

Numéro d'ordre : 2339

## THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE  
L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE  
DE TOULOUSE**

*Ecole doctorale* : TYFEP

*Spécialité* : Dynamique des Fluides

*Directeur de thèse* : Thierry POINSOT

Par M. Aloïs SENGISSEN

<p><b>SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DES INSTABILITÉS DE COMBUSTION : VERS LE COUPLAGE FLUIDE / STRUCTURE</b></p>
--

Soutenue le 12 Mai 2006 devant le jury composé de :

L. VERVISCH	Professeur à l'INSA de Rouen	Rapporteur
E. MASTORAKOS	Professeur à l'Université de Cambridge	Rapporteur
P. KAUFMANN	Ingénieur à Siemens PG, Mühlheim	Invité
J. KOK	Professeur à l'Université de Twente	Examineur
S. DUCRUIX	Professeur à l'École Centrale de Paris	Examineur
F. NICOUD	Professeur à l'Université de Montpellier II	Examineur
T. POINSOT	Directeur de Recherche à l'IMF de Toulouse	Directeur de Thèse

Réf. CERFACS : TH/CFD/06/30



## Résumé

Afin de pouvoir satisfaire aux normes de pollutions, les turbines à gaz actuelles sont contraintes à fonctionner dans un régime pauvre. Le mode de combustion qui en résulte peut présenter des instabilités susceptibles de dégrader la durée de vie des composants de la structure. Malheureusement, ces instabilités sont totalement imprévisibles à l'aide des méthodes d'ingénierie classiques.

Le but de cette thèse est de démontrer le potentiel de l'approche de la Simulation aux Grandes Échelles (LES) pour prédire ces instabilités et évaluer leur impact sur la structure. Avant de procéder au couplage proprement dit, de nombreux phénomènes sont à éclaircir, tels que le rôle des fluctuations de richesse dans le caractère instationnaire de la réaction, ou l'influence des conditions limites thermiques sur les régimes instables.

Ce travail de thèse montre une validation de la LES sur un brûleur-test développé spécifiquement à l'*Université of Twente* (Pays bas) dans le cadre du projet Européen DESIRE. Après comparaison avec les données expérimentales (LDV et chemiluminescence  $CH^*$ ), nous démontrerons l'influence des conditions limites thermiques non seulement sur la fréquence mais aussi sur l'amplitude des modes instables. Ensuite, il sera mis en évidence que les ondes acoustiques se propageant dans les conduits d'air lors du forçage de la ligne de fuel modifient de façon significative la perturbation de richesse réellement perçue par la flamme. Sa réponse sera en outre caractérisée en détail (linéarité). Enfin, les résultats d'un prototype de couplage entre la LES (AVBP) et un code de structure (ANSYS) seront présentés.

**Mots clefs :** Fonction de transfert de flamme, combustion partiellement prémélangée, écoulements vrillés, simulation aux grandes échelles (LES), couplage fluide/structure.

## Abstract

A specificity of modern gas turbines is that these systems operate in very lean regimes to satisfy emission regulations. The resulting flames may be sensitive to combustion oscillations which could dramatically diminish their service life due to the fatigue of the structure. Unfortunately the prediction of combustion instabilities using standard engineering tools is impossible.

The work presented here investigates the capabilities of the Large Eddy Simulation (LES) approach to predict the instability and to evaluate its impact on the structure. On the way towards this fluid/structure coupling, many phenomena remain unclear, such as the role of equivalence ratio fluctuations in inducing an unsteady reaction rate, or the influence of thermal boundary conditions on these undesired combustion modes.

The LES methodology is applied on a lab-scale burner specifically developed at *University of Twente* (the Netherlands) in the framework of the DESIRE European project. After performing a comparison with experimental data (LDV and Chemiluminescence  $CH^*$ ), this study will demonstrate the influence of thermal boundary conditions on both frequency and amplitude of unstable modes. Then will be revealed that the acoustic waves propagating in the air passages when forcing the fuel line significantly modifies the actual equivalence ratio perturbation seen by the flame. Besides, its own response will be characterised (linearity). Finally, the results of a prototype of coupling between LES (AVBP) and a structure code (ANSYS) are presented.

**Keywords :** Flame transfer functions, imperfectly premixed combustion, swirl flows, Large Eddy Simulations, fluid/structure coupling.

## **Note sur la forme du manuscrit**

Afin de faciliter la relecture de ce manuscrit aux membres du jury, ce document est rédigé en partie en anglais.

Les planches en couleur ont été reportées dans l'annexe A.

Les articles publiés ou soumis pendant cette thèse sont mis en annexe C & D.

Pour des raisons de clarté, les différents chapitres de cette thèse sont regroupés sous la forme de trois parties.

# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>9</b>
<b>Liste des symboles</b>	<b>11</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>15</b>
<b>I Interactions fluide/structure et instabilités de combustion</b>	<b>17</b>
<b>1 Couplage fluide-structure lors d'instabilités de combustion</b>	<b>21</b>
1.1 Cadre scientifique : les instabilités de combustion . . . . .	21
1.2 Enjeux industriels : la robustesse des turbines à gaz . . . . .	34
1.3 Nécessité du couplage fluide / structure . . . . .	48
1.4 La LES dans le couplage fluide / structure . . . . .	51
<b>II LES des écoulements réactifs</b>	<b>57</b>
<b>2 Equations de conservation pour les fluides réactifs</b>	<b>61</b>
2.1 Equations et variables conservatives . . . . .	61
2.2 Variables thermodynamiques . . . . .	62
2.3 Equation d'état des gaz parfaits . . . . .	63
2.4 Conservation de la masse en multi-espèces . . . . .	64

## TABLE DES MATIÈRES

---

2.5	Coefficients de transport . . . . .	64
2.6	Flux de chaleur . . . . .	65
2.7	Cinétique chimique . . . . .	66
<b>3</b>	<b>Equations pour la LES réactive</b>	<b>67</b>
3.1	La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES) . . . . .	67
3.2	Equations LES . . . . .	68
3.3	Les modèles de sous-maille disponibles dans AVBP . . . . .	71
3.4	Le modèle de flamme épaissie . . . . .	73
3.5	Réduction de cinétique chimique . . . . .	78
<b>4</b>	<b>Approche numérique</b>	<b>81</b>
4.1	Discrétisation <i>Cell-Vertex</i> . . . . .	81
4.2	Schémas numériques . . . . .	83
4.3	Modèles de viscosité artificielle . . . . .	83
4.4	Maillages . . . . .	85
4.5	Performance du code . . . . .	87
4.6	Opérateurs de moyenne . . . . .	88
<b>5</b>	<b>Conditions aux limites</b>	<b>89</b>
5.1	Généralités . . . . .	89
5.2	Conditions aux limites caractéristiques . . . . .	90
5.3	Construire une condition d'entrée caractéristique imposant un débit . . . . .	94
5.4	Lois de paroi . . . . .	97
<b>III</b>	<b>Simulations des instabilités de combustion de la chambre <i>DESIRE</i></b>	<b>99</b>
<b>6</b>	<b>Presentation of the <i>DESIRE</i> test rig</b>	<b>105</b>
6.1	Experimental test rig . . . . .	105

6.2	Computational domain and resulting issues . . . . .	108
6.3	Operating conditions . . . . .	109
<b>7</b>	<b>Additional diagnostic tools</b>	<b>111</b>
7.1	Experimental diagnostics . . . . .	111
7.2	Helmholtz solver : <i>AVSP</i> . . . . .	113
<b>8</b>	<b>Cold flow simulations</b>	<b>115</b>
8.1	Cold flow qualitative analysis . . . . .	115
8.2	Comparisons with experimental data . . . . .	118
8.3	Influence of numerical scheme . . . . .	125
<b>9</b>	<b>Non pulsated reacting flow</b>	<b>127</b>
9.1	Reduction of chemical complexity . . . . .	127
9.2	Mixing analysis . . . . .	130
9.3	Adiabatic reacting cases . . . . .	133
9.4	Non adiabatic reacting cases . . . . .	138
9.5	Acoustic analysis using Helmholtz solver . . . . .	144
9.6	Unsteady modes in the unforced case . . . . .	145
<b>10</b>	<b>Pulsated reacting cases</b>	<b>147</b>
10.1	Phenomenology and forcing method . . . . .	147
10.2	Self amplification of excitation . . . . .	150
10.3	Unsteady modes in the forced case . . . . .	151
10.4	Phase-locked averaged analysis . . . . .	152
10.5	Flame transfer function . . . . .	154
10.6	Linearity of the flame response . . . . .	156
10.7	Thermal load of the structure . . . . .	157
10.8	Mechanical load of the structure . . . . .	160

## TABLE DES MATIÈRES

---

<b>Conclusion générale</b>	<b>163</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>165</b>
<b>Annexes</b>	<b>181</b>
<b>A Planches en couleur</b>	<b>181</b>
A.1 Écoulement à froid . . . . .	181
A.2 Écoulement à chaud . . . . .	183
A.3 Influence de l'injection pilote . . . . .	184
<b>B Characteristic wave decomposition</b>	<b>185</b>
B.1 Basic definitions . . . . .	185
B.2 Governing equations . . . . .	188
B.3 LODI relations . . . . .	202
<b>C Article soumis au 31<sup>st</sup> Symposium International on Combustion</b>	<b>205</b>
<b>D Article soumis à <i>Combustion and Flame</i></b>	<b>213</b>

# Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier Messieurs L. Vervisch, E. Mastorakos, P. Kaufmann, J. Kok, S. Ducruix et F. Nicoud pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à ce travail en acceptant de participer au jury.

Je remercie aussi les anciens thésards Laurent Selle, Ghislain Lartigue, Patrick Schmitt et Charles Martin qui m'ont fait profiter de leur expérience. Je n'aurais sans doute pas appris aussi vite s'ils ne m'avaient pas expliqué aussi longtemps...

Un grand merci va à Mauro Porta ("il più bello") pour toute l'aide qu'il m'a apporté et le temps qu'il m'a fait gagner dans l'écriture du chapitre 5 de cette thèse.

Je n'oublierai pas Guillaume Puigt et Laurent Gicquel, Yannick Sommerer et Bénédicte Cuenot pour leur aide pendant l'écriture ou la correction de cette thèse et des articles.

Ce travail n'aurait pu être mené à bien sans mes homologues de l'*Université de Twente* (Pays bas), à savoir Genie Stoeffels, Rob Huls et Jaap Van Kampen... "we lachten de ballen uit onze broeken!"

Ma gratitude va également aux membres de l'équipe CSG du CERFACS et à Marie Labadens, secrétaire de l'équipe CFD. Ils travaillent tous les jours pour faciliter la vie de tous et méritent un coup de chapeau ne serait-ce que pour cela.

J'aimerais exprimer toute ma gratitude aux nombreux thésards qui ont fait partie de l'équipe CFD durant ces quatre dernières années pour l'ambiance de travail chaleureuse qu'ils ont contribué à créer.

Une petite pensée va aussi à Éric Charignon et Alexandre Charpenel qui m'ont permis de garder la tête au frais pendant la rédaction, que ce soit avec un marteau ou un piolet à la main.

Un remerciement tout particulier à Stéphane Pascaud, à qui je dois (en plus de son amitié) cette magnifique mise en page (faite en moins d'une heure), mon futur boulot et même ma copine...

Almost last, certainly not least : Thierry Poinot. Comment aurais-je pu en arriver là sans lui ? Il m'a tant appris, scientifiquement et humainement. Il a orienté mon travail judicieusement<sup>1</sup> et a fait preuve d'une disponibilité incroyable. Plus qu'un excellent directeur de thèse, c'est quelqu'un de bien, tout simplement.

---

<sup>1</sup>c'est l'histoire d'un chameau...

## REMERCIEMENTS

---

Et Delphine... encore beaucoup de pages de ma vie se tourneront à tes côtés.

