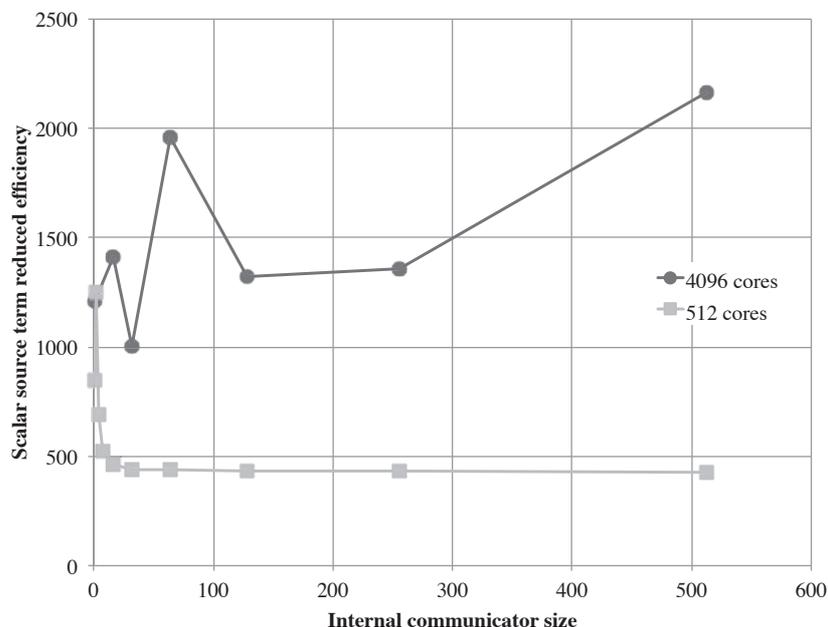


FIGURE A.5: Efficacité réduite du calcul des termes sources en fonction de la taille du communicateur interne pour des calculs à 512 et 4096 processeurs.

pas une bonne répartition de charge alors que des communicateurs avec un grand nombre de cœurs reviendrait à avoir le problème précédent (voir Tab. A.2). Il convient donc de trouver un compromis entre ces deux extrêmes.

De nombreux tests ont été effectués avec différents nombres de processeurs (Fig. A.5). Ils ont montré que des communicateurs composés de 32 processeurs semble être le meilleur compromis entre bonne répartition de charge et économie de travail pour le maître. Cette valeur est donc utilisée par défaut dans le code YALES2.

A.4.2 Initialisation des communications point-à-point

La Fig. A.5 montre cependant de grandes différences de performances d'une taille de sous-communicateur à une autre. Cet écart est lié au temps d'établissement des communications MPI entre un cœur et tous les autres cœurs du communicateur : à la première connexion entre deux processeurs, un ensemble d'instructions MPI sont exécutées. En fonction de la qualité du réseau de connexion entre les nœuds d'un calculateur, ce temps est plus ou moins long. Pour éviter que ce temps impacte les performances du *scheduler*, un pré-câblage est réalisé avant le calcul de la chimie. Ce pré-câblage consiste en l'échange d'un entier quelconque entre chaque paire de cœur d'un sous-communicateur. Comme cette phase est effectuée en amont par tous les processeurs en même temps, l'équilibrage de charge peut se faire de façon optimisée.

Table des figures

1.1	Photo de l'ENIAC, premier ordinateur électronique complet en 1946 (source : Wikimedia) (a) et le Kinetis KL03 de Freescale, le microcontrôleur ARM le plus petit du monde (2014), posé sur une balle de golf (source : www.silicon.fr) (b). Le microcontrôleur est 50 000 fois plus petit mais 400 000 fois plus performant que l'ENIAC.	14
1.2	Energie par unité de masse pour différentes sources d'énergie, tiré de [70].	15
1.3	Diagramme de Ragone : comparaison des performances des techniques de stockage d'énergie, tiré de [43].	15
2.1	Echelle de tailles caractéristiques des chambres de combustion, exemples de brûleurs et d'applications.	21
2.2	Limites de stabilité d'un brûleur cylindrique de type asymétrique pour deux carburants, méthane et propane, en fonction du débit total d'entrée, tiré de [46].	25
2.3	Schéma de l'utilisation de l'énergie thermique libérée par la combustion à petite échelle, tiré de [115]	26
2.4	(a) : Schéma de la micro-turbine de l'ONERA [91]. (b) : schéma de la micro-turbine du MIT de 12 mm de diamètre et 3 mm de long [64]. (c) : mini moteur Wankel [70]. (d) : micro-propulseur digital de TRW. (e) : micro-propulseur haute pression du MIT [151].	27
2.5	Distribution de température d'un brûleur swirlé (a) et d'un brûleur avec recirculation (b), tiré de [111].	28
2.6	(a) : Schéma et champs de température d'un brûleur droit de 0.5 cm étudié dans [169]. (b) : Profils des flux thermiques en fonction de la direction axiale de ce même brûleur. Figures reprises de [115].	29
2.7	(a) : Schéma illustrant le principe d'un système à flux inversés, tiré de [114]. (b) : coefficient thermique critique en fonction de la conductivité thermique pariétale, figure tirée de [115].	29
2.8	(a) : Différentes géométries possibles de brûleurs à enthalpie excédentaire. (b) : Profils des flux thermiques en fonction de la direction axiale de ce même brûleur. Figures tirées de [115].	30
2.9	(a) : schéma d'un <i>swiss-roll</i> carré vu de dessus, tiré de [115]. (b) et (c) : schéma vu de côté et photo du brûleur <i>swiss-roll</i> cylindrique de Tohoku de 64 mm de diamètre. (d) : photo du <i>swiss-roll</i> de l'University of South California, tirés de [111].	31
2.10	Schéma des différents phénomènes physiques dans un brûleur catalytique, tiré de [115].	32

2.11 (a) : Limites de stabilité de la combustion catalytique et en phase gazeuse en fonction du nombre de Reynolds pour un brûleur de type <i>swiss-roll</i> en Inconel, tiré de [2]. (b) : champs de température (gauche) et concentration de OH (droite) pour trois différents modes : réactions de surface et en phase gazeuse (haut), réactions en phase gazeuse seulement (milieu) et réaction de surface uniquement (bas) [35].	33
2.12 (a) : Interaction entre combustion catalytique et en phase gazeuse en fonction de la taille du canal et de la vitesse d'injection [35]. (b) : Ratio des réactions de surface en phase gazeuse en fonction de la dimension du système pour différentes températures de fonctionnement [115]. (c) : coefficient de transfert thermique critique en fonction du diamètre du canal pour la combustion en phase gazeuse, catalytique ou les deux combinés (HH) [115].	34
2.13 (a) : schéma des principales structures tourbillonnaires identifiées à la sortie d'injection TLC et flamme en V (en rouge), tiré de la thèse de Guedot [89]. (b) : flamme en V dans le brûleur PRECCINSTA matérialisée par la variable d'avancement dans le plan médian, issu de [160].	35
2.14 (a) : schéma du domaine calculé et de l'injection du microbrûleur swirlé. Iso-contour de critère Q et rendu volumique du taux de dégagement de chaleur pour un nombre de swirl de 0.6 (b) et 1.2 (c). Figures tirées de [210].	36
2.15 (a) : iso-contour de la variable de progrès $c=0,2$ colorisée par le dégagement de chaleur [222]. Champs de température et fraction massique de carburant instantané (b) et structure de la flamme de spray (c) [143].	36
2.16 (a) : schéma de l'écoulement d'air dans la chambre de combustion ; intersection avec l'injection de carburant. (b) : schéma d'une chambre de combustion cylindrique de type whirl. (c) : vue 3D du méso-brûleur de Wu <i>et al.</i> [231]	37
2.17 (a) : micro- et méso-brûleurs whirlés de différents volumes étudiés à Pennsylvania State University. (b) : trajectoires principales de l'écoulement d'air dans la combustion hydrogène/air à la stœchiométrie. (c) : vue de face de la structure de flamme issue de l'expérience du brûleur propane/air de 124 mm^3 et richesse 0.8 (image de gauche) et méthane/air enrichi en oxygène de 49.1 mm^3 à richesse 0.3 (image de droite). Images tirées de [231].	38
2.18 (a) : schéma de la géométrie et des positions des entrées du brûleur de Yetter [236]. (b) : trajectoires principales de l'écoulement d'air dans la combustion hydrogène/air à la stœchiométrie.	39
2.19 (a) : dispositif expérimental du brûleur whirlé de Milan [49]. (b) : image moyenne obtenue par chimiluminescence CH*, représentant la position moyenne de la flamme d'un mélange méthane/air à richesse 0.58 ; la flèche verticale indique l'injection d'air et celle horizontale la sortie ; la paroi est indiquée par le cercle noir [46]. (c) : diagramme de stabilité obtenue avec le modèle 0D pour un mélange méthane/air pour différents niveaux de pertes thermiques (lignes de couleur) et comparaison à l'expérience (points) [47].	39
2.20 Photo issue de l'expérience CORIA (a). Rendu 3D de la chambre de combustion (b).	40
2.21 Représentation 3D du volume fluide.	41
2.22 Impact de l'ajout d'hydrogène dans le mélange gazeux sur la position de la flamme (gauche et milieu) et instabilité thermo-acoustique (droite), tiré de [137].	42