# Liste des symboles

## Lettres romaines

$\mathcal{E}_{mech}$	Déformations mécaniques de la structure	$E$	fonction d'efficacité
$\mathcal{E}_{th}$	Déformations thermiques de la structure	$E$	énergie par unité de masse
$\mathcal{E}_{tot}$	Déformations totales de la structure	$E_a$	énergie d'activation
$\mathcal{M}_{kj}$	réactif et produit	$e_s$	énergie sensible
$\mathcal{N}$	Nombre de cycles de la structure	$F$	épaississement
$Q_j$	variable d'avancement	$g$	gravité
$\mathcal{R}$	constante universelle des gaz parfaits	$g_{ij}$	gradient de vitesse résolu
$\mathcal{S}$	Contraintes de la structure	$H$	enthalpie
$\Delta$	taille du maillage et du filtre LES	$h_{CPU}$	heure de calcul d'un processeur
$A$	constante pré-exponentielle	$h_s$	enthalpie sensible
$a_{p,k}$	coefficient d'absorption moyen de Planck	$J_{i,j}$	flux diffusif
$a_T$	taux d'étirement	$K_{eq}$	constante de la réaction inverse
$c$	vitesse du son	$K_{f,j}$	constante de la réaction directe
$C_p$	capacité calorifique à pression constante	$K_{f,j}$	constante de la réaction inverse
$C_{S_F}$	constante du modèle de Smagorinsky filtré	$K_X$	coefficient de relaxation pour X
$C_S$	constante du modèle de Smagorinsky	$M$	nombre de réactions
$C_v$	capacité calorifique à volume constant	$m_{\dot{X}}$	débit de X
$C_w$	constante du modèle WALE	$N$	nombre d'espèces
$CH^*$	rayonnement du radical CH*	$N_c$	nombre de cellules dans le front de flamme
$d_c$	hauteur du canal de refroidissement	$N_{F,O}$	index de Takeno
$d_w$	épaisseur de la paroi de la chambre	$P$	pression
$D_{ij}$	coefficient binaire	$P_0$	pression de référence
$D_k$	diffusivité dans le mélange	$Q$	taux de réaction global
$D_{th}$	diffusivité thermique	$Q_1$	pertes thermiques par refroidissement
		$Q_2$	pertes thermiques par convection naturelle

LISTE DES SYMBOLES

---

$Q_r$	pertes thermiques par rayonnement	$g$	2 <sup>ème</sup> composante du tenseur des flux
$Q_w$	pertes thermiques par convection	$h$	3 <sup>ème</sup> composante du tenseur des flux
$Q_{Total}$	pertes thermiques totales	$s$	vecteur des termes sources
$Q_{HR}$	chaleur massique de réaction	$w$	vecteur des variables conservatives
$q_i$	flux de chaleur	<b>Lettres grecques</b>	
$R$	résistance thermique	$\alpha$	constante de la fonction d'efficacité
$S$	entropie	$\beta$	constante de la fonction d'efficacité
$s$	entropie sensible	$\Delta_e$	taille du filtre
$S_F$	surface débitante de fuel	$\delta_{i,j}$	indice de Kronecker
$S_{i,j}$	tenseur des vitesses de déformation	$\delta_l$	épaisseur du front de flamme
$S_L$	vitesse de flamme laminaire	$\delta_{Th}$	épaisseur thermique de la flamme
$S_T$	vitesse de flamme turbulente	$\dot{\omega}_k$	taux de réaction
$T$	température	$\dot{\omega}_T$	dégagement de chaleur
$T_0$	température de référence	$\Gamma$	étirement de sous-maille
$T_{AD}$	$T$ adiabatique de fin de combustion	$\gamma$	exposant polytropique
$t_b$	temps de combustion complète	$\kappa$	constante de Kármán
$u$	1 <sup>ère</sup> composante de vitesse	$\lambda$	conductivité thermique
$V$	vecteur vitesse	$\mu$	viscosité dynamique
$v$	2 <sup>ème</sup> composante de vitesse	$\nu''_{kj}$	coefficient stoechiométrique des produits
$V^c$	vitesse de diffusion corrective	$\nu'_{kj}$	coefficient stoechiométrique des réactifs
$V^k$	vitesse de diffusion	$\nu_{kj}$	coefficient stoechiométrique global
$V_{cell}$	volume de la cellule	$\nu_t$	viscosité turbulente de sous-maille
$W$	masse molaire	$\Omega$	fonction de présence
$w$	3 <sup>ème</sup> composante de vitesse	$\bar{\Sigma}$	densité de surface de flamme
$X$	fraction molaire	$\phi$	richesse
$Y$	fraction massique	$\phi'_X$	contribution aux fluctuations de richesse
$Z$	fraction de mélange	$\rho$	densité
$Z_{ST}$	fraction de mélange stoechiométrique	$\sigma$	constante de Stefan-Boltzman
$\mathbf{F}$	tenseur des flux	$\tau_{i,j}$	tenseur des contraintes
$\mathbf{f}$	1 <sup>ère</sup> composante du tenseur des flux	$\Xi$	facteur de plissement

**Nombres sans dimension**

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

**Opérateurs de moyenne / filtrage**

$\langle \cdot \rangle$	grandeur filtrée
$\langle \cdot \rangle_s$	grandeur de sous-maille
$\bar{f}$	moyenne de Reynolds
$\tilde{f}$	moyenne de Favre

**Indices**

$F$	relatif au carburant
$i$	composante dans la direction $i$
$j$	relatif à la réaction $j$
$k$	relatif à l'espèce $k$
$O$	relatif à l'oxydant
$w$	grandeur au mur

**Exposants**

'	relatif à la fluctuation
+	unité au mur
0	état de référence
$I$	<i>Inviscid</i> , partie non visqueuse
$m$	valeur molaire
$t$	contribution de sous-maille
$V$	partie visqueuse
$\sim$	valeur tabulée

**Abréviations**

BC	Boundary Condition
CFD	Computational Fluid Dynamics
CSD	Computational Solid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
DTF	Dynamically Thickened Flame
LDV	Laser Doppler Velocimetry
LES	Large Eddy Simulation
LW	Lax-Wendroff
MPI	Message Passing Interface
NSCBC	Navier-Stokes Characteristic B.C.
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
SGE	Simulation aux Grandes Echelles
SGS	Sub-Grid Scale
SND	Simulation Numérique Directe
TF	Thickened Flame
TFLES	Thickened Flame model for LES
THI	Turbulence Homogène Isotrope
TTGC	Two-step Taylor-Galerkin Colin



# Introduction générale

Être capable de prédire la stabilité d'un brûleur est un enjeu scientifique majeur placé au coeur de nombreux programmes de recherche actuels. Ces efforts peuvent être aussi bien expérimentaux [23, 44, 49, 50, 89, 100, 147, 150, 181, 182] que numériques [138, 137, 170, 172, 176, 186, 185]. Les industriels fabriquant des turbines à gaz<sup>2</sup> considèrent cette question des instabilités de combustion comme fondamentale car ce phénomène risque de compromettre la fiabilité et la performance de leurs installations. A court terme, les instabilités peuvent provoquer une extinction ou une dégradation partielle ou totale des brûleurs [140]. A long terme, elles engendrent un niveau de bruit intense (fluctuations de pression) et une charge thermique importante (fluctuation de flux de chaleur) à l'origine de la fatigue thermo-mécanique de la structure de la chambre de combustion [9].

L'existence du couplage entre l'écoulement réactif et la structure est donc une évidence. À l'heure actuelle, aucun outil numérique n'est capable de prédire de manière satisfaisante les instabilités de combustion et en même temps d'évaluer leur impact sur la structure. Les approches de type RANS<sup>3</sup>, bien que peu coûteuses, ont montré leurs limites dans ce domaine car elles sont incapables de tenir compte de l'acoustique du système [184]. Depuis quelques années, l'augmentation de puissance des calculateurs rend accessible une nouvelle approche pour l'étude des systèmes complexes de combustion : la Simulation aux Grandes Échelles<sup>4</sup> [147, 171]. Cette méthode, beaucoup plus adaptée à capturer le caractère instationnaire de la combustion, n'a encore jamais été utilisée conjointement à un code de structure qui serait potentiellement capable de quantifier la dégradation ou la fatigue structurelle du système.

Cette thèse a pour objectif de faire progresser l'état de l'art dans le domaine du couplage entre LES et code de structure. Avant de passer au couplage proprement dit, de nombreux points critiques sont à identifier et à résoudre, notamment :

- La thermique de la chambre doit être modélisée [201] (conduction / convection / radiation). Son implication sur l'acoustique du système est sans doute appelée à jouer un rôle non négligeable.
- Les conditions limites doivent contrôler à la fois les paramètres hydrodynamiques de l'écoulement (débit, température, pression...) mais aussi présenter des propriétés acoustiques bien définies [187].
- Au sein de l'écoulement, la réponse de la flamme aux diverses perturbations doit être prédite correctement pour espérer en capturer l'impact sur les parois. Plus spécifiquement, l'influence des fluctuations de richesse [100] doit être identifiée au même titre que celui des ondes acoustique [83].

---

<sup>2</sup>SIEMENS, ALSTOM, G.E., etc...

<sup>3</sup>Reynolds Averaged Navier Stokes

<sup>4</sup>notée LES pour Large-Eddy Simulation

Ce document est organisé de la façon suivante :

**PARTIE I :** La première partie met en place le cadre de cette étude.

**Le chapitre 1** contient l'introduction et la présentation de la stratégie adoptée, le cadre, les enjeux, les objectifs et les limites de cette étude menée dans le cadre du projet DESIRE.

**PARTIE II :** La seconde partie rassemble la description du code et de l'ensemble des modèles.

**Le chapitre 2** introduit les équations régissant la mécanique des fluides réactifs.

**Le chapitre 3** s'attache à décrire l'approche LES et l'ensemble des modèles physiques implémentés dans le code AVBP (thermo-chimie, turbulence, combustion).

**Le chapitre 4** aborde les aspects "numériques" du code AVBP, les schémas numériques employés, les modèles de viscosité artificielle, mais aussi d'un point de vue plus appliqué le travail fait sur le maillage et la performance du code.

**Le chapitre 5** détaille le soin particulier apporté aux conditions aux limites, expose pas à pas comment construire une condition caractéristique imposant le débit et quel traitement est effectué aux parois.

**PARTIE III :** La troisième partie regroupe tous les résultats du projet DESIRE.

**Le chapitre 6** présente la configuration étudiée : le brûleur test développé spécifiquement dans le cadre du projet DESIRE et installé à l'*Université de Twente* (Pays-bas). Le problème du choix du domaine de calcul est aussi traité.

**Le chapitre 7** donne un bref aperçu des outils de diagnostic qui permettent de compléter ou de valider la LES, à savoir les diverses techniques expérimentales de mesures ainsi que le code AVSP résolvant les équations de *Helmholtz*.

**Le chapitre 8** commence par analyser l'écoulement non réactif et compare les champs obtenus avec les mesures expérimentales fournies par l'*Université de Twente*.

**Le chapitre 9** rassemble tous les résultats pour l'écoulement réactif non forcé : le mélange, la dynamique et la structure de la flamme et les modes acoustiques qui peuvent potentiellement se développer.

**Le chapitre 10** regroupe différentes questions spécifiques aux cas pulsés, notamment sur les mécanismes impliqués dans la réponse de la flamme aux fluctuations de richesse. Après avoir examiné le caractère instationnaire de la charge thermique aux parois, un premier essai de couplage fluide / structure sera proposé.

Les résultats présentés dans la partie III ont fait l'objet d'un article reporté en annexe D, soumis pour publication dans *Combustion and Flame* en mars 2006.

Un travail portant sur le rôle spécifique d'une injection supplémentaire de carburant (flamme pilote) dans la stabilisation de la combustion est présenté en annexe C. Cette étude a été soumise pour publication au *31<sup>st</sup> International Symposium on Combustion* en décembre 2005.