2.23	(a) : Iso-contour du taux de réaction (rouge) et du critère-Q (gris). (b) : Visualisation du taux de réaction (couleur feu) et de la fraction de mélange Z (surimposition en échelle de gris, iso-contour de la stœchiométrie en blanc) sur une coupe dans un plan du domaine.	43
3.1	Taille de différents schémas cinétiques issus de la littérature en fonction du nombre d'espèces N et du nombre de réactions K pour différents carburants, tiré de [131].	56
3.2	Schéma de la structure d'une flamme de prémélange laminaire.	60
3.3	(a) : Diagramme schématique de la cascade énergétique à nombre de Reynolds élevé, tiré de [184]. (b) : Spectre d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ en fonction du nombre d'onde k (proportionnel à l'inverse de la longueur des tourbillons), tiré de [155].	61
3.4	Comparaison des méthodes DNS, LES et RANS : résolution temporelle d'une variable comme la température (a) et résolution du spectre d'énergie turbulente (b)	63
3.5	Comparaison de la température (T) et du taux de dégagement de chaleur (HR) entre une flamme laminaire 1D non-épaissie (en trait continu) et épaissie avec un facteur $\mathcal{F} = 4$ (ligne avec les points).	68
3.6	DNS de l'interaction flamme-turbulence : flamme non épaissie (gauche) et flamme épaissie d'un facteur $\mathcal{F} = 5$ (droite). La flamme artificiellement épaissie est clairement moins plissée par la turbulence du fait de la modification de l'interaction flamme-turbulence due au facteur d'épaississement. Figures tirées de [179].	69
3.7	Volume de contrôle basé sur un nœud du maillage dans YALES2 : x_p représente le nœud du maillage, \bar{x}_p représente le barycentre du volume de contrôle.	73
3.8	Champs de temps calcul CPU de la chimie sur une flamme de bec bunsen sans répartition de la charge de calcul, avec un schéma cinétique contenant 14 espèces et 38 réactions. Le coût de la chimie est beaucoup plus important dans la flamme qu'en dehors.	75
3.9	Représentation de la double décomposition de domaine sur un maillage composé de triangles.	76
3.10	Schéma de communication entre communicateurs et entre processeurs.	76
3.11	Comparaison d'une même iso-surface de critère Q non-filtré (gauche) et filtré à l'aide de filtres d'ordres élevés (droite), obtenue sur un maillage de 878 millions d'éléments. Figures tirées de [90].	77
4.1	Représentation 3D du volume fluide et plans $y - z$ et $x - y$ avec emplacements des entrées et sortie.	85
4.2	Visualisation des plans A ($y = 1$ mm), B ($y = 3.5$ mm), C ($y = 6$ mm) et D ($y = 8.5$ mm).	87
4.3	Champs de vitesse instantanée sur les plans A, B, C et D.	87
4.4	Champs de vitesse instantanée sur les plans A, B, C et D avec légende saturée à $15 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$	87
4.5	Champs de vitesse moyenne sur les plans A, B, C et D.	88
4.6	Lignes de courant 3D dans la chambre de combustion, coloriées par la vitesse moyenne.	88
4.7	Lignes de courant (en blanc) sur les plans A, B, C, D coloriés par la vitesse moyenne.	88
4.8	Champs de vitesse RMS sur les plans A, B, C et D.	89
4.9	Iso-contour du critère-Q à $Q = 8 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$, colorié par la vitesse instantanée.	90
4.10	Fonction densité de probabilité du rapport de la taille de maille Δx locale sur l'échelle de Kolmogorov η_K	91
4.11	Champs du scalaire Z instantané (haut), moyen (milieu) et RMS (bas, échelle logarithmique) sur les plans A, B, C et D (de gauche à droite).	92

4.12 (a) : Iso-contour $Z = 0.055$ dans le domaine 3D. (b) : Lignes de courant passant par l'injection $Z = 1$ coloriées par la vitesse moyenne. (c) : PDF de la fraction de mélange Z moyenne sur les plans A, B, C et D.	93
4.13 Champs du scalaire τ_{res} moyen sur les plans A, B, C et D (de gauche à droite), en secondes.	95
4.14 Visualisation de la vitesse (a) et du temps de séjour (b) des particules traceurs dans le domaine après 170 ms d'injection.	96
4.15 <i>Scatter plot</i> du temps de résidence des particules en fonction de la direction y pour chaque entrée d'injection : entrée "air" (a) et entrée "carburant" (b).	96
4.16 Distribution du temps de résidence des particules injectées par l'entrée d'air et l'entrée de carburant.	97
4.17 Champs de vitesse moyenne dans le plan A pour les maillages M1, M2 et MREF.	98
4.18 Champs de fraction de mélange obtenus avec les maillages M1, M2 et MREF. Noir : air. Blanc : carburant.	99
4.19 Rendu volumique du rapport de viscosité μ_t/μ sur les maillages M1, M2 et M3.	99
4.20 Fonction Densité de Probabilité de la distance à la paroi adimensionnée y^+	100
4.21 Champs de vitesse moyenne sur le maillage M1 avec le modèle de viscosité turbulente Smagorinsky Dynamique (a), WALE (b) et l'approche NO-MODEL (c).	101
4.22 Champs de vitesse moyenne sur le maillage M2 avec le modèle de viscosité turbulente Smagorinsky Dynamique (a), WALE (b) et l'approche NO-MODEL (c).	101
4.23 Profils de vitesse moyenne (haut) et RMS (bas) sur les maillages M1 (gauche) et M2 (droite) en fonction des modèles de turbulence et comparé à la référence MREF.	103
4.24 Schéma de la configuration jet plan turbulent.	107
4.25 DNS du jet plan turbulent : coupe centrale colorée par la norme de la vorticit�.	107
4.26 Plan central color� par Q_{c1} (gauche) et Q_{c2} (droite) afin d'�valuer la qualit� du maillage LES initial.	108
4.27 Coupe centrale color�e par Q_{c1} (gauche) et Q_{c2} (droite) avec le second maillage LES, adapt� depuis le maillage LES initial.	108
4.28 Comparaison des statistiques sur le jet plan turbulent : DNS (—), LES initiale ($\cdot\cdot\cdot$) et seconde LES (— —). Profils de vitesse moyenne sur trois coupes : � $x/h = 4, 8$ et 12 (a) et profils de vitesse RMS � $x/h = 4$ (b), 8 (c) et 12 (d).	109
4.29 Profils des crit�res Q_{c1} (a) et Q_{c2} (b) sur le maillage LES initial ($\cdot\cdot\cdot$) et pour le maillage LES adapt� (— —) sur le cas test d'�coulement turbulent dans une conduite.	110
4.30 Profils de vitesse moyenne (a) et RMS (b) sur le cas test d'�coulement turbulent dans une conduite : DNS (—), LES initiale ($\cdot\cdot\cdot$) et seconde LES (— —).	110
4.31 Crit�res Q_{c1} et Q_{c2} obtenus � partir des calculs sur maillage M1 de la configuration non-r�active MESO-CORIA.	111
4.32 Exemple d'adaptation en parall�le d'un maillage avec un seul appel � la librairie d'adaptation : maillage initial, m�trique impos�e et maillage final (de gauche � droite).	113
4.33 R�partition dynamique de charge avec la librairie ParMetis 4.	113
4.34 Algorithme d'adaptation parall�le avec couplage MMG3D-YALES2.	115
4.35 Exemple d'adaptation en parall�le d'un maillage en parall�le : �tapes d'adaptation de 1 � 3 (de gauche � droite).	115
4.36 Proc�dure de calcul de la m�trique bas�e sur Q_{c1} avec contr�le du nombre d'�l�ments.	117
4.37 Proc�dure globale d'adaptation de maillage � partir des crit�res Q_{c1} et Q_{c2}	119

4.38	Distribution de taille de maille des grilles M1, MREF, A1 et A2.	120
4.39	Comparaison des maillages M1 (a), A1 (b) et A2 (c) sur le plan d'injection.	120
4.40	Champs de vitesse moyenne (haut) et RMS (bas) sur les maillages A1 (gauche) et A2 (droite).	121
4.41	Visualisation des quatre lignes étudiées.	122
4.42	Profils de vitesse moyenne (gauche) et RMS (droite) suivant les lignes 1, 2, 3 et 4 (de haut en bas).	123
4.43	Champs de critères Q_{c_1} (haut) et Q_{c_2} (bas) sur le plan d'injection des maillages A1 (gauche) et A2 (droite).	124
5.1	Maximum de vitesse laminaire d'une flamme méthane/air à 298K mesurée expérimentalement, tiré de [131].	130
5.2	Comparaison de la vitesse de flamme (a) et épaisseur de flamme (b) en fonction de la richesse pour différents schémas cinétiques.	132
5.3	Comparaison de la vitesse de flamme (a) et épaisseur de flamme (b) en fonction de la température des gaz frais pour différents schémas cinétiques.	132
5.4	Comparaison de la température adiabatique de flamme en fonction de la richesse (a) et de la température des gaz frais (b) pour différents schémas cinétiques.	133
5.5	Comparaison de profils d'espèces majoritaires (gauche) et intermédiaires (droite), dans l'espace physique (haut) et dans l'espace des phases (bas) pour différentes résolutions de maillage.	134
5.6	Schéma du cas test 1D HOQ. Tiré de [226].	136
5.7	Profils spatiaux de température et taux de dégagement de chaleur pour différents instants, autour de l'extinction de la flamme, séparés de 200 μ s.	137
5.8	Evolution temporelle de la distance flamme-paroi x_{T1500} , du taux de dégagement de chaleur global et du flux de chaleur à la paroi.	138
5.9	Evolution temporelle entre 3 et 6 ms de la distance flamme-paroi x_{T1500} , du taux de dégagement de chaleur global et du flux de chaleur à la paroi (partie gauche) et zoom entre 4 et 4.5 ms, au moment de l'extinction (partie droite).	139
5.10	Schéma du cas test Bunsen.	140
5.11	(a) : champ de coût de calcul du terme sources d'espèces. (b) : profil du coût de calcul de la chimie le long de l'axe de symétrie.	141
5.12	Lignes de courant de l'écoulement dans le brûleur, coloriées par la température.	143
5.13	Iso-contour instantané 3D de critère-Q colorié par la vitesse (couleurs arc-en-ciel) et iso-contour de taux de dégagement de chaleur (en couleur feu).	144
5.14	Vue 3D des quatre plans étudiés dans la Fig. 5.15 : plans A à $y=1$ mm, B à $y=3.5$ mm, C à $y=6$ mm et D à $y=8.5$ mm.	144
5.15	Champs instantanés de vitesse, scalaire temps de résidence, richesse, température et terme source d'enthalpie sur les quatre plans le long de l'axe y , du plan d'injection au plan de sortie.	145
5.16	Rendu volumique 3D du taux de dégagement de chaleur local à différents pas de temps séparés de 0.86 ms (10 % du temps de passage moyen).	146
5.17	Fonction Densité de Probabilité de l'indice de flamme ξ conditionné à la zone réactive.	147

5.18	Fonction Densité de Probabilité de la richesse φ des zones réactives (ligne solide) et distribution du taux de dégagement de chaleur local conditionné par la richesse (ligne pointillée).	148
5.19	Diagramme de combustion turbulente en régime prémélangée.	149
5.20	Pertes thermiques pariétales moyenne en W/m^2 .	150
5.21	Evolution temporelle des fractions massiques de CO , CO_2 , H_2O et CH_4 intégrées sur la sortie.	151
5.22	Iso-contour instantané de fraction massique de monoxyde de carbone $Y_{CO} = 0.01$ colorié par la fraction massique de dioxyde de carbone.	152
5.23	Comparaison de profils d'espèces majoritaires dans l'espace physique (gauche) et dans l'espace des phase (droite) pour les taux d'enrichissement des cas C2 (haut) et C3 (bas).	154
5.24	Taux de dégagement de chaleur dans l'espace physique de flammes 1D des cas C1, C2 et C3, normalisés par la valeur du cas C1.	154
5.25	Rendu volumique instantané du taux de dégagement de chaleur local pour les trois cas C1 (a), C2 (b) et C3 (c).	155
5.26	Taux de dégagement de chaleur intégré le long de l'axe y normalisé par la valeur moyenne maximale de chaque cas C1, C2 et C3 (de gauche à droite) : moyenne temporelle (haut) et RMS (bas).	156
5.27	Evolution temporelle de la surface de flamme pour chaque cas étudié.	157
5.28	PDF de richesse sur la surface de flamme pour les trois cas.	158
5.29	PDF de l'indice de flamme pour les trois cas.	158
5.30	Probabilité jointe de fraction de mélange Z et de température T sur les trois cas. Ligne rouge : état d'équilibre. Ligne noire pointillée : ligne à iso- Z de maximum de température.	159
5.31	PDF de la courbure de flamme.	160
5.32	Rendement chimique pour chaque cas étudié en fonction de la fraction molaire d'hydrogène dans le mélange de carburant et comparé à l'expérience.	161
6.1	Procédure de construction du capteur de flamme proposé par Franzelli. Image tirée de [72].	168
6.2	Comparaison du capteur de flamme, ici appelé α , avec le profil de température et de termes sources d'espèces. Image tirée de [19].	169
6.3	(a) : Procédure de filtrage du capteur de flamme : filtrage puis prise du maximum entre profil initial et profil filtré. (b) : Capteur de flamme final obtenu.	170
6.4	Comparaison de profils de température (gauche) et d'espèces majoritaires (droite) dans l'espace physique dilaté (haut) et dans l'espace des phases (bas) pour différents épaissements constants.	171
6.5	Comparaison de profils de température (gauche) et d'espèces majoritaires (droite) dans l'espace physique dilaté (haut) et dans l'espace des phases (bas) pour différents épaissements locaux.	172
6.6	Schéma du cas test d'interaction flamme-tourbillons.	173
6.7	Champs de température, taux de dégagement de chaleur et vorticité en fonction du temps, obtenus avec le maillage A1.	174
6.8	Taux de dégagement de chaleur (ligne) et surface de flamme (points) en fonction du temps, normalisés par leur valeur à $t = 0$ ms.	176
6.9	Taux de dégagement de chaleur en fonction du temps pour les cas A0 et A1.	177

6.10	Comparaison du champs de température (haut) et du taux de dégagement de chaleur local (bas) à l'instant $t = 20$ ms, entre les différents cas de calcul.	178
6.11	Taux de dégagement de chaleur en fonction du temps pour les cas B2 à B4 (gauche) et C2 à C4 (droite), comparés au cas A1.	179
6.12	Comparaison des maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).	180
6.13	Comparaison des vitesses instantanée et moyenne sur les maillages M2, M1 et M0.	181
6.14	Iso-contours du critère-Q $Q = 1 \times 10^8 \text{ s}^{-2}$, coloriés par la vitesse instantanée, sur les maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).	182
6.15	Comparaison de la fraction de mélange instantanée et moyenne sur les maillages M2, M1 et M0.	183
6.16	Comparaison des maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).	184
6.17	Rendu volumique du taux de dégagement de chaleur local $\dot{\omega}_T$ sur les maillages M2 (gauche), M1 (milieu) et M0 (droite).	184
6.18	Champs de dégagement de chaleur local $\dot{\omega}_T$ sur les plans A-D et maillages M2-M0.	185
6.19	Evolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global pour chaque maillage.	186
6.20	Visualisation 3D des nouvelles configurations cylindriques étudiées.	190
6.21	Visualisation des lignes de courant dans les configurations cylindriques.	192
6.22	Champs de vitesse moyenne dans le plan d'injection pour chaque géométrie cylindrique.	192
6.23	Champs de vitesse RMS dans le plan d'injection pour chaque configuration cylindrique.	193
6.24	Champs instantanés de fraction de mélange Z dans le plan d'injection des configurations cylindriques.	194
6.25	Champs instantanés de température T dans le plan médian pour les configurations CYL2 et CYL4.	194
6.26	Rendu volumique 3D du taux de dégagement de chaleur local représentant la flamme des configurations CYL2 et CYL4.	195
6.27	Taux de dégagement de chaleur local instantané dans le plan médian pour les configurations CYL2 et CYL4.	195
6.28	Evolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global pour les configurations CYL2 et CYL4.	196
7.1	Noyau de gaz frais entouré de gaz brûlés : champs de température T et terme source chimique $\dot{\omega}_{Y_c}$ superposés au maillage, à différents instants. Calcul réalisé sur 10 processeurs avec adaptation dynamique de maillage et répartition automatique des éléments.	204
A.1	Algorithme complet du scheduler dynamique.	207
A.2	<i>Scale-up</i> du cas brûleur Bunsen 2D obtenu sur la machine Turing (IDRIS).	209
A.3	Comparaison du <i>strong scaling</i> avec et sans scheduler sur la configuration du brûleur centimétrique 3D, obtenu sur la machine Curie (CCRT) avant optimisation. La référence est choisie comme le calcul sans scheduler et 512 processeurs.	210
A.4	Schéma de la double décomposition des processeurs. Haut : tous les processeurs sont réunis dans un seul communicateur. Bas : les processeurs sont séparés entre plusieurs communicateurs.	210
A.5	Efficacité réduite du calcul des termes sources en fonction de la taille du communicateur interne pour des calculs à 512 et 4096 processeurs.	211