**Première partie**

**Interactions fluide/structure  
et instabilités de combustion**



# Table des Matières

<b>1</b>	<b>Couplage fluide-structure lors d'instabilités de combustion</b>	<b>21</b>
1.1	Cadre scientifique : les instabilités de combustion	21
1.1.1	Les instabilités de combustion	21
	Historique des instabilités de combustion	22
	Principe des instabilités de combustion	24
	Causes des fluctuations de dégagement de chaleur	24
	Classification des instabilités de combustion	26
1.1.2	Les méthodes de contrôle	27
	Le contrôle actif	27
	Le contrôle passif	28
1.1.3	Les méthodes numériques d'étude et de prédiction	28
	Les méthodes de bas ordre	29
	Les codes acoustiques	29
	Les résolutions directes	29
1.1.4	Les méthodes de caractérisation	30
	Caractérisation énergétique : Critères d'instabilité	30
	Caractérisation systémique	31
	Caractérisation systémique ouverte : Fonctions de transfert	32
	Caractérisation systémique fermée : Instabilités auto-entretenues	34
1.2	Enjeux industriels : la robustesse des turbines à gaz	34
1.2.1	Les turbines à gaz	34
	Historique des turbines à gaz	35
	Principe de fonctionnement	36
	Applications du principe des turbines à gaz	37
1.2.2	Performance des turbines à gaz	39
	Rendement	39
	Stratégies d'amélioration du rendement	39
1.2.3	Pollution	40
	Quels polluants ? Quelles normes ?	40
	Réponses aux contraintes environnementales	41
	Stabilité réduite des flammes	42

## TABLE DES MATIÈRES

---

1.2.4	La fatigue des matériaux . . . . .	43
	Historique de la fatigue . . . . .	44
	Principe de fatigue des matériaux . . . . .	45
	La fatigue thermomécanique . . . . .	46
	La fatigue et les turbines à gaz . . . . .	47
1.3	Nécessité du couplage fluide / structure . . . . .	48
1.3.1	Le projet européen <i>DESIRE</i> . . . . .	48
	Le projet . . . . .	48
	Les partenaires . . . . .	48
	Outils mis en oeuvre dans l'étude du brûleur-test . . . . .	49
1.3.2	Stratégies de couplage . . . . .	49
	Couplage one-way / two-way . . . . .	50
	Stratégies temporelles . . . . .	50
	Stratégies fréquentielles . . . . .	51
1.4	La LES dans le couplage fluide / structure . . . . .	51
1.4.1	La simulation aux grandes échelles comme candidat idéal . . . . .	51
	Capacités prédictives de la LES . . . . .	51
	Difficultés pour une LES réactive précise . . . . .	53
1.4.2	Objectifs de la thèse et limites des investigations . . . . .	54
	Objectifs de cette thèse . . . . .	54
	Limite des investigations . . . . .	54
	Précisions sur le travail fourni . . . . .	55

# Chapitre 1

## Couplage fluide-structure lors d'instabilités de combustion

### 1.1 Cadre scientifique : les instabilités de combustion

#### 1.1.1 Les instabilités de combustion

Les instabilités de combustion constituent l'un des problèmes les plus sérieux et les plus souvent rencontrés dans le développement des moteurs fusée, des turbines aéronautiques et terrestres et dans de nombreux systèmes industriels (fours, chaudières). Ces instabilités se manifestent par des oscillations intenses des différents paramètres de l'écoulement qui peuvent considérablement perturber le fonctionnement du système pour les raisons suivantes :

- Le régime de fonctionnement moyen est affecté.
- Des vibrations sont induites dans la structure du système, pouvant entrer en résonance avec elle.
- Une fatigue cyclique peut être occasionnée par un fonctionnement instable.
- Le bruit produit par le foyer peut devenir extrêmement important.
- Les flux de chaleur associés sont élevés et peuvent entraîner une surchauffe de certaines pièces.
- Une extinction partielle ou totale de la combustion peut survenir.

Après avoir présenté quelques éléments historiques des pionniers dans l'étude des instabilités de combustions, nous définirons le principe de boucle d'instabilité et détaillerons diverses causes pouvant mener aux fluctuations de dégagement de chaleur. Cette grande variété de causes nous poussera enfin à rappeler une classification proposée des instabilités de combustion.

**Historique des instabilités de combustion**

**1777 :**

*Byron Higgins* découvre le premier [74] la possibilité de générer un son en plaçant une flamme d'hydrogène dans un tube ouvert (Fig. 1.1). Il note également que le son n'est émis que lorsque le tube entourant la flamme ainsi que le tuyau amenant l'hydrogène ont une longueur particulière.

**1850 :**

*Conrad Sondhaus* observe [192] un phénomène similaire en chauffant un tube fermé à une extrémité par un bulbe en verre.

**1859 :**

*Petrus L. Rijke* expérimente [165, 166] un résonateur thermoacoustique simple (Fig. 1.2) : Il chauffe avec une flamme une grille placée dans un tube vertical ouvert, puis en retirant la flamme, le tube se met à émettre pendant une dizaine de secondes un son intense. Il note aussi qu'en utilisant une grille chauffée électriquement, le son peut être maintenu indéfiniment.

**1878 :**

Lord *Rayleigh* (Fig. 1.3) propose une explication du phénomène [161] de résonance couplée, et énonce la formulation de son critère d'instabilité. Il conditionne l'apparition de l'instabilité à la corrélation entre les fluctuations de pression et de dégagement de chaleur. Cela permet d'expliquer pourquoi le tube de *Rijke* ne résonne que lorsque la grille est placée approximativement au quart du tube.

**1952-1954 :**

Sir *James Lighthill* (Fig. 1.4) en dérivant une équation d'onde à partir des équations de *Navier-Stokes* amène l'idée d'une analogie [103, 104] entre les processus thermodynamiques et mécaniques complexes au sein d'un écoulement (par exemple la combustion) et une source acoustique équivalente.

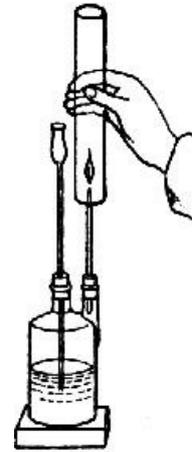


FIG. 1.1 - L'expérience de "Singing flame" de Higgins.

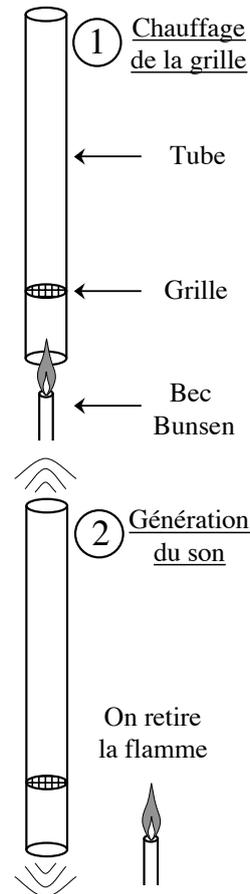


FIG. 1.2 - L'expérience du tube de Rijke.

**1951-1956 :**

*Crocco* et *Cheng* [41, 40, 42], sous l'impulsion de la conquête spatiale, sont parmi les pionniers à étudier les instabilités de combustion dans les fusées à propergols liquides. Ils démontrent le couplage entre un mode acoustique transverse du foyer et la flamme (voir Fig. 1.5, une fusée-test en fonctionnement stable et instable).

**1953-1959 :**

*Marble*, *Rogers* et *Cox* approfondissent la compréhension du phénomène dans les moteurs fusée [110], les statoréacteurs et systèmes de réchauffe (post-combustion) [168]. Ils identifient ainsi d'autres phénomènes mis en jeu comme l'interaction entre les tourbillons et l'acoustique, et plus tard (1977), *Marble* et *Candel* abordent des mécanismes déclencheurs de perturbations acoustiques [109].

**1960-1990 :**

Un nombre très important d'études sont menées et révèlent la possibilité d'une grande variété de mécanismes, impliquant des ondes de choc (*Oran* [128], 1985), des modes acoustiques haute (*Barrère* [8], 1968) ou basse fréquence (*Keller* [85], 1981), des effets hydrodynamiques (*Bray* [17], 1983) ou de cinétique chimique (*Clavin* [33], 1985). On peut noter des revues synthétisant toutes ces études par *Putnam* [159] (1971), *Candel* [114](1993), puis plus récemment *Williams* [80] (2005) et *Lieuwen* [102] (2006) .

**Plus récemment, les turbines à gaz :**

Dans le domaine des turbines à gaz, les instabilités de combustion ne sont devenues un sujet sensible que très tardivement car elles sont favorisées par les choix technologiques récents dictés par les objectifs de rendement (Chap. 1.2.2) et de pollution (Chap. 1.2.3) de plus en plus poussés. On peut néanmoins citer quelques études clef [21, 100, 140] et le développement de la simulation numérique de la combustion turbulente qui apparaît comme un outil prometteur pour l'étude des instabilités de combustion dans les turbines à gaz [134, 137, 186].



FIG. 1.3 - Lord Rayleigh.



FIG. 1.4 - Sir James Lighthill.

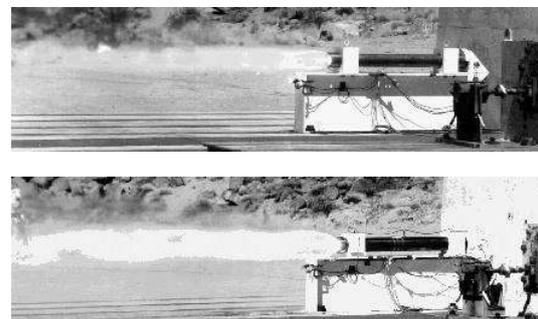


FIG. 1.5 - Fusée test en fonctionnement stable (haut) et instable (bas) - source NASA.

### Principe des instabilités de combustion

Les instabilités de combustion sont une classe très générale de phénomènes susceptibles de rendre une flamme ou le milieu qui la contient instable. La clef du mécanisme réside dans le couplage entre un système amplifiant, la combustion, et un système résonnant, qui se trouve être la plupart du temps un mode acoustique, parfois couplés à un phénomène tiers. La figure 1.6 propose une illustration schématique du bouclage potentiellement instable. Suite à une petite perturbation modifiant l'état de l'écoulement, la flamme subit diverses fluctuations (de vitesse  $U'$ , de température  $T'$ , de pression  $P'$ , de richesse  $\phi'$  etc...). Le dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T'$  s'en trouve fortement modifié, et cause à son tour de plus grandes fluctuations susceptibles de modifier à nouveau l'état de l'écoulement via le système résonnant. L'amplification et le déphasage entre chacune de ces étapes conditionne le développement de l'instabilité.

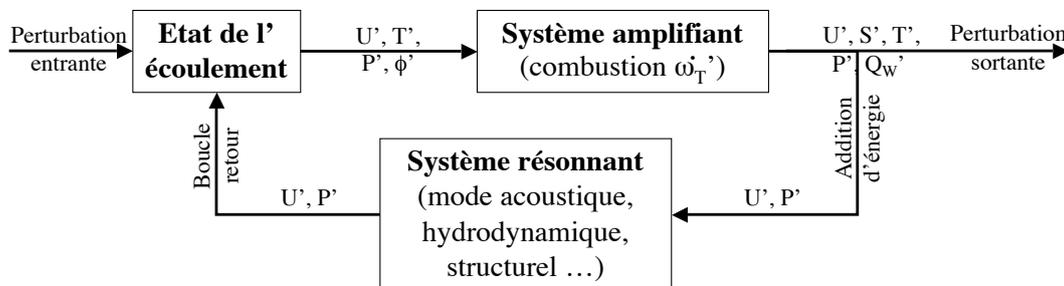


FIG. 1.6 - Schéma de principe de la boucle d'instabilité.

La partie la plus méconnue de cette boucle instable est sans conteste le système amplifiant. En effet, les mécanismes causant des fluctuations de dégagement de chaleur sont très variés et délicats à évaluer de manière quantitative, de même que les effets produits par la flamme.

Dans le cadre des turbines à gaz industrielles, il est intéressant de noter que le système amplifiant - la flamme - peut engendrer des fluctuations de pression  $P'$  et de flux de chaleur aux parois  $Q_w'$  qui sont les causes principales de la fatigue des matériaux (voir Chap. 1.2).