Liste des tableaux

2.1	Définitions de la combustion mésoscopique et microscopique à partir de différentes longueurs caractéristiques, reproduit de [111]. MEMS est l'acronyme anglais pour les systèmes électro-mécaniques microscopiques.	22
4.1	Caractéristiques des maillages 3D.	98
4.2	Performances de calcul avec les différents maillages sur la machine Antares du CRIHAN.	100
4.3	Erreur de norme L2 relative sur la vitesse moyenne par rapport à la référence.	102
4.4	Caractéristiques des maillages étudiés.	118
4.5	Erreur relative de norme L2 sur les profils de vitesse moyenne sur 4 lignes dans les différents maillages (en %).	122
4.6	Temps de calcul normalisé pour chaque maillage étudié.	125
5.1	Temps de calcul normalisé pour chaque maillage étudié. Le symbole * indique que la flamme est accrochée au maillage.	133
5.2	Résultats obtenus sur chaque cas de la flamme Bunsen.	140
5.3	Synthèse des performances du processus maître pour la flamme Bunsen 2D avec le maillage de résolution $45 \mu\text{m}$ dans le front de flamme sur 128 processeurs, avec et sans répartition de la charge de calcul des termes sources.	141
5.4	Operating conditions for the considered computations.	142
5.5	Performances globales du brûleur, moyennées en temps, pour le cas avec méthane pur.	150
5.6	Performances de calcul pour la configuration MESO-CORIA méthane-air sur maillage avec 34.2 millions d'éléments.	152
5.7	Conditions opératoires des trois cas étudiés.	155
5.8	Performances globales du brûleur pour les points de fonctionnement C1, C2 et C3.	160
5.9	Comparaison du rendement chimique entre l'expérience et la simulation. Les valeurs expérimentales sont tirées de [137].	162
5.10	Emissions polluantes en sortie pour les trois cas.	162
6.1	Caractéristiques de flamme avec épaissement constant.	170
6.2	Caractéristiques de flamme avec épaissement local.	172
6.3	Paramètres du cas test flamme-tourbillons 2D.	175
6.4	Cas de calcul de l'interaction flamme-tourbillons.	176
6.5	Performances de calcul de l'interaction flamme-tourbillons avec modèle TFLES.	180
6.6	Caractéristiques des maillages 3D de la configuration MESO-CORIA avec modèle TFLES.	180
6.7	Performances globales moyennes obtenus avec les maillages M1 et M0 couplés au modèle TFLES, comparé au calcul de référence avec M2.	187

6.8	Synthèse des performances de calcul pour la configuration MESO-CORIA avec maillages grossiers couplés au modèle TFLES et comparé au résultat de référence.	188
6.9	Caractéristiques géométriques et de maillages des configurations cylindriques.	190
6.10	Performances globales moyennes obtenues sur les configurations cylindriques.	196
A.1	Compromis à faire sur la taille du chunk.	209
A.2	Compromis à faire sur la taille des communicateurs internes.	211

Bibliographie

- [1] Y. Addad, S. Benhamadouche, and D. Laurence. The negatively buoyant wall-jet : Les results. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 25, 2004.
- [2] Jeongmin Ahn, Craig Eastwood, Lars Sitzki, and Paul D Ronney. Gas-phase and catalytic combustion in heat-recirculating burners. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2) :2463–2472, 2005.
- [3] HT Aichlmayr, DB Kittelson, and MR Zachariah. Miniature free-piston homogeneous charge compression ignition engine-compressor concept—part i : performance estimation and design considerations unique to small dimensions. *Chemical Engineering Science*, 57(19) :4161–4171, 2002.
- [4] D Ait Ali Yahia, G Baruzzi, W G Habashi, M Fortin, J Dompierre, and M G Vallet. Anisotropic mesh adaptation : towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part II. Structured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39(8) :657–673, 2002.
- [5] Eric Albin. *Contribution à la modélisation numérique des flammes turbulentes : comparaison DNS-EEM-Expériences*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2010.
- [6] Guillaume Albouze, Thierry Poinsot, and Laurent Gicquel. Chemical kinetics modeling and {LES} combustion model effects on a perfectly premixed burner. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6–7) :318 – 328, 2009.
- [7] C Angelberger, D Veynante, F Egolfopoulos, and T Poinsot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program*, pages 61–82, 1998.
- [8] Kozo Aoki, Masayasu Shimura, Shinichi Ogawa, Naoya Fukushima, Yoshitsugu Naka, Yuzuru Nada, Mamoru Tanahashi, and Toshio Miyauchi. Short- and long-term dynamic modes of turbulent swirling premixed flame in a cuboid combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(3) :3209 – 3217, 2015.
- [9] Ivo Babuska and Werner C Rheinboldt. Reliable error estimation and mesh adaptation for the finite element method. Technical report, DTIC Document, 1979.
- [10] J Bardina, J Ferziger, and W Reynolds. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. 1980.
- [11] K. W. Bedford and W. K. Yeo. Conjective filtering procedures in surface water flow and transport. *Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows*, edited by B. Galperin, and S. A. Orszag, Cambridge Univ. Press, New York, 1993.
- [12] Gal Berkooz, Philip Holmes, and John L Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annual review of fluid mechanics*, 25(1) :539–575, 1993.
- [13] RW Bilger. The structure of turbulent nonpremixed flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 22, pages 475–488. Elsevier, 1989.
- [14] R.W. Bilger. Marker fields for turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 138(1–2) :188 – 194, 2004.
- [15] R Byron Bird, Warren E Stewart, and Edwin N Lightfoot. *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, 2007.
- [16] M Boger, D Veynante, H Boughanem, and A Trouvé. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 917–925. Elsevier, 1998.

- [17] V. B. L. Boppana and J. S. B. Gajjar. Global flow instability in a lid-driven cavity. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 62(8) :827–853, 2010.
- [18] Roland Borghi and Michel Champion. *Modélisation et théorie des flammes*. Editions Technip, 2000.
- [19] Aymeric Boucher. *Modélisation de la formation des polluants au sein des foyers aéronautiques par une méthode de chimie tabulée*. PhD thesis, EM2C, 2015.
- [20] J Boussinesq. Theorie de l'écoulement tourbillonnant. *Mem. Pres. Acad. Sci.*, pages 23–46, 1877.
- [21] KNC Bray. The challenge of turbulent combustion. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 1–26. Elsevier, 1996.
- [22] Richard S Brokaw. Approximate formulas for the viscosity and thermal conductivity of gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 29(2) :391–397, 1958.
- [23] Hugo J. Burbano, Andrés A. Amell, and Jorge M. García. Effects of hydrogen addition to methane on the flame structure and {CO} emissions in atmospheric burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(13) :3410 – 3415, 2008. 2nd National and 1st Latin American Congress, Hydrogen and Sustainable Energy Sources.
- [24] T.D. Butler and P.J. O'Rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1) :1503 – 1515, 1977.
- [25] Daniele Carati, Sandip Ghosal, and Parviz Moin. On the representation of backscatter in dynamic localization models. *Physics of Fluids (1994-present)*, 7(3) :606–616, 1995.
- [26] José G Castanos and John E Savage. The dynamic adaptation of parallel mesh-based computation. 1996.
- [27] I. Celik, M. Klein, M. Freitag, and J. Janicka. Assessment measures for URANS/DES/LES : an overview with applications. *Journal of Turbulence*, 7 :48, 2006.
- [28] I. Celik, M. Klein, and J. Janicka. Assessment measures for engineering les applications. *J. Fluids Eng.*, 131, 2009.
- [29] I B Celik, Z N Cehreli, and I Yavuz. Index of Resolution Quality for Large Eddy Simulations. *Journal of Fluids Engineering*, 127(5) :949, 2005.
- [30] Sunghwan Chang and Young-Ho Cho. Static micromixers using alternating whirls and lamination. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15(8) :1397, 2005.
- [31] Sydney Chapman and Thomas George Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gases : an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge university press, 1970.
- [32] Fabrice Charlette, Charles Meneveau, and Denis Veynante. A power-law flame wrinkling model for les of premixed turbulent combustion part ii : dynamic formulation. *Combustion and Flame*, 131 :181 – 197, 2002.
- [33] Patrick Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. Cépaduès, 2000.
- [34] Marc Chauvy, Bruno Delhom, Julien Reveillon, and Francois-Xavier Demoulin. Flame/wall interactions : Laminar study of unburnt hc formation. *Flow, Turbulence and Combustion*, 84(3) :369–396, 2010.
- [35] Guan-Bang Chen, Chih-Peng Chen, Chih-Yung Wu, and Yei-Chin Chao. Effects of catalytic walls on hydrogen/air combustion inside a micro-tube. *Applied Catalysis A : General*, 332(1) :89 – 97, 2007.
- [36] Cédric Chevalier and François Pellegrini. Pt-scotch : A tool for efficient parallel graph ordering. *Parallel Computing*, 34(6) :318–331, 2008.
- [37] Norman Chigier and Tevfik Gemci. A review of micro propulsion technology. In *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, pages 6–9, 2003.
- [38] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22 :745–762, 1968.
- [39] Nikos Chrisochoides and Démian Nave. Parallel delaunay mesh generation kernel. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58(2) :161–176, 2003.