### Causes des fluctuations de dégagement de chaleur

Dans le cas des systèmes de combustion, de nombreux phénomènes peuvent intervenir comme intermédiaires dans cette phase. La plupart de ces phénomènes sont induits par l'interaction de l'hydrodynamique du système avec le champ acoustique. La liste exhaustive de ces phénomènes est assez difficile à établir [22, 45, 149]. On peut citer comme phénomènes pouvant induire une perturbation du dégagement de chaleur :

**Variation de richesse :** Ces variations peuvent être dues au mélange incomplet de l'air et du combustible en amont de la flamme. La perturbation des débits d'alimentation en carburant par l'acoustique est alors à prendre en compte. La variation de débit peut ainsi provenir de l'effet de la pression instationnaire sur le système d'alimentation de combustible en faisant varier la pression

différentielle entre les lignes d'alimentation et le brûleur. Néanmoins, même avec des alimentations amorcées (débit bloqué), le champ de vitesse instationnaire d'un mode longitudinal peut avoir la même conséquence. En se superposant au champ moyen, la vitesse acoustique fait osciller la vitesse de convection au niveau de l'injection. Se créent alors alternativement des poches riches et pauvres convectées par l'écoulement jusqu'à la flamme [175]. Ces variations locales de richesse peuvent être alors largement atténuées avec un mélange efficace. Cependant, si elles ne le sont pas, elles peuvent causer des oscillations fortes. Ce mode d'interaction a été étudié en particulier par *Lieuwen et al.* [100]. Les résultats montrent que la dernière génération de turbines bas  $NO_x$  (Dry Ultra Low  $NO_x$ ), fonctionnant en régime de prémélange pauvre, est particulièrement sensible aux variations de richesse. Les perturbations de richesse sur une flamme proche de la limite d'extinction pauvre, produisent des variations importantes des caractéristiques de la flamme telles que température de flamme et vitesse de flamme. Les temps chimiques associés sont inversement proportionnels à la vitesse de flamme. Ils subissent ainsi de fortes variations sur la branche pauvre comparé à des flammes plus riches proche de la stœchiométrie.

**Variation de surface de flamme :** Les perturbations de vitesse déforment directement la flamme qui se traduit par une modification de la surface de flamme par étirement induisant une fluctuation du dégagement de chaleur. La détermination de la réponse de flammes de prémélange à des perturbations acoustique (forcées) a fait l'objet de nombreuses études expérimentales [180, 93], théoriques [52] et numérique [180]. Ces études montrent que la réponse de la surface de flamme dépend de la géométrie du brûleur et de celle de la flamme stationnaire. Une forte dépendance en fréquence est aussi à noter. Si les longueurs d'onde associées aux perturbations convectives sont de l'ordre la taille de flamme, alors on observe des déformations importantes de front de flamme [180, 184]. Les conditions du maximum d'interaction semblent reliées à des valeurs spécifiques du nombre de Strouhal  $\frac{\omega L_f}{u_0}$  (où  $L_f$  est la taille caractéristique de flamme).

**Interaction flamme/tourbillon :** Les instabilités hydrodynamiques peuvent aussi jouer un rôle important, en particulier sur les brûleurs où la flamme est stabilisée dans le sillage d'un accroche flamme. En effet des tourbillons sont émis par les couches de mélange déstabilisées. Ces couches de mélanges sont aussi présentes dans les brûleurs présentant une marche descendante ou un élargissement brusque. Ce dernier est en général formé par le débouchement du système d'injection dans la chambre plus large. Les observations rendant compte de l'importance de l'interaction flamme-tourbillons sont nombreuses. [18, 21, 43, 64, 105, 146, 168]. La fréquence de détachement des tourbillons peut être un multiple de la fréquence d'un mode propre de la chambre pour qu'un couplage puisse s'installer. Le couplage de mode hydrodynamique avec l'acoustique est aussi envisageable puisque les couches de mélanges peuvent être efficacement excitées par le champ de vitesse acoustique [174]. *Poinsot et al.* [146] observent un détachement à la fréquence du mode acoustique. Le détachement a lieu lorsque l'accélération dû à la vitesse acoustique est maximale. Ces structures cohérentes augmentent significativement le plissement et l'étirement lorsqu'elles interagissent avec le front de flamme. Certaines zones présentent une densité de flamme importante alors que les zones trop étirées peuvent s'éteindre. Le fort cisaillement combiné au mouvement convectif des structures peut arracher des poches de flamme brûlant en aval de la position de la flamme principale. Ces déformations du front de flamme sont de puissantes sources sonores [196].

**Ondes entropiques :** Une autre catégorie d'onde convective peut aussi intervenir. Les ondes entropiques transportent des perturbations de température et densité (points chauds). Ces ondes peuvent

en particulier interagir avec les tuyères amorcées de sortie de chambre et conduire à la création d'ondes acoustiques [109]. Ce phénomène est en général associé aux instabilités de type grondement (rumble,  $f < 150Hz$ ) qui apparaît parfois au démarrage de turbines aéronautiques. [54, 151]

**Vibrations de la structure :** Les modes vibratoires de la structure sont aussi susceptibles d'interagir avec le champ acoustique et la flamme. En effet, les vibrations des parois latérales de la chambre de combustion peuvent se comporter comme des haut-parleurs qui excitent transversalement la flamme. L'impact du forçage transverse sur la combustion a été investigué par *Rey et al.* [163].

L'action globale du champ acoustique (boucle retour) sur la flamme est indirect et résulte d'une combinaison de ces différents type d'effets. Chacun induisant un déphasage particulier entre pression et dégagement de chaleur. Ce déphasage est fonction des temps caractéristiques respectivement associés aux phénomènes mise en jeu. La grande variété des mécanismes présentés nous amène naturellement à une tentative de classification.

### Classification des instabilités de combustion

La première étape d'une étude des instabilités de combustion est donc leur classification. Pour cela, nous reprenons les propositions de *Barrère & Williams* [8] et *Putnam* [159], basant leur classement sur la fréquence de l'instabilité. Il se dégage 3 grandes classes d'instabilités :

1. Les instabilités de système : ce sont des oscillations mettant en jeu l'ensemble de l'installation depuis les réservoirs de carburant jusqu'à l'éjection. La fréquence de ces oscillations est assez basse (inférieure à 200 Hz). L'exemple le plus connu est l'effet POGO où la vibration de la structure d'un lanceur se couple aux oscillations de flamme.
2. Les instabilités propres du foyer : ce sont des oscillations liées à des phénomènes internes au foyer. Elle se produisent à une fréquence plus élevée (300 Hz à 10 kHz) et font intervenir directement le processus de combustion.
3. Les instabilités intrinsèques : ce sont des oscillations inhérentes aux réactifs et indépendantes de la géométrie du foyer. Elles sont en général liées aux phénomènes de cinétique chimique et de transport des réactifs à l'intérieur de la flamme.

Selon leur fréquence, ces différents types d'instabilités ont été baptisés avec différents noms (Fig. 1.7). Un panorama assez large est donné dans la thèse d'état de *Thierry Poinsot* [140].

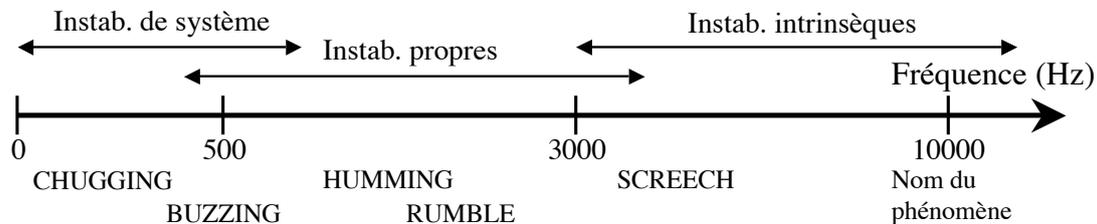


FIG. 1.7 - Classification des types d'instabilité de combustion selon leur fréquence.

Malheureusement, cette classification ne permet pas de comprendre complètement quels mécanismes sont mis en jeu dans une instabilité qui se manifesterait dans une configuration réelle donnée, et encore moins de proposer une méthode de contrôle.

### 1.1.2 Les méthodes de contrôle

Le contrôle des instabilités de combustion est un défi majeur pour le dessin et le développement des chambres de combustion à haute performance. Les systèmes de contrôle se divisent en deux grandes catégories, le contrôle actif et le contrôle passif.

#### Le contrôle actif

Le contrôle actif implique l'usage de procédures dynamiques, fonction de l'état du système (injection carburant pulsée, forçage acoustique etc.).

Initiés dans les années 1950 par les pionniers étudiant les instabilités dans les moteurs fusées (*Marble, Cox et Rodgers* [110, 168], *Crocco et Cheng* [40, 41, 42], voir section 1.1.1), les systèmes de contrôle actif injectent dans les brûleurs des perturbations dont l'effet découple les phénomènes responsables des oscillations. Les systèmes en "boucle ouverte" (Fig. 1.8-a) sont constitués d'un contrôleur et d'un actuateur. Les systèmes en "boucle fermée" (Fig. 1.8-b) utilisent en plus un capteur (microphone) pour informer le contrôleur de l'état réel du brûleur, et ainsi commander une réponse adéquate. Toute la difficulté réside dans l'établissement de modèle d'instabilité qui va permettre au contrôleur de réagir correctement.

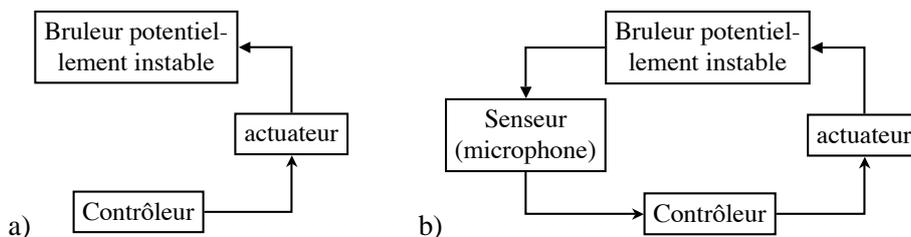


FIG. 1.8 - Contrôle actif en boucle ouverte a) et fermée b).

Appliquées avec succès sur des brûleurs modernes, les perturbations peuvent être appliquées sur l'alimentation de carburant [130] ou utiliser un forçage acoustique déphasé (type anti-bruit) [144]. S'ils sont extrêmement efficaces, en particulier en boucle fermée auto adaptatif, les systèmes de contrôle actifs, peuvent néanmoins être assez onéreux à mettre au point. L'ajout d'un système en boucle fermée, pose toujours le problème de la fiabilité des éléments de la boucle. Si un capteur fournit une information erronée, la réponse du système de contrôle peut être problématique. Les redondances nécessaires alourdissent alors le système. Les industriels les considère actuellement comme des palliatifs. Toutefois, de nombreuses études sont encore menées sur ces systèmes à Cambridge [55] et au MIT [167].

## Le contrôle passif

L'usage du contrôle passif implique la modification du système, par un changement de géométrie, de type d'injection, l'installation d'augmenteurs de mélange [156], de générateurs de tourbillons, de résonateurs acoustiques [43, 141, 147] etc.

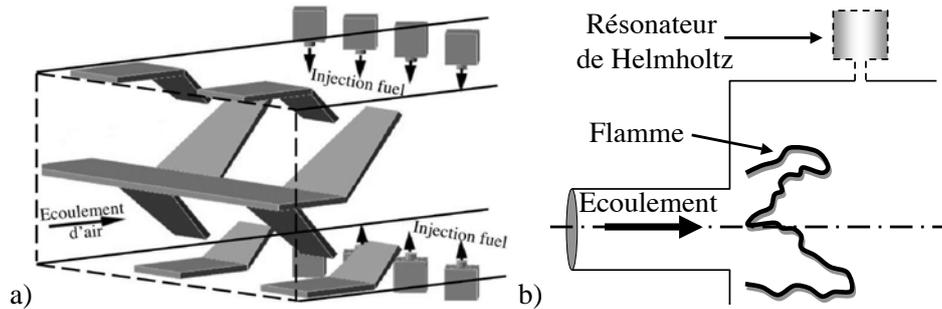


FIG. 1.9 - Contrôle passif : a) augmenteurs de mélange [156] et b) résonateurs de Helmholtz [147], p.390.