- [40] Terence P. Coffee. Kinetic mechanisms for premixed, laminar, steady state methane/air flames. *Combustion and Flame*, 55(2) :161 – 170, 1984.
- [41] A. Cohen, P. Ronney, U. Frodis, L. Sitzki, E. Meiburg, and S. Wussow. Microcombustor and combustion-based thermoelectric microgenerator, October 18 2001. US Patent App. 09/755,985.
- [42] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.
- [43] Committee of Soldier Power/Energy Systems, National Research Council. *Meeting the Energy Needs of Future Warriors*. The National Academies Press, 2004.
- [44] T. Coupez, H. Dignonnet, and R. Ducloux. Parallel meshing and remeshing. *Applied Mathematical Modelling*, 25(2) :153 – 175, 2000. Dynamic load balancing of mesh-based applications on parallel.
- [45] F. Cozzi and A. Coghe. Behavior of hydrogen-enriched non-premixed swirled natural gas flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 31(6) :669 – 677, 2006.
- [46] F Cozzi, A Coghe, Y D’Angelo, B Renou, and M Boukhalfa. Experimental study of performances and internal flow field of a meso-scale vortex-combustor. In *Proceedings of the 4th European Combustion Meeting*, 2009.
- [47] F. Cozzi, A. Coghe, A. Frassoldati, E. Ranzi, G. Biasi, and F. Campaniello. Analysis of combustion stability and efficiency of a meso-scale combustor by means of continuously stirred reactor model. In *Processes and Technologies for a Sustainable Energy*, 2010.
- [48] F Cozzi, A Coghe, A Olivani, and M Rogora. Stability and combustion efficiency of a meso-scale combustor burning different hydrocarbon fuels. In *30th Meeting of the Italian Section of the Combustion Institute, Ischia, Italy*, 2007.
- [49] F Cozzi, A Olivani, A Coghe, A Lucchetti, and F Tonazzo. Experimental investigation of a mesoscale combustor. In *29th Meeting of The Italian Section of The Combustion Institute, Pisa, Italy*, pages 14–17, 2006.
- [50] C. B. da Silva and O. Métais. On the influence of coherent structures upon interscale interactions in turbulent plane jets. *J. Fluid Mech.*, 473 :103–145, 2002.
- [51] C. Dapogny, C. Dobrzynski, and P. Frey. Three-dimensional adaptive domain remeshing, implicit domain meshing, and applications to free and moving boundary problems. *Journal of Computational Physics*, 262(0) :358 – 378, 2014.
- [52] Lars Davidson. How to estimate the resolution of an les of recirculating flow. In *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations II*, pages 269–286. Springer, 2011.
- [53] Humphry Davy. Some researches on flame. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 107 :45–76, 1817.
- [54] R Decuyper and D Verstraete. Micro turbines from the standpoint of potential users. *RTO-AVT VKI Lecture Series on Micro Gas Turbines, Neuilly-sur-Seine, France, Educational Notes RTO-EN-AVT-131, Paper*, 15 :14–18, 2005.
- [55] C. Dobrzynski and P. Frey. Anisotropic delaunay mesh adaptation for unsteady simulations. Proc.of 17th Int. Meshing Roundtable, Pittsburgh, USA, 2008.
- [56] C Dobrzynski and JF Remacle. Parallel mesh adaptation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2007.
- [57] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 152(3) :415 – 432, 2008.
- [58] J Dompierre, M G Vallet, Y Bourgault, M Fortin, and W G Habashi. Anisotropic mesh adaptation : towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part III. Unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39(8) :675–702, 2002.

- [59] Yufei Dong, Christina M Vagelopoulos, Geoffrey R Spedding, and Fokion N Egolfopoulos. Measurement of laminar flame speeds through digital particle image velocimetry : mixtures of methane and ethane with hydrogen, oxygen, nitrogen, and helium. *Proceedings of the combustion institute*, 29(2) :1419–1426, 2002.
- [60] Clément Dumand. *Mélange et Combustion dans les Petits Volumes : Application aux Micro Systèmes Energétiques*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2005.
- [61] Derek Dunn-Rankin, Elisângela Martins Leal, and David C. Walther. Personal power systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 31(5–6) :422 – 465, 2005.
- [62] H. A. Dwyer, R. J. Kee, and B. R. Sanders. Adaptive grid method for problems in fluid mechanics and heat transfer. *AIAA Journal*, 18(10) :1205–1212, 2015/08/10 1980.
- [63] N. Enjalbert, P. Domingo, and L. Vervisch. Mixing time-history effects in large eddy simulation of non-premixed turbulent flames : Flow-controlled chemistry tabulation. *Combustion and Flame*, 159(1) :336 – 352, 2012.
- [64] A.H. Epstein, S.D. Senturia, and et al AIL-Midani O. Micro heat engines, gas turbines, and rocket engines. volume 1773. Proceedings of the 28th AIAA Fluid Dynamics Conference. Reston, VA, USA : AIAA, 1997.
- [65] Alexandre Ern and Vincent Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*, volume 24. Springer, 1994.
- [66] Mario Falese. *A study of the effects of bifurcations in swirling flows using LES and mesh adaptation*. PhD thesis, CERFACS, 2013.
- [67] Mario Falese, Laurent Y.M. Gicquel, and Thierry Poinso. {LES} of bifurcation and hysteresis in confined annular swirling flows. *Computers & Fluids*, 89(0) :167 – 178, 2014.
- [68] B. Farcy, A. Abou-Taouk, L. Vervisch, P. Domingo, and N. Perret. Two approaches of chemistry downsizing for simulating selective non catalytic reduction denox process. *Fuel*, 118(0) :291 – 299, 2014.
- [69] J.A. Federici and D.G. Vlachos. A computational fluid dynamics study of propane/air microflame stability in a heat recirculation reactor. *Combustion and Flame*, 153(1–2) :258 – 269, 2008.
- [70] A. Carlos Fernandez-Pello. Micropower generation using combustion : Issues and approaches. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(1) :883 – 899, 2002. Proceedings of the Combustion Institute.
- [71] Benedetta Franzelli, Eleonore Riber, Laurent Y.M. Gicquel, and Thierry Poinso. Large eddy simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame. *Combustion and Flame*, 159(2) :621 – 637, 2012.
- [72] Benedetta Giulia Franzelli. *Impact of the chemical description on Direct Numerical Simulation and Large Eddy Simulation of turbulent combustion in industrial aero-engines*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2011.
- [73] M. Freitag and M. Klein. An improved method to assess the quality of large eddy simulations in the context of implicit filtering. *Journal of Turbulence*, 7, 2006.
- [74] J.P. Frenillot, G. Cabot, M. Cazalens, B. Renou, and M.A. Boukhalfa. Impact of {H2} addition on flame stability and pollutant emissions for an atmospheric kerosene/air swirled flame of laboratory scaled gas turbine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(9) :3930 – 3944, 2009.
- [75] M. Frenklach, H. Wang, M. Goldenberg, G.P. Smith, D.M. Golden, C.T. Bowman, R.K. Hanson, W.C. Gardiner, and V. Lissianski. Gri-mech—an optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion. Technical Report GRI-95/0058, Gas Research Institute Topical Report, 1995.
- [76] S. E. Gant. Reliability issues of les-related approaches in an industrial context. *Flow Turbul. Combust.*, 84, 2010.
- [77] Massimo Germano, Ugo Piomelli, Parviz Moin, and William H Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 3(7) :1760–1765, 1991.
- [78] Bernard J. Geurts and Jochen Frohlich. A framework for predicting accuracy limitations in large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 14(6) :L41–L44, 2002.