Cette méthode a prouvé son efficacité opérationnelle [174, 131]. Paschereit notamment [131], confronté à différentes instabilités dans un brûleur expérimental, met en oeuvre un système de contrôle passif. Ayant identifié une instabilité de Kelvin-Helmholtz comme phénomène moteur de l'instabilité thermo-acoustique, il propose un générateur de tourbillons capable d'interagir avec les structures détachées (au niveau de l'élargissement) en déstabilisant la fusion et l'appariement des tourbillons en large structures. En empêchant la formation de ces gros tourbillons, on brise un des chaînons de la boucle instable. Il obtient une réduction de 28dB sur l'instabilité haute fréquence visée par le système de contrôle, mais aussi une réduction de 50% de l'amplitude d'un mode instable secondaire basse fréquence.

Les systèmes de contrôle passifs nécessitent donc une certaine connaissance du phénomène que l'on souhaite altérer. La mise au point de ces systèmes peut être longue pour optimiser l'efficacité du système de contrôle. L'accent est mis sur une forme de contrôle passif qui consiste, dès les phases de conception, à déterminer les possibles instabilités des brûleurs. Si l'objectif de performance reste inchangé, la stabilité des systèmes de combustion doit être contrôlée dès les premières phases du développement, à un stade où le coût de modifications géométriques reste soutenable. Dès lors, il devient crucial de mieux comprendre les mécanismes mis en jeu dans les instabilités de combustion.

### 1.1.3 Les méthodes numériques d'étude et de prédiction

Avant que le problème des instabilités de combustion ne soit reconnu par l'industrie des turbines à gaz, les instabilités présentes dans le moteur-fusée à ergols solides puis liquides ont motivé de nombreuses études avec pour objectif la capacité à prédire l'instabilité potentielle des systèmes. Un panorama des différentes techniques numériques d'approche des instabilités de combustions est détaillé par Williams *et al.* [80]. Les différentes méthodes numériques de prédiction peuvent être classées en trois catégories :

## Les méthodes de bas ordre

Ces méthodes pionnières [49] ont été développées pour se contenter des capacités de calculs limités et tirent donc partie au maximum de modélisations poussées. De nombreux industriels utilisent ces méthodes dans leur processus de développement (*SIEMENS*, *ALSTOM*, etc..). Elles utilisent une modélisation complète pour chaque élément du système de combustion. On classe dans cette catégorie les codes de type "réseau" [11, 173] qui modélisent le système par un ensemble d'éléments acoustiques 1D, d'impédance connus, reliés entre eux. Les fonctions de transfert des éléments peuvent être dérivées analytiquement dans les cas simples comme les tubes. Elles peuvent aussi être calibrées par une expérience réelle ou numérique. L'utilisation de modèles en réseau et de relations de saut pour les flammes, produit une équation de dispersion à résoudre pour les valeurs propres (fréquences propres) d'intérêt. Les critères de stabilité se basent sur le signe de la partie imaginaire des fréquences propres.

## Les codes acoustiques

En linéarisant les équations de *Navier-Stokes* perturbés pour les fluides réactifs, on obtient une équation des ondes inhomogènes pour les perturbations acoustiques de pression. Cette approche tridimensionnelle peut être résolue dans le domaine temporel [173] ou fréquentiel [11]. Les principaux points délicats restent la fermeture du terme combustion par des relations de saut (dites de "*Rankine-Hugoniot*") et la prise en compte de conditions limites acoustiques réalistes. Des méthodes dites de *Galerkin*, assez proches des résolutions d'équations d'ondes, ont aussi été développées par *Culick* [46] puis par *Zinn* [154].

## Les résolutions directes

Alors que les deux premières approches nécessitent une loi de fermeture pour le terme de dégagement de chaleur, le calcul direct des instabilités de combustion n'en requiert pas. Cependant, les capacités de calcul requises sont bien supérieures aux approches précédentes. Il est nécessaire de disposer d'un solveur *Navier-Stokes* 3D réactif, capable de prendre aussi en compte l'acoustique. Pour mettre en oeuvre des calculs d'instabilités de combustion, il faut être capable de capturer de nombreux phénomènes :

- La dynamique globale de l'écoulement dans le brûleur et les instabilités hydrodynamiques associées.
- La propagation des ondes acoustiques et l'installation des modes propres.
- Les phénomènes de mélange et de transport.
- La cinétique chimique dans une gamme de richesse pour le carburant considéré.
- Les transferts de chaleur, tant au sein du fluide qu'avec l'extérieur.
- L'atomisation et vaporisation, pour les foyers à carburant liquide [129].

La difficulté réside dans l'extrême variété de temps et de longueurs caractéristiques de tous ces phénomènes. Par exemple, dans les instabilités de combustion associées à des modes longitudinaux, les longueurs d'onde correspondantes sont plusieurs fois supérieures à la taille de la chambre ( $\simeq 1$  m)

alors que l'épaisseur de front de flamme est de l'ordre du millimètre. Les temps convectifs sont de l'ordre de quelques dizaines de millisecondes alors que les temps chimiques sont plus proches de  $10^{-6}$  s.

Les phénomènes instationnaires étant d'une importance cruciale, les approches utilisant les équations de *Navier-Stokes* moyennées (RANS) sont naturellement écartées. La simulation aux grandes échelles (LES) apparaît dès lors comme un compromis entre précision et coût calcul. La LES ne résolvant pas les plus petites échelles de la turbulence, elle utilise une modélisation pour prendre en compte leurs effets ainsi qu'un modèle de combustion turbulente pour le calcul d'écoulements réactifs. L'utilisation de la LES s'est répandue au long de ces dernières années, à mesure que les puissances de calculs disponibles ont augmentées. Il est aujourd'hui possible d'effectuer des calculs LES réactifs d'une configuration industrielle [186] sur une modeste grappe de PC. La présentation détaillée de la simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs constituera la partie II de cette thèse.

Il est à noter que l'utilisation conjointe de la LES et d'un code acoustique peut apporter une meilleure compréhension des mécanismes des instabilités de combustion [113, 185].

#### 1.1.4 Les méthodes de caractérisation

##### Caractérisation énergétique : Critères d'instabilité

Un approche très naturelle afin de caractériser les instabilité de combustions est de tenter d'établir un critère visant à indiquer si tel ou tel système de combustion est potentiellement instable. Intuitivement, on peut chercher à définir une énergie et observer quelles quantités physiques sont à l'origine de sa production ou de sa dissipation. Reprenons le cheminement emprunté par *Nicoud et Poinso* [127] visant à construire un tel critère.

Historiquement, *Lord Rayleigh* fut le premier à remarquer [161] la corrélation entre fluctuations de pression et de dégagement de chaleur : "*At the phase of greatest condensation heat is received by the air, and at the phase of greatest rarefaction heat is given up from it, and thus there is a tendency to maintain the vibrations.*" Ces observations ont conduit au critère suivant connu sous le nom de "critère de Rayleigh" :

$$\int_V \int_0^\tau P' \dot{\omega}'_T dt dV > 0 \quad (1.1)$$

Toutefois, ce critère n'est basé sur aucune notion énergétique. Dès lors, on peut se poser la question suivante : comment déterminer la quantité adéquate pour mesurer une fluctuation d'énergie propre à l'établissement d'un critère. Un article fondamental pour répondre à cette question a été écrit par *Chu* [32] qui définit une énergie fluctuante comme "*a positive quantity characterizing the mean level of fluctuations which, in the absence of heat transfer at boundaries and of work done by the boundary of body forces and in the absence of heat and material sources, is a monotone non-increasing function in time.*"

Dans leurs travaux récents [127], *Nicoud et Poinso* suivent cette définition et linéarisent les deux

équations d'énergie totale et d'énergie acoustique. Ils aboutissent à deux critères distincts. Le premier s'avère être une extension du critère de *Rayleigh* (explicité par *Williams* et *Dowling* [39]) :

$$\frac{(\gamma - 1)}{\gamma \bar{P}} \int_V \int_0^\tau P' \dot{\omega}'_T dt dV > \int_A \int_0^\tau P' \bar{u}' dt dA \quad (1.2)$$

Le second fait apparaître en lieu et place de la corrélation  $(P', \dot{\omega}'_T)$  proposée par *Rayleigh*, deux corrélations entre les fluctuations de température et de dégagement de chaleur  $(T', \dot{\omega}'_T)$  d'une part, et entre les fluctuations de vitesse et d'entropie  $(\bar{u}', S')$  d'autre part.

$$\frac{1}{\bar{T}} \int_V \int_0^\tau (T' \dot{\omega}'_T - \frac{\bar{P} \bar{T}}{r C_p} S' \bar{u}' \cdot \bar{\nabla} \bar{S}) dt dV > \int_A \int_0^\tau P' \bar{u}' dt dA \quad (1.3)$$

Pour chacun de ces critères, le terme à droite de l'inégalité représente le flux acoustique au travers des limites du domaine, démontrant ainsi le caractère crucial du traitement des conditions aux limites dans la simulation des instabilités de combustion (voir chapitre 5). Cette approche a été poursuivie par *Martin et Poinso* [112], qui sont parvenus à clore un bilan d'énergie acoustique (critère de *Rayleigh* étendu, voir Eq. 1.2). *Martin et Poinso* n'ont toutefois pas réussi à fermer le bilan d'énergie totale à l'origine de l'Eq. 1.3, mais un bilan similaire fera l'objet du "Summer Program 2006" à Stanford par *Giauque et Poinso*.

### Caractérisation systémique

Une autre approche intéressante permettant d'aborder les instabilités de combustion peut être l'approche systémique. Pour cela, on reprend la nuance définie par *Ho et Huerre* [77] entre instabilité convective (ou "amplificateur de l'écoulement") et instabilité absolue (ou "résonateur de l'écoulement").

- Dans le premier cas, toute perturbation est convectée par l'écoulement, amplifiée, et est peut être évacuée par la suite (Fig. 1.10-a).
- Dans le second, une perturbation se propage dans toutes les directions et n'est pas dissipée. Si les conditions aux limites n'amortissent pas ces perturbations, elle est susceptible d'être la source d'un mécanisme auto-entretenu ("self-excited") via l'acoustique du système (Fig. 1.10-b).

Les brûleurs soumis à une instabilité de combustion appartiennent manifestement à la catégorie des résonateurs à cause de l'action "boucle retour" forte que joue l'acoustique du système. On peut noter que tout résonateur est susceptible de se transformer en amplificateur si une partie du chaînon retour est brisée. Ainsi, il apparaît deux façons de caractériser une instabilité de combustion de manière systémique :

- L'étude des modes instables auto-entretenus (comportement de résonateur).
- L'étude de la réponse de la flamme à une excitation forcée (comportement d'amplificateur)

Ces deux points seront développés dans les deux paragraphes suivants.

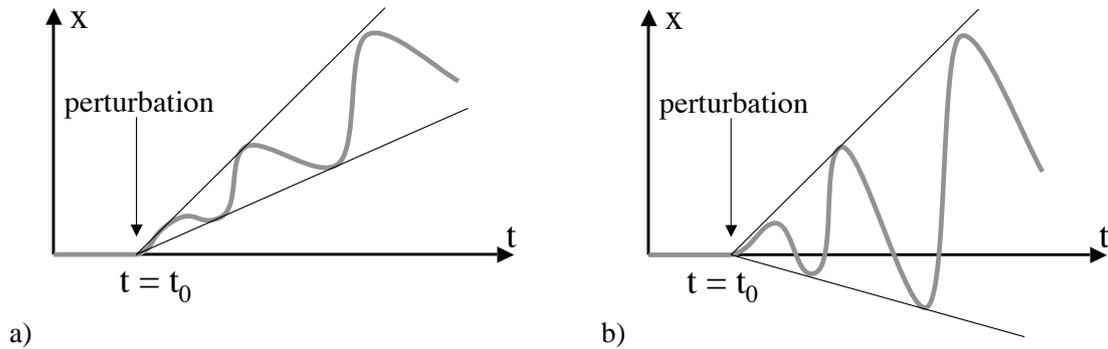


FIG. 1.10 - Réponse d'un amplificateur a) et d'un résonateur b) à une perturbation de l'écoulement.