- [79] Federico Ghirelli and Bo Leckner. Transport equation for the local residence time of a fluid. *Chemical Engineering Science*, 59(3) :513 – 523, 2004.
- [80] Olivier Gicquel, Nasser Darabiha, and Dominique Thevenin. Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2) :1901 – 1908, 2000.
- [81] RG Gilbert, K_ Luther, and J Troe. Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. ii. weak collision rate constants. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 87(2) :169–177, 1983.
- [82] V. Giovangigli and N. Darabiha. Vector computers and complex chemistry combustion. In Claude-Michel Brauner and Claudine Schmidt-Lainé, editors, *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, volume 140 of *NATO ASI Series*, pages 491–503. Springer Netherlands, 1988.
- [83] Vincent Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Springer, 1999.
- [84] P. A. Gnoffo. A finite-volume, adaptive grid algorithm applied to planetary entry flowfields. *AIAA Journal*, 21(9) :1249–1254, 2015/08/10 1983.
- [85] S. Gordon and B. J. McBride. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and chapmanjouguet detonations. NASA Report SP-273, NASA, 1971.
- [86] Cyril Gruau and Thierry Coupez. 3d tetrahedral, unstructured and anisotropic mesh generation with adaptation to natural and multidomain metric. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(48–49) :4951 – 4976, 2005. Unstructured Mesh Generation.
- [87] A. Gruber, R. Sankaran, E. R. Hawkes, and J. H. Chen. Turbulent flame–wall interaction : a direct numerical simulation study. *Journal of Fluid Mechanics*, 658 :5–32, 2010.
- [88] C. Gruselle. *Etude du developpement d’une flamme soumise a un gradient de concentration. Rôle de la stratification et des EGR*. PhD thesis, CORIA, 2014.
- [89] L. Guedot. *Modélisation et optimisation de système d’injection multipoint*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2015.
- [90] L. Guedot, G. Lartigue, and V. Moureau. Design of implicit high-order filters on unstructured grids for the identification of large-scale features in large-eddy simulation and application to a swirl burner. *Physics of Fluids (1994-present)*, 27(4) :–, 2015.
- [91] J. Guidez, F.X. Nicoul, P. Josso, and R. Valle. Development of a micro gas turbine engine at onera. In *Proceedings of 19th ISABE Conference*, volume ISABE-2009-1307, 2009.
- [92] Ashwani K Gupta, David G Lilley, and Nick Syred. Swirl flows. *Tunbridge Wells, Kent, England, Abacus Press, 1984, 488 p.*, 1, 1984.
- [93] W G Habashi, J Dompierre, Y Bourgault, D Ait Ali Yahia, M Fortin, and M G Vallet. Anisotropic mesh adaptation : towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part I : general principles. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 32(6) :725–744, 2000.
- [94] E. Hachem, G. Jannoun, J. Veysset, and T. Coupez. On the stabilized finite element method for steady convection-dominated problems with anisotropic mesh adaptation. *Applied Mathematics and Computation*, 232(0) :581 – 594, 2014.
- [95] F Halter, C Chauveau, N Djebaili-Chaumeix, and I Gökalp. Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane–hydrogen–air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :201–208, 2005.
- [96] Fabien Halter, Christian Chauveau, and Iskender Gökalp. Characterization of the effects of hydrogen addition in premixed methane/air flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(13) :2585 – 2592, 2007. ICHS-2005.
- [97] C Hasse, M Bollig, N Peters, and HA Dwyer. Quenching of laminar iso-octane flames at cold walls. *Combustion and flame*, 122(1) :117–129, 2000.

- [98] Evatt R Hawkes and Jacqueline H Chen. Direct numerical simulation of hydrogen-enriched lean premixed methane–air flames. *Combustion and Flame*, 138(3) :242 – 258, 2004.
- [99] Claudia Hertel and Jochen Fröhlich. Error reduction in les via adaptive moving grids. In Maria Vittoria Salvetti, Bernard Geurts, Johan Meyers, and Pierre Sagaut, editors, *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations II*, volume 16 of *ERCOTAC Series*, pages 309–318. Springer Netherlands, 2011.
- [100] Joseph O Hirschfelder, Charles F Curtiss, Robert Byron Bird, et al. *Molecular theory of gases and liquids*, volume 26. Wiley New York, 1954.
- [101] J. Hoffman and C. Johnson. A new approach to computational turbulence modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(23–24) :2865 – 2880, 2006. Incompressible {CFD}.
- [102] Johan Hoffman. Computation of mean drag for bluff body problems using adaptive dns/les. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 27(1) :184–207, 2005.
- [103] Erjiang Hu, Zuohua Huang, Jiajia He, Chun Jin, and Jianjun Zheng. Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane–hydrogen–air flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(11) :4876 – 4888, 2009. 2nd International Workshop on Hydrogen 2nd International Workshop on Hydrogen.
- [104] JCR Hunt, A Wray, and P Moin. Eddies, stream, and convergence zones in turbulent flows. *Center for turbulence research report CTR-S88*, pages 193–208, 1988.
- [105] Kousuke Isomura, Shuji Tanaka, Shin-ichi Togo, and Masayoshi Esashi. Development of high-speed micro-gas bearings for three-dimensional micro-turbo machines. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15(9) :S222, 2005.
- [106] Antony Jameson, Wolfgang Schmidt, Eli Turkel, et al. Numerical solutions of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time-stepping schemes. *AIAA paper*, 1259 :1981, 1981.
- [107] AR Jones, SA Lloyd, and FJ Weinberg. Combustion in heat exchangers. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 360(1700) :97–115, 1978.
- [108] W.P. Jones and R.P. Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 73(3) :233 – 249, 1988.
- [109] David H. Lewis Jr., Siegfried W. Janson, Ronald B. Cohen, and Erik K. Antonsson. Digital micropropulsion. *Sensors and Actuators A : Physical*, 80(2) :143 – 154, 2000.
- [110] Yiguang Ju and CW Choi. An analysis of sub-limit flame dynamics using opposite propagating flames in mesoscale channels. *Combustion and Flame*, 133(4) :483–493, 2003.
- [111] Yiguang Ju and Kaoru Maruta. Microscale combustion : Technology development and fundamental research. *Progress in Energy and Combustion Science*, 37(6) :669–715, 12 2011.
- [112] Yiguang Ju and Bo Xu. Theoretical and experimental studies on mesoscale flame propagation and extinction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2) :2445 – 2453, 2005.
- [113] Niket S Kaisare, Soumitra R Deshmukh, and Dionisios G Vlachos. Stability and performance of catalytic microreactors : Simulations of propane catalytic combustion on pt. *Chemical Engineering Science*, 63(4) :1098–1116, 2008.
- [114] Niket S. Kaisare and Dionisios G. Vlachos. Extending the region of stable homogeneous micro-combustion through forced unsteady operation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2) :3293 – 3300, 2007.
- [115] Niket S. Kaisare and Dionisios G. Vlachos. A review on microcombustion : Fundamentals, devices and applications. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(3) :321–359, June 2012.
- [116] George Karypis and Vipin Kumar. Metis-unstructured graph partitioning and sparse matrix ordering system. Technical report, version 2.0, 1995.
- [117] George Karypis and Vipin Kumar. A parallel algorithm for multilevel graph partitioning and sparse matrix ordering. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 48(1) :71 – 95, 1998.

- [118] Robert J Kee, Fran M Rupley, and James A Miller. Chemkin-ii : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Technical report, Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1989.
- [119] Dong Sung Kim, Seok Woo Lee, Tai Hun Kwon, and Seung S Lee. A barrier embedded chaotic micromixer. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 14(6) :798, 2004.
- [120] Han S. Kim, Vaibhav K. Arghode, and Ashwani K. Gupta. Flame characteristics of hydrogen-enriched methane–air premixed swirling flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(2) :1063 – 1073, 2009.
- [121] John Kim and Parviz Moin. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of computational physics*, 59(2) :308–323, 1985.
- [122] Kyu Tae Kim, Dae Hoon Lee, and Sejin Kwon. Effects of thermal and chemical surface–flame interaction on flame quenching. *Combustion and flame*, 146(1) :19–28, 2006.
- [123] Nam Il Kim, Satoshi Aizumi, Takeshi Yokomori, Soichiro Kato, Toshiro Fujimori, and Kaoru Maruta. Development and scale effects of small swiss-roll combustors. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2) :3243 – 3250, 2007.
- [124] Nam Il Kim, Souichiro Kato, Takuya Kataoka, Takeshi Yokomori, Shigenao Maruyama, Toshiro Fujimori, and Kaoru Maruta. Flame stabilization and emission of small swiss-roll combustors as heaters. *Combustion and Flame*, 141(3) :229 – 240, 2005.
- [125] Sergiu Klainerman and Andrew Majda. Compressible and incompressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 35(5) :629–651, 1982.
- [126] M. : Klein. An attempt to assess the quality of large eddy simulations in the context of implicit filtering. *Flow Turbul. Combust.*, 75, 2005.
- [127] Andrey Nikolaevich Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 30, pages 299–303, 1941.
- [128] Matthias Kraushaar. *Application of the compressible and low-mach number approaches to large eddy simulation of turbulent flows in aero-engines*. PhD thesis, INPT, 2011.
- [129] G. Kuenne, A. Ketelheun, and J. Janicka. Les modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with fgm tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 158(9) :1750 – 1767, 2011.
- [130] Kenneth K Kuo. *Principles of combustion*. Wiley New York et al., 1986.
- [131] Chung K Law. Fuel options for next-generation chemical propulsion. *Aiaa Journal*, 50(1) :19–36, 2012.
- [132] J-Ph L gier, T Poinso, and D Veynante. Dynamically thickened flame les model for premixed and non-premixed turbulent combustion. *Proc. of the summer program*, pages 157–168, 2000.
- [133] M. Lesieur. *Turbulence in fluids*. Kluwer Academic Publisher, 1997.
- [134] Bamdad Lessani and Miltiadis V Papalexandris. Time-accurate calculation of variable density flows with strong temperature gradients and combustion. *Journal of Computational Physics*, 212(1) :218–246, 2006.
- [135] DK Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids*, 4 :633–635, 1992.
- [136] FA Lindemann, Svante Arrhenius, Irving Langmuir, NR Dhar, J Perrin, and WC McC Lewis. Discussion on “the radiation theory of chemical action”. *Trans. Faraday Soc.*, 17 :598–606, 1922.
- [137] Siqian Liu, Bruno Renou, Marianne S jstrand, and Fabio Cozzi Yves D’Angelo. Experimental study of combustion and flow dynamics in a meso-scale whirl combustor. In *15th Int Symp on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, 2010.
- [138] SA Lloyd and FJ Weinberg. A burner for mixtures of very low heat content. *Nature*, 251 :47–49, 1974.
- [139] Guido Lodato, Pascale Domingo, and Luc Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 227(10) :5105–5143, 2008.