### Caractérisation systémique ouverte : Fonctions de transfert

Dans le chapitre 1.1.3, nous avons vu que les méthodes "bas ordre" et les codes acoustiques requéraient une loi de fermeture pour le dégagement de chaleur. C'est cette loi appelée "fonction de transfert" qui peut être utilisée pour caractériser le comportement amplificateur décrit au paragraphe précédent.

Le modèle le plus célèbre reste sans doute le modèle  $n - \tau$  de *Crocco* et *Cheng* [42]. L'effet de l'acoustique sur la flamme passe par un index d'interaction  $n$ , qui décrit la relation entre les amplitudes des fluctuations de pression  $P'$  et les fluctuations de chaleur  $\dot{\omega}_T'$ .

La phase entre les deux signaux est contrôlée par un temps de retard  $\tau$ . Ce temps de retard peut être estimé comme le temps nécessaire pour que les perturbations de l'écoulement (de richesse par exemple) soient convectées jusqu'à la flamme. Mais l'interprétation du temps de retard peut fortement dépendre de la configuration étudiée et des phénomènes moteurs de l'instabilité. Ce modèle très répandu est à l'origine de nombreux dérivés [205].

Le principal défaut de cette caractérisation provient de la dépendance des paramètres aux différents points de fonctionnement du brûleur, de ses conditions limites etc. Il existe néanmoins des modèles plus complexes, prenant en compte notamment les effets non linéaires.

Dans tous les cas, les paramètres ( $n, \tau, \dots$ ) de ces modèles sont à déterminer de différentes manières :

**Détermination analytique :** Dans des cas simples (flamme laminaire plane, ou conique), et avec de nombreuses hypothèses, on peut évaluer analytiquement les fluctuations de dégagement de chaleur. Par exemple, en faisant l'hypothèse que le dégagement de chaleur peut s'écrire sous la forme  $\dot{\omega}_T = \rho_u S_L A_f \Delta h$  avec  $\rho_u$  la densité des gaz frais,  $S_L$  la vitesse de flamme,  $A_f$  la surface de flamme et  $\Delta h$  la chaleur de réaction. On peut alors différentier les perturbations agissant sur la flamme [78, 101], comme la variation de vitesse de flamme, les variations de surface [34, 52], de richesse [100].

**Détermination expérimentale :** Il est aussi possible d'utiliser diverses techniques expérimentales afin d'évaluer l'index d'interaction  $n$  et la phase  $\tau$ , en mesurant par exemple les fluctuations de chemiluminescence  $CH^*$  ou  $OH^*$  à chaque phase du cycle (voir Fig. 1.11 tirée de [146]) et en faisant l'hypothèse communément admise de linéarité entre l'émission du radical  $CH^*$  /  $OH^*$  et le dégagement de chaleur.

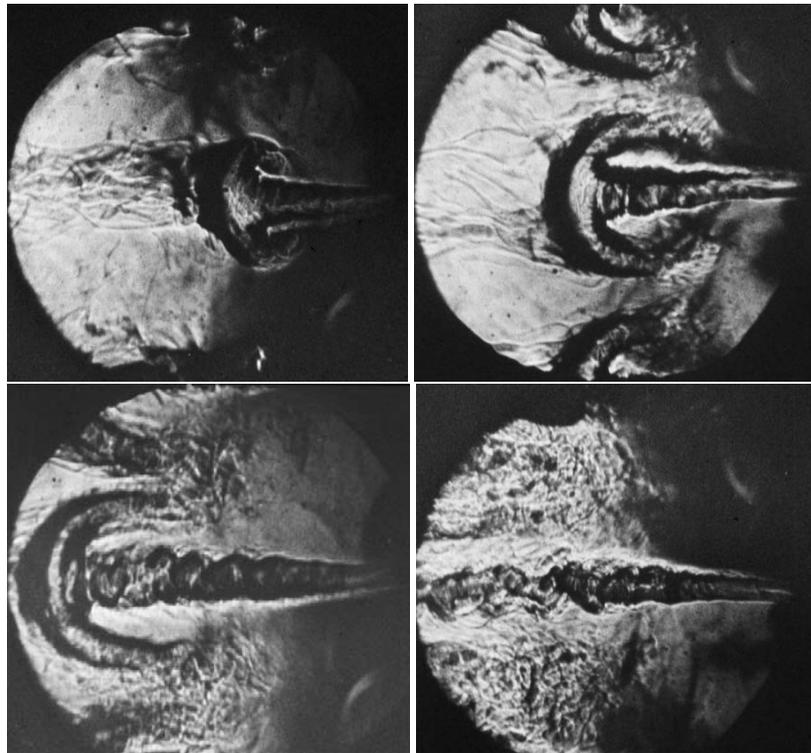


FIG. 1.11 - Images Schlieren à différentes phases du cycle d'instabilité par Poinso et al. [146].

**Détermination numérique :** Les méthodes de résolution directe (voir Chap. 1.1.3) comme la LES permettent d'avoir accès directement à toutes les grandeurs y compris le dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  et le signal d'excitation. Il reste à convenir d'une phénoménologie d'excitation. On peut par exemple pulser l'entrée principale de prémélange [64, 213] ou encore uniquement l'arrivée d'air [5, 6] ou de carburant. C'est dans cette optique (forcer l'alimentation en fuel) qu'a été développée spécifiquement la configuration test du projet *DESIRE* présentée dans la partie III.

### **Caractérisation systémique fermée : Instabilités auto-entretenues**

Une autre méthode numérique pour l'investigation des instabilités de combustions consiste à utiliser les techniques de résolutions directes pour simuler entièrement le système de combustion [112, 113, 175], comme résonateur.

Pour cela, il est nécessaire de repousser les entrées et les sorties du domaine de calcul suffisamment loin de la flamme, c'est à dire à des endroits où des conditions limites sont acoustiquement bien définies. Cela justifie les choix de domaines de calcul présentés dans la partie III. Ainsi, le code LES doit être capable de présenter les mêmes modes auto-entretenus que l'expérience, que ce soit en termes de fréquence mais aussi d'amplitude (plus difficilement toutefois).

C'est bien là le principal avantage de calculs "self-excited", à savoir d'être similaire à l'expérience : ils sont sensés capturer tous les modes à la condition qu'ils soient amplifiés. Les modes transverses, par exemple, sont naturellement prédits. Le défaut de cette méthode est d'être gourmande en ressources de calcul, à cause des domaines de calcul étendus et du temps nécessaire à l'établissement d'un cycle limite.

Expérimentalement, il n'est pas rare de devoir attendre quelques minutes pour qu'on brûleur révèle une instabilité auto-entretenue, à cause de l'inertie des phénomènes thermiques. Ce temps de simulation est hors d'atteinte pour les capacités de calcul d'aujourd'hui. Toutefois, il est possible de simuler quelques dizaines de cycles à une fréquence de l'ordre de la centaine de Hz, c'est à dire des temps de simulation de l'ordre de la seconde.

Ce type de simulation repose sur la précision de tous les sous-modèles utilisés mais aussi sur la qualité du traitement aux limites. Le rôle des conditions initiales peut se révéler être une difficulté supplémentaire. En effet, il existe de nombreux brûleurs non-linéairement instables ; dans ce cas, une perturbation initiale non négligeable doit être apportée pour que l'instabilité se développe.

De nombreuses simulations numériques d'instabilités auto-entretenues sont présentes dans la littérature [10, 82, 112, 113, 186], de même que des simulations forcées [64, 142], ce qui tend à prouver que les deux approches sont valides et peuvent se compléter suivant les cas. C'est la raison pour laquelle le Chap. 9 de cette thèse présentera des simulations non pulsées susceptibles de développer une instabilité auto-entretenue alors que le Chap. 10 aura attrait aux simulations forcées.

## **1.2 Enjeux industriels : la robustesse des turbines à gaz**

### **1.2.1 Les turbines à gaz**

Quelques aspects historiques sur l'apparition des turbines à gaz sont présentés avant de définir leur principe de fonctionnement, et enfin d'illustrer quelques applications de ce principe, dépendant du cahier des charges.

## Historique des turbines à gaz

### 150 AV J.C :

Le premier exemple connu de machine tournante mue par un principe semblable aux turbines à gaz a été inventé par un grec nommé *Hero* d'Alexandrie. L' "Aeolipile" (litt.'boule à vent'), était une sorte de roue à réaction (Fig. 1.12). Un chaudron clos produisait de la vapeur s'évacuant par une sphère. Cette sphère pouvait tourner autour des tuyaux d'alimentation en vapeur. Les tuyaux d'évacuation de la sphère mobile étant coudés, l'éjection de vapeur provoquait un mouvement de rotation.



FIG. 1.12 - L'aeolipile construit par Hero d'Alexandrie.

### 200 AV J.C. - 1232 AP J.C. :

Les chinois acquièrent la maîtrise de la poudre [48]. Cependant, aucune application connue n'a attiré aux machines tournantes, sauf peut-être les roues animées par des feux d'artifice.

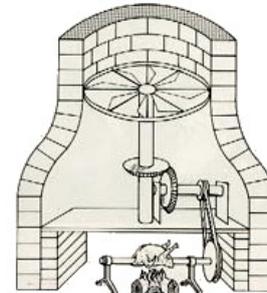


FIG. 1.13 - Le tournebroche de Léonard de Vinci.

### 1500 :

Léonard de Vinci parmi ses nombreuses inventions crée un "tournebroche" qui utilise la force motrice de l'écoulement de l'air dans une cheminée (Fig. 1.13).

### 1629 :

Un italien nommé *Giovanni Branca* développe un prototype de moulin à grain actionné par des jets de vapeur (Fig. 1.14).

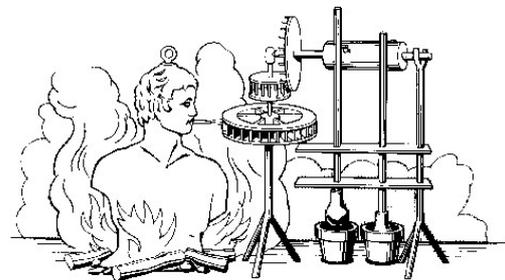


FIG. 1.14 - Le moulin à vapeur de Giovanni Branca.

### 1678 :

Le père belge *Ferdinand Verbiest*, missionnaire en chine, bâtit une carriole propulsée par la vapeur (Fig. 1.15).

### 1791 :

*John Barber* déposa en Angleterre le premier brevet pour le principe des moteurs à turbine.

### 1872 :

Le Dr. *Franz Stolze* (Allemagne) a été le premier à créer une vraie turbine à gaz, comprenant un compresseur axial à plusieurs étages, une chambre de combustion et une turbine sur le même arbre. Il testa son invention au début des années 1900.



FIG. 1.15 - La carriole à vapeur de Ferdinand Verbiest.

### Principe de fonctionnement

Une turbine à gaz est une machine tournante thermodynamique dont le rôle est de produire de l'énergie mécanique (rotation d'un arbre) à partir de l'énergie contenue dans un hydrocarbure (liquide ou gazeux). De façon succincte, on peut décomposer leur fonctionnement en suivant l'écoulement (Fig. 1.16) :

1. L'air est admis dans le compresseur, qui comme son nom l'indique met l'air sous pression.
2. Puis intervient la phase de mélange (de l'air comprimé avec un combustible) et de combustion qui, dans la chambre de combustion permet une augmentation de température et une dilatation des gaz.
3. Les gaz brûlés passent ensuite dans la turbine proprement dite, qui met en rotation l'arbre de la turbine.
4. Enfin, les gaz d'échappement sont évacués.

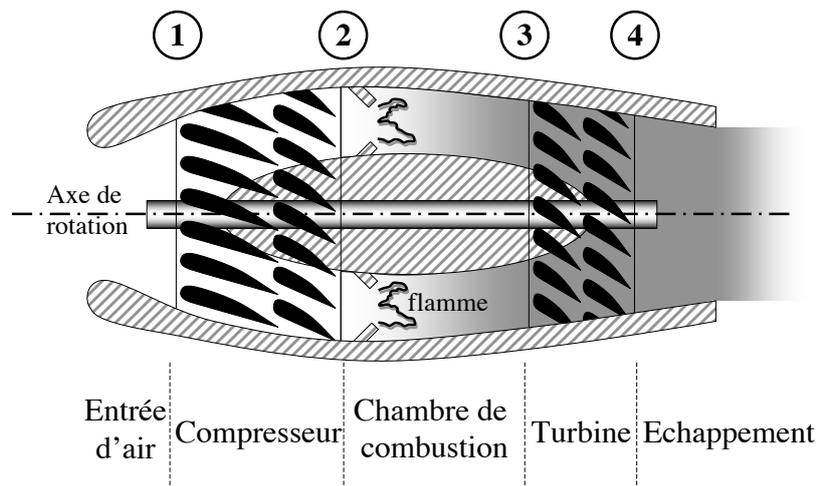


FIG. 1.16 - Schéma synthétique d'une turbine à gaz.

D'un point de vue thermodynamique, les turbines à gaz sont décrites par le cycle de *Brayton* (Fig. 1.17). Chaque étape du cycle peut être identifiée à une des parties de la turbine à gaz. Toutefois, le cycle n'est pas vraiment "bouclé" dans la mesure où les gaz brûlés sont évacués et non pas réinjectés dans le compresseur, contrairement à la vapeur d'eau dans les centrales nucléaires qui tourne en cycle fermé.

Dans la pratique, le cycle de *Brayton* correspondant à une vraie turbine à gaz est loin d'être idéal ; les frottements et la turbulence impliquent des pertes d'efficacité à chaque étape :

1. La compression est non isentropique : pour un rapport de pression donné, la température en sortie du compresseur est supérieure à la température du cycle idéal. Ce défaut peut être corrigé en utilisant un échangeur (ou "intercooler") souvent utilisé dans l'industrie automobile pour les moteurs turbocompressés.

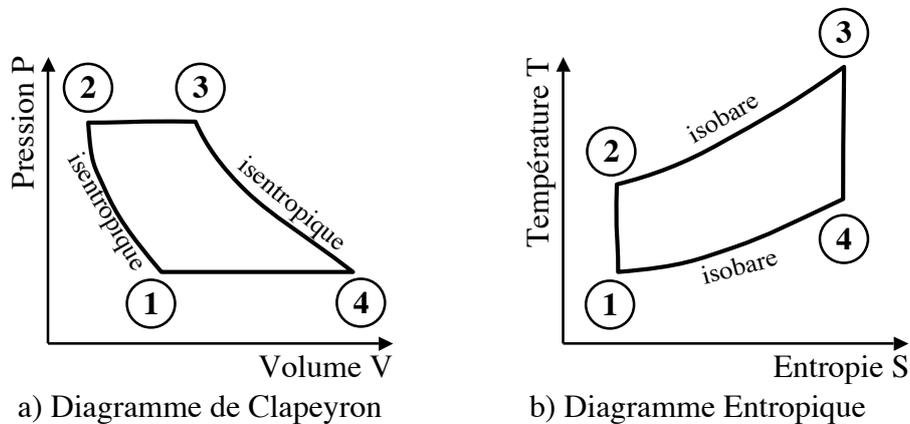


FIG. 1.17 - Cycle de Brayton idéal.

2. La dilatation non isobare : une perte de charge dans la chambre de combustion réduit l'expansion maximale possible.
3. L'expansion non isentropique : à cause du refroidissement de la structure, la température en entrée de la turbine est plus basse qu'idéalement, ce qui réduit aussi l'expansion.
4. Enfin, les gaz d'échappement ne sont pas complètement froids en sortie et contiennent encore de l'énergie.

Toutes ces différences par rapport au cycle idéal nous amènent à des questions de performance et de rendement des turbines à gaz. Ces points seront développés plus en profondeur dans la section 1.2.2.

### Applications du principe des turbines à gaz

Le principe de fonctionnement des turbines à gaz présente de nombreuses qualités, ce qui le rend particulièrement intéressant pour différentes applications (illustré par la Fig 1.18) :

- Les micro turbines (20W - 50kW) : c'est la compacité et la densité de puissance qui sont mises en avant. Les plus petites, de la taille d'un timbre poste et d'une puissance de 20 à 50W sont en développement par le *MIT* pour l'armée américaine [115] afin de servir de générateur électrique portatif, et ainsi de remplacer les batteries chimiques. D'autres modèles, d'une puissance supérieure (de l'ordre de quelques kW) sont fabriqués par des sociétés comme *Microturbo*, *M-dot* ou *Honeywell*. Ils sont destinés à être utilisés dans des drones, missiles ou groupes de puissance auxiliaires. D'autres petites turbines peuvent être employées dans l'industrie pétrolière pour le pompage des pipe-lines, dans les transports pour des "turbotrains" ou dans la propulsion de navires comme pour le "Queen Mary 2" et pour un grand nombre de frégates de l'armée américaine et britannique.
- Les turbines aéronautiques (2kW - 10MW) : Encore une fois, la compacité et donc la légèreté sont les points cruciaux dans ce domaine. Les turboréacteurs et turbo propulseurs, grâce à leur puissance spécifique supérieure ont peu à peu remplacé les moteurs à piston, qui se limitent aujourd'hui aux petits avions de tourisme (*Cessna*, *Robin*). Sur les avions de plus grande taille et sur les hélicoptères,

les motoristes aéronautiques (*Snecma, Rolls-Royce, G.E., Turboméca.*) couvrent la totalité de la gamme de puissance (8MW pour le TP-400). Plus marginalement, une turbine *Rolls-Royce* de 283kW (380cv) est rentrée en 2000 dans le livre Guinness des records pour avoir propulsé une moto MTT Turbine SUPERBIKE à 365km/h, en faisant la moto de série la plus puissante et la plus chère (185,000\$ U.S.).

- Les turbines "terrestres" (4MW - 340MW) : La légèreté et la compacité ne sont plus les premiers critères. C'est le rendement et la fiabilité qui deviennent primordiaux dans la production électrique (*Siemens, Alstom, G.E.*). Des puissances colossales sont développées dans un espace très restreint (jusqu'à 340 MW pour la *SGT5-8000H* de *Siemens*)

Cette thèse va se focaliser sur ce dernier point : les turbines à gaz terrestres. On gardera donc toujours à l'esprit les questions de fiabilité et de rendement.

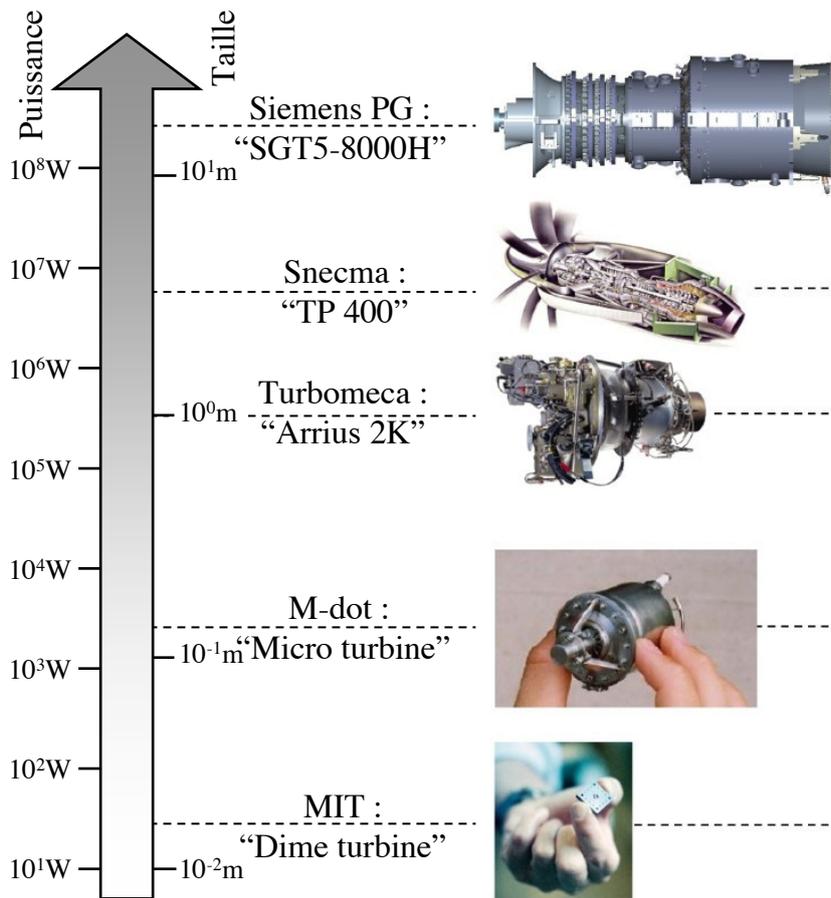


FIG. 1.18 - Différentes turbines à gaz pour différentes applications de 20W à 340MW.

## 1.2.2 Performance des turbines à gaz

### Rendement

Le rendement de base d'une turbine à gaz associée à un alternateur est assez faible (de l'ordre de 25% à 40%). Cela est dû au fait que l'énergie fournie par le combustible est détournée par le compresseur ou perdue sous forme de chaleur dans les gaz d'échappements. En observant le cycle de *Brayton* (Fig. 1.17), il est facile d'améliorer un peu le rendement en augmentant la température dans la zone primaire (début de la chambre de combustion), mais deux problèmes se posent alors :

- La pollution due aux hautes températures (section 1.2.3).
- La tenue des matériaux utilisés pour la structure (section 1.2.4).

L'amélioration de l'efficacité a donc nécessité l'emploi d'autres stratégies.

### Stratégies d'amélioration du rendement

La première stratégie pour améliorer le rendement des turbines à gaz consiste à récupérer par un cycle combiné la chaleur des gaz d'échappement (chauffage / production de vapeur), c'est la cogénération. Prenons un exemple : la turbine terrestre *Siemens "SGT5-4000F"* (Fig. 1.19) est actuellement l'une des plus puissantes disponibles pour la production d'électricité. En cycle simple (électricité seulement), elle peut générer jusqu'à 278MW (rendement de 39%). En cycle combiné (cogénération de vapeur d'eau), la puissance totale récupérée s'élève à 407MW (rendement de 57%).

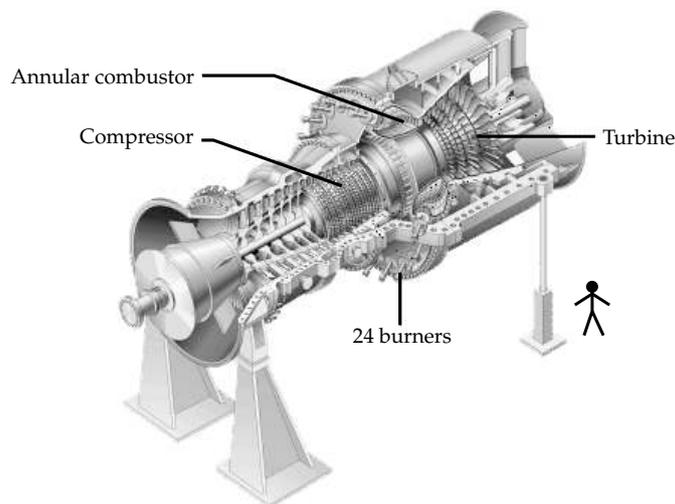
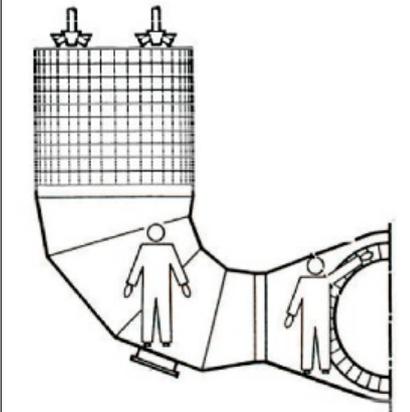
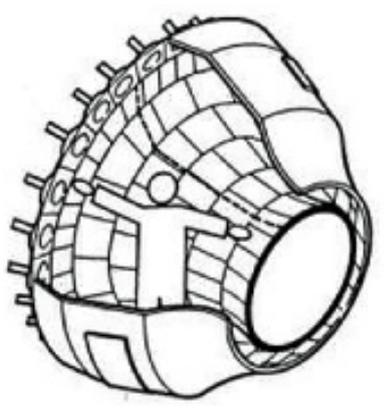


FIG. 1.19 - La turbine terrestre Siemens "SGT5-4000F".