- [140] G. Lodier, L. Vervisch, V. Moureau, and P. Domingo. Composition-space premixed flamelet solution with differential diffusion for in situ flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame*, 158(10) :2009 – 2016, 2011.
- [141] A.P. London, A.A. Ayón, A.H. Epstein, S.M. Spearing, T. Harrison, Y. Peles, and J.L. Kerrebrock. Micro-fabrication of a high pressure bipropellant rocket engine. *Sensors and Actuators A : Physical*, 92(1–3) :351 – 357, 2001. Selected Papers for Eurosensors {XIV}.
- [142] Tianfeng Lu and Chung K Law. A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :1333–1341, 2005.
- [143] K. Luo, H. Pitsch, M.G. Pai, and O. Desjardins. Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2143 – 2152, 2011.
- [144] Maxim Lyubovskiy, Lance L Smith, Marco Castaldi, Hasan Karim, Brian Nentwick, Shahrokh Etemad, Rene LaPierre, and William C Pfefferle. Catalytic combustion over platinum group catalysts : fuel-lean versus fuel-rich operation. *Catalysis Today*, 83(1) :71–84, 2003.
- [145] G. D. Stefanidis M. S. Mettler and D. G. Vlachos. Scale out strategies for microchemical devices : Application to natural gas to syngas conversion. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 49(10942– 10955), 2010.
- [146] Ulrich Maas and Stephen B Pope. Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 24, pages 103–112. Elsevier, 1992.
- [147] Andrew Majda and James Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42(3-4) :185–205, 1985.
- [148] Mathias Malandain. *Massively parallel simulation of low-Mach number turbulent flows*. Theses, INSA de Rouen, January 2013.
- [149] Mathias Malandain, Nicolas Maheu, and Vincent Moureau. Optimization of the deflated conjugate gradient algorithm for the solving of elliptic equations on massively parallel machines. *Journal of Computational Physics*, 238(0) :32 – 47, 2013.
- [150] T. Mantel and J.-M. Samaniego. Fundamental mechanisms in premixed turbulent flame propagation via vortex–flame interactions part ii : numerical simulation. *Combustion and Flame*, 118(4) :557 – 582, 1999.
- [151] Kaoru Maruta. Micro and mesoscale combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1) :125–150, 2010.
- [152] S Mathur, PK Tondon, and SC Saxena. Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases. *Molecular physics*, 12(6) :569–579, 1967.
- [153] Yurii Sh Matros and GRIGORI A BUNIMOVICH. Reverse-flow operation in fixed bed catalytic reactors. *Catalysis Reviews*, 38(1) :1–68, 1996.
- [154] C. Meneveau and T. Poinso. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 86(4) :311 – 332, 1991.
- [155] Cindy Merlin. *Simulation numérique de la combustion turbulente : Méthode de frontières immergées pour les écoulements compressibles, application à la combustion en aval d’une cavité*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2011.
- [156] Parviz Moin and Krishnan Mahesh. Direct numerical simulation : A tool in turbulence research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1) :539–578, 1998.
- [157] Pet al Moin, K Squires, W Cabot, and Sangsan Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 3(11) :2746–2757, 1991.
- [158] Louis Monchick and EA Mason. Transport properties of polar gases. *The Journal of Chemical Physics*, 35(5) :1676–1697, 1961.

- [159] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. *C.R. Mecanique*, 339(2/3) :141–148, 2011.
- [160] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modeling. *Combustion and Flame*, 158(7) :1340 – 1357, 2011.
- [161] V. Moureau, P. Minot, H. Pitsch, and C. Bérat. A ghost-fluid method for large-eddy simulations of premixed combustion in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 221(2) :600 – 614, 2007.
- [162] Charles J. Mueller, James F. Driscoll, David L. Reuss, Michael C. Drake, and Martin E. Rosalik. Vorticity generation and attenuation as vortices convect through a premixed flame. *Combustion and Flame*, 112(3) :342 – 358, 1998.
- [163] Habib N. Najm, Peter S. Wyckoff, and Omar M. Knio. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow : I. stiff chemistry. *Journal of Computational Physics*, 143(2) :381 – 402, 1998.
- [164] Suresh Nambully, Pascale Domingo, Vincent Moureau, and Luc Vervisch. A filtered-laminar-flame {PDF} sub-grid scale closure for {LES} of premixed turbulent flames. part i : Formalism and application to a bluff-body burner with differential diffusion. *Combustion and Flame*, 161(7) :1756 – 1774, 2014.
- [165] A. Naudin. *Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente avec chimie détaillée tabulée*. PhD thesis, 2008.
- [166] R. A. Nicolaides. Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24(2) :355–365, April 1987.
- [167] Franck Nicoud and Frédéric Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- [168] Dan G Norton and Dionisios G Vlachos. Combustion characteristics and flame stability at the microscale : a cfd study of premixed methane/air mixtures. *Chemical engineering science*, 58(21) :4871–4882, 2003.
- [169] Dan G Norton and Dionisios G Vlachos. A cfd study of propane/air microflame stability. *Combustion and Flame*, 138(1) :97–107, 2004.
- [170] Kilian Oberleithner, Michael Stöhr, Seong Ho Im, Christoph M. Arndt, and Adam M. Steinberg. Formation and flame-induced suppression of the precessing vortex core in a swirl combustor : Experiments and linear stability analysis. *Combustion and Flame*, 162(8) :3100 – 3114, 2015.
- [171] JA van Oijen and LPH De Goey. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161(1) :113–137, 2000.
- [172] O'Rourke. Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames. *Journal of Computational Physics*, 1979.
- [173] Perrine Pepiot-Desjardins and Heinz Pitsch. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. *Combustion and Flame*, 154(1) :67–81, 2008.
- [174] N Peters. Numerical and asymptotic analysis of systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames. In *Numerical simulation of combustion phenomena*, pages 90–109. Springer, 1985.
- [175] N Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid mechanics*, 384 :107–132, 1999.
- [176] Norbert Peters and Bernd Rogg. *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*. Springer Science & Business Media, 1993.
- [177] H Pitsch. A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143(4) :587–598, 2005.
- [178] T. Poinso, T. Echekki, and M. G. Mungal. A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combustion Science and Technology*, 81(1-3) :45–73, 1992.
- [179] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion, third edition*. 2011.

- [180] T Poinso, D Veynante, and S Candel. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *Journal of Fluid Mechanics*, 228(561-606) :230, 1991.
- [181] T. J. Poinso, D. Veynante, A. Trouvé, and G. Ruetsch. Turbulent flame propagation in partially premixed flames. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 111–136, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford University, USA, 1996. CONF.
- [182] TJ Poinso, DC Haworth, and G Bruneaux. Direct simulation and modeling of flame-wall interaction for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95(1) :118–132, 1993.
- [183] SB Pope. Ceq : A fortran library to compute equilibrium compositions using gibbs function continuation, 2003.
- [184] Stephen B Pope. *Turbulent flows*. Cambridge university press, 2000.
- [185] Stephen B Pope. The computation of constrained and unconstrained equilibrium compositions of ideal gas mixtures using gibbs function continuation. *FDA03-02, Cornell University*, 2003.
- [186] Stephen B. Pope. Gibbs function continuation for the stable computation of chemical equilibrium. *Combustion and Flame*, 139(3) :222 – 226, 2004.
- [187] P. Popp and M. Baum. Analysis of wall heat fluxes, reaction mechanisms, and unburnt hydrocarbons during the head-on quenching of a laminar methane flame. *Combustion and Flame*, 108(3) :327 – 348, 1997.
- [188] P. Popp, M. Smooke, and M. Baum. Heterogeneous/homogeneous reaction and transport coupling during flame-wall interaction. *Symposium (International) on Combustion*, 26(2) :2693 – 2700, 1996.
- [189] William H Raymond and Arthur Garder. A review of recursive and implicit filters. *Monthly weather review*, 119(2) :477–495, 1991.
- [190] William Craig Reynolds and Henry Crawford Perkins. *Engineering thermodynamics*, volume 266. McGraw-Hill New York etc, 1977.
- [191] LF Richardson. Weather prediction by numerical process. 1922.
- [192] Paul D Ronney. Analysis of non-adiabatic heat-recirculating combustors. *Combustion and Flame*, 135(4) :421–439, 2003.
- [193] Clarence W Rowley, IGOR MEZIĆ, Shervin Bagheri, Philipp Schlatter, and Dan S Henningson. Spectral analysis of nonlinear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 641 :115–127, 2009.
- [194] Pierre Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer, 2002.
- [195] J.-M. Samaniego and T. Mantel. Fundamental mechanisms in premixed turbulent flame propagation via flame–vortex interactions : Part i : experiment. *Combustion and Flame*, 118(4) :537 – 556, 1999.
- [196] R.W. Schefer, D.M. Wicksall, and A.K. Agrawal. Combustion of hydrogen-enriched methane in a lean pre-mixed swirl-stabilized burner. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(1) :843 – 851, 2002. Proceedings of the Combustion Institute.
- [197] Kirk Schloegel, George Karypis, and Vipin Kumar. Multilevel diffusion schemes for repartitioning of adaptive meshes. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 47(2) :109 – 124, 1997.
- [198] L Selle, G Lartigue, T Poinso, P Kaufman, W Krebs, and D Veynante. Large-eddy simulation of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry. In *Proceedings of the summer program*, pages 333–344, 2002.
- [199] J A Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 93(4) :1591–1595, 1996.
- [200] P. N. Shankar and M. D. Deshpande. Fluid mechanics in the driven cavity. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1) :93–136, 2000.
- [201] V. Shirsat and A. K. Gupta. A review of progress in heat recirculating meso-scale combustors. *Applied Energy*, 88(12) :4294–4309, 12 2011.
- [202] William A. Sirignano, Trinh K. Pham, and Derek Dunn-Rankin. Miniature-scale liquid-fuel-film combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(1) :925 – 931, 2002. Proceedings of the Combustion Institute.

- [203] M. Sjöstrand. *Simulations Numériques Directes d'une méso-chambre de combustion : Mise en oeuvre et analyses*. PhD thesis, 2012.
- [204] Marianne Cuif Sjöstrand, Yves D'Angelo, and Eric Albin. No-slip wall acoustic boundary condition treatment in the incompressible limit. *Computers & Fluids*, 86(0) :92 – 102, 2013.
- [205] Joseph Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : I. the basic experiment*. *Monthly weather review*, 91(3) :99–164, 1963.
- [206] Gregory P Smith, David M Golden, Michael Frenklach, Nigel W Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C Thomas Bowman, Ronald K Hanson, Soonho Song, William C Gardiner Jr, et al. Gri-mech 3.0, 1999.
- [207] William Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine Series 5*, 36(223) :507–531, 1893.
- [208] N. Syred and J.M. Beér. Combustion in swirling flows : A review. *Combustion and Flame*, 23(2) :143 – 201, 1974.
- [209] Nicholas Syred. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (pvc) in swirl combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2) :93 – 161, 2006.
- [210] Shoichi Tanaka, Masayasu Shimura, Naoya Fukushima, Mamoru Tanahashi, and Toshio Miyauchi. Dns of turbulent swirling premixed flame in a micro gas turbine combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :3293–3300, 2011.
- [211] Hendrik Tennekes and John Leask Lumley. *A first course in turbulence*. MIT press, 1972.
- [212] F. O. Thomas and V. W. Goldschmidt. Structural characteristics of a developing turbulent planar jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 163 :227–256, 2 1986.
- [213] Z. Turkeli-Ramadan, R.N. Sharma, and K Yamaguchi. Combustion characteristics of hex-combustor for ultra micro gas turbine. In *European Combustion Meeting 2011, Cardiff, UK*, 2011.
- [214] J.A. van Oijen, F.A. Lammers, and L.P.H. de Goey. Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame*, 127(3) :2124 – 2134, 2001.
- [215] Stijn Vantiegheem. *Numerical simulations of quasi-static magnetohydrodynamics using an unstructured finite volume solver : development and applications*. PhD thesis, Université Libre de Bruxelles, 2011.
- [216] L. Vervisch and D. Veynante. Interlinks between approaches for modeling turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1) :175–183, 2000.
- [217] Luc Vervisch, Pascale Domingo, Guido Lodato, and Denis Veynante. Scalar energy fluctuations in large-eddy simulation of turbulent flames : Statistical budgets and mesh quality criterion. *Combustion and Flame*, 157(4) :778 – 789, 2010.
- [218] Denis Veynante and Luc Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in energy and combustion science*, 28(3) :193–266, 2002.
- [219] J. Vican, B. F. Gajdeczko, F. L. Dryer, D. L. Milius, I. A. Aksay, and R. A. Yetter. Development of a microreactor as a thermal source for microelectromechanical systems power generation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(1) :909–916, 2002.
- [220] Henk A. Van Der Vorst. Parallel iterative solution methods for linear systems arising from discretized pde's. In *Lecture Notes on Parallel Iterative Methods for discretized PDE's. AGARD Special Course on Parallel Computing in CFD*, 1995.
- [221] G. Wang, M. Boileau, and D. Veynante. Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 158(11) :2199 – 2213, 2011.
- [222] Haiou Wang, Kun Luo, Shuqiang Lu, and Jianren Fan. Direct numerical simulation and analysis of a hydrogen/air swirling premixed flame in a micro combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(21) :13838 – 13849, 2011. 2010 Asian/APEC BioH2.

- [223] Haiou Wang, Kun Luo, Kunzan Qiu, Shuqiang Lu, and Jianren Fan. A {DNS} study of hydrogen/air swirling premixed flames with different equivalence ratios. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(6) :5246 – 5256, 2012. Optimization Approaches to Hydrogen Logistics.
- [224] Jürgen Warnatz, Ulrich Maas, Robert W Dibble, and J Warnatz. *Combustion*, volume 3. Springer, 2001.
- [225] F. J. Weinberg, D. M. Rowe, G. Min, and P. D. Ronney. On thermoelectric power conversion from heat recirculating combustion systems. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(1) :941–947, 2002.
- [226] Charles K Westbrook, Andrew A Adamczyk, and George A Lavoie. A numerical study of laminar flame wall quenching. *Combustion and Flame*, 40 :81–99, 1981.
- [227] S Whalen, M Thompson, D Bahr, C Richards, and R Richards. Design, fabrication and testing of the p 3 micro heat engine. *Sensors and Actuators A : Physical*, 104(3) :290–298, 2003.
- [228] F.A. Williams. *Combustion theory*. Cummings Publ. Co, 1985.
- [229] F.A. Williams. Turbulent combustion. *the Mathematics of combustion*, pages 97–131, 1985.
- [230] Ming-Hsun Wu. *Development and experimental analyses of meso and micro scale combustion systems*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 2007.
- [231] Ming-Hsun Wu, Yanxing Wang, Vigor Yang, and Richard A. Yetter. Combustion in meso-scale vortex chambers. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2) :3235 – 3242, 2007.
- [232] Ming-Hsun Wu, Richard A Yetter, and Vigor Yang. Development and characterization of ceramic micro chemical propulsion and combustion systems. In *46th AIAA aerospace sciences meeting and exhibit, AIAA-2008-966*, 2008.
- [233] X. Wu and P. Moin. A direct numerical simulation study on the mean velocity characteristics in turbulent pipe flow. *J. Fluid Mech.*, 608, 2008.
- [234] T. Xing. A general framework for verification and validation of large eddy simulations. *Journal of Hydrodynamics*, 27, 2015.
- [235] W Yang, U Bonne, et al. Mems free piston knock engine. In *Book of abstracts for poster presentation, Twenty-Eight International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Edinburgh, UK*, 2000.
- [236] Richard A. Yetter, Irvin Glassman, and H. Clay Gabler. Asymmetric whirl combustion : A new low nox approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1) :1265 – 1272, 2000.
- [237] A. Yoshizawa and K. Horiuti. A statistically-derived subgrid-scale kinetic energy model for the large-eddy simulation of turbulent flows. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 54, 1985.
- [238] Rixin Yu, Jiangfei Yu, and Xue-Song Bai. An improved high-order scheme for {DNS} of low mach number turbulent reacting flows based on stiff chemistry solver of low mach number turbulent reacting flows based on stiff chemistry solver. *Journal of Computational Physics*, 231(16) :5504 – 5521, 2012.