Une autre stratégie consiste à limiter les pertes thermiques dans la chambre de combustion avant la turbine. Pour cela, deux principes simples peuvent être appliqués :

- Mieux isoler la chambre de combustion avec des tuiles en céramique au lieu des parois métalliques, ce qui limite la quantité d'air de refroidissement prélevé au niveau du compresseur.
- Augmenter la compacité des chambres de combustion et donc la densité de puissance.

Ces deux principes ont amené de grands changements dans la forme des turbines à gaz, passant d'une forme de "Silo" au début des années 90 à une forme "annulaire" à la fin des années 90 (Tab. 1.1). Les optimisations actuelles sont beaucoup plus fines et nécessitent des outils précis et rapides. C'est ce qui a poussé en avant les simulations numériques dans le processus de production, afin de limiter les coûteuses campagnes d'essais.

<b>Forme générale</b>	Silo (1990)	Annulaire (2000)
<b>Densité de puissance</b>	20MW/m <sup>3</sup>	150 – 200MW/m <sup>3</sup>
<b>Air de refroidissement</b>	> 30% du débit	< 10% du débit
<b>Parois</b>	Liner métallique	Tuiles céramique
<b>Schéma type :</b>		

TAB. 1.1 - Évolution du design des chambres de combustion.

Néanmoins, cette évolution a deux effets pervers :

- Les parois sont soumises à des charges thermiques plus importantes, susceptibles de fluctuer et d'entraîner une fatigue du matériau plus rapide (voir section 1.2.4).
- L'augmentation de densité de puissance renforce la possibilité d'un couplage thermo-acoustique (évoqué section 1.1).

Un panorama assez exhaustif des différentes topologies de turbines à gaz est donné par *Lefèbvre* [94].

### 1.2.3 Pollution

#### Quels polluants ? Quelles normes ?

Depuis environ une vingtaine d'année, une contrainte environnementale est imposée par les autorités régulatrices. Cette contrainte impose des limitations sur les émissions de polluants produites par les processus de combustion industrielle. Les réglementations sont complexes car elles modulent ces limita-

tions en fonction de type d'installation (four, turbines à gaz), mais aussi de leur puissance et du type de combustible utilisé. Néanmoins, toutes ces normes vont dans la même direction : limiter au maximum le rejet de  $SO_2$  (irritant, pluies acides), de  $NO_x$  (irritant, promoteur de l'ozone troposphérique, pluies acides) et de suies. Par exemple, la norme européenne (mise en vigueur d'ici la fin de la décade) limite les taux de  $NO_x$  à 25ppm pour les carburants liquides (fuel lourd / kérosène) et 10ppm pour le gaz naturel. Aux réglementations supra étatiques peut s'ajouter une réglementation nationale voir régionale (comme en Californie) renforçant les limitations existantes. La réglementation locale ajoute le plus souvent des limitations sur les émissions de  $CO$  (toxique), d'imbrûlés et autres composés organiques volatiles (cancérogènes), qui sont absents par exemple des directives européennes et américaines.

### Réponses aux contraintes environnementales

Afin de pouvoir satisfaire les contraintes environnementales et anticiper leur durcissement, une alternative est apparue aux industriels :

- Soit concevoir de nouvelles chambres de combustion (puisque c'est là que la formation de polluants a lieu) pour parvenir à passer sous les minima imposés par les normes.
- Soit installer un système catalytique en sortie des turbines qui réduirait les niveaux de  $NO_x$ . Le surcoût d'un tel système peut être évalué à environ un million de dollars pour l'installation, sans compter un entretien (consommables) estimé à 50,000 \$ par an. En rapport du prix total d'une turbine à gaz, ce surcoût n'est pas acceptable. Citons par exemple la centrale de *Herdecke*, près de *Dortmund*, où *Siemens* installera d'ici 2007 une *SGT5-4000F* pour 220 M\$.

Les constructeurs ont donc entrepris de revoir leurs dessins de chambre de combustion avec d'autres objectifs que le rendement dans leur cahier des charges. En effet, si auparavant l'amélioration de l'efficacité induisait un effet positif sur les polluants comme le  $CO$  et les imbrûlés (voir les tendances illustrées sur la Fig. 1.20), il n'en est pas de même pour les oxydes d'azotes ( $NO_x$ ). C'est pour cette raison que des efforts particuliers ont été menés pour limiter au maximum les émissions de ce polluant particulièrement nocif. Il existe plusieurs mécanismes de production des  $NO_x$  [67, 117, 122] avec pour principaux :

- $NO$  "thermique", identifié par *Zel'dovitch*. Son taux de production est fonction de la température et du temps de résidence. Sa production dans la chambre est en grande partie relié à la température de la zone primaire (voir les tendances illustrées sur la Fig. 1.20). La croissance des émissions y est exponentielle au delà de 1850 K, car les hautes températures favorisent l'oxydation du di-azote de l'air. Il est la source majeure de  $NO_x$  produit.
- Le  $NO$  "prompt" (*Fenimore*), est produit au sein de la flamme. Sa contribution est aussi importante, surtout a haute pression.
- Le  $NO$  produit par le mécanisme faisant intervenir l'acide nitreux  $N_2O$ , reste marginal dans la plupart des cas.
- Les combustibles lourds tel le fuel peuvent contenir quelques pourcents de composés azotés qui réagissent durant la combustion pour former des  $NO_x$ . Ce mécanisme est absent pour le gaz naturel.

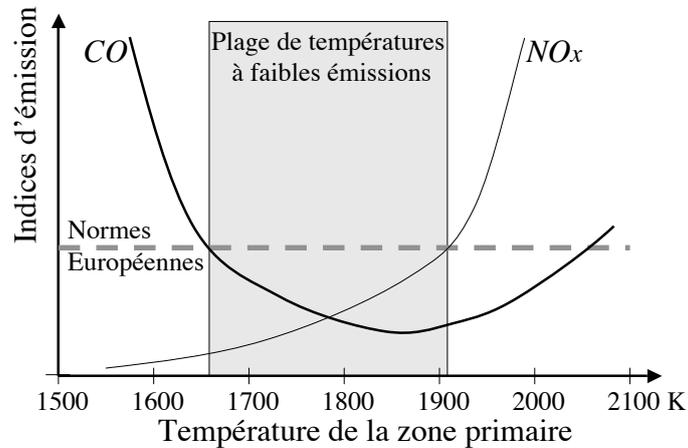


FIG. 1.20 - Evolution des émissions de polluants en fonction de la température dans la zone primaire (tendances).

Les techniques de réduction des  $NO_x$  sont multiples. Elles sont pour certaines lourdes ou encombrantes et ne peuvent être appliquées qu'aux turbines fixes qui sont les plus contraintes sur le plan environnemental. Les systèmes d'injection d'eau ou d'ammoniaque (réaction de réduction de  $NO$  dans les gaz brûlés) ayant montré leurs limites tant en efficacité qu'en termes de coût, les constructeurs ont opté pour un changement radical de technologie des chambres de combustion.

Les régimes non-prémélangés utilisés jusque là faisaient apparaître des flammes de diffusion qui, en brûlant à la stœchiométrie, induisait de très hautes températures ( $2400K$ ) et par là même favorisaient la production de  $NO_x$  "thermique". Le passage à la combustion prémélangée (ou partiellement prémélangée) pauvre permet de s'assurer d'une température de zone primaire suffisamment basse et de limiter la production de  $NO_x$  [58]. Les brûleurs fonctionnant en prémélange pauvre se sont ainsi généralisés dans toutes les productions de turbines à gaz industrielles. Ce choix technologique a permis de réaliser des gains notables sur les émissions  $NO_x$  mais pose toujours le problème de la stabilité des flammes.

### Stabilité réduite des flammes

Les températures de flamme plus basses induisent une interaction (extinction) plus forte avec les parois et peuvent poser des problèmes d'accrochage de la flamme (voir l'article soumis au 31<sup>st</sup> *Symposium International on Combustion* présenté en annexe C). Les flammes très pauvres sont souvent proches de l'extinction pauvre [71] ou du "lift-off" [118, 120, 139, 207] (soufflage dû à vitesse de flamme réduite). La marge de stabilité de ces flammes est très réduite et l'on constate une dynamique de flamme très instationnaire. Dans ces conditions, les flammes sont sensibles aux perturbations de l'écoulement et en particulier aux fluctuations acoustiques. En effet, le confinement des chambres permet l'expression de modes propres acoustiques [133]. L'apparition d'instabilités thermo-acoustiques provient du couplage résonnant entre l'acoustique des chambres et la combustion instationnaire. Les instabilités de combustion (introduites section 1.1) se caractérisent par une pression oscillante de grande amplitude, ainsi qu'une forte dynamique de flamme. Le mouvement de la flamme peut aller jusqu'à induire une extinction ou même un

retour de flamme dans le système d'injection (flashback [85, 95, 191, 202, 211]). Des diagrammes heuristiques sont utilisés pour évaluer le risque de retour de flamme dans son régime stationnaire (critère de Strscheletzky [53]) en fonction de paramètres de l'écoulement (nombre de swirl [70]) et de la géométrie (rapports de sections de sortie du brûleur et du nez central). Rien de tel n'existe pour prendre en compte les fluctuations instationnaires (comme c'est le cas pour les instabilités de combustion).

Les vibrations engendrées peuvent endommager le système et dans tous les cas, induisent une fatigue préjudiciable à la longévité et à la fiabilité des systèmes. L'étude de ces instabilités se place alors comme une question centrale pour les applications actuelles des turbines à gaz. L'accroissement de la pression dans les chambres à 40 bar pour les turboréacteurs, 10 à 30 bar pour les turbines terrestres est un élément favorisant l'effet destructeur des instabilités. En effet avec une augmentation notable de la densité d'énergie contenue dans les foyers, les instabilités produisent des niveaux de fluctuations proportionnellement plus élevés.

#### 1.2.4 La fatigue des matériaux

Nous avons vu que la fiabilité était au coeur des préoccupations des industriels du monde des turbines à gaz. Les contraintes subies par la structure de la chambre de combustion, même en deçà des niveaux de rupture sont un facteur fondamental de vieillissement prématuré : c'est la base de la fatigue des matériaux.

L'objectif, ici, est principalement d'identifier quelles sont les données de base permettant d'évaluer les niveaux de fatigue. Ainsi, quelques aspects historiques sur la fatigue des matériaux sont présentés avant de définir la notion de "fatigue", et enfin quelles sont dans les faits les conséquences sur les turbines à gaz.

**Historique de la fatigue**

**1829 :**

*Wilhelm Albert*, directeur des mines de *Clausthal*, en Allemagne, observe le premier le phénomène de destruction des chaînes de levage en fer.

**1839 :**

Le terme de "fatigue" est introduit par le français *Jean-Victor Poncelet*, décrivant lors de ses cours à l'école militaire de *Metz* les métaux comme étant fatigués par les charges.

**1843 :**

Un train transportant des participants aux célébrations de l'anniversaire du roi *Louis-Phillippe* revenant de *Versailles* dérailla et prit feu (53 morts). L'écossois *William Rankine* reconnût [160] alors l'importance de la concentration des contraintes dans ses études sur les essieux (Fig. 1.21).

**1849 :**

*Eaton Hodgkinson* reçoit un prix du parlement britannique pour son travail mettant en évidence l'effet de charges discontinues sur le fer.

**1860 :**

Les premières études systématiques de durée de vie par *Sir William Fairbairn* et *August Wöhler* amènent à l'idée d'une fatigue limite et proposent l'utilisation de courbes  $S - \mathcal{N}$  dans l'ingénierie mécanique ( $S$  : contraintes -  $\mathcal{N}$  : nombre de cycles de charge).

**1903 :**

*Sir James Ewing* démontre [56] l'origine de la rupture par fatigue dans les micro-fissures (Fig. 1.22).

**1910 :**

Le français *Olivier Basquin* clarifie la forme des courbes  $S - \mathcal{N}$  (Fig. 1.23).

**1954 :**

*Coffin* explique la croissance des fissures par le caractère plastique des contraintes sur le bord des arêtes [35].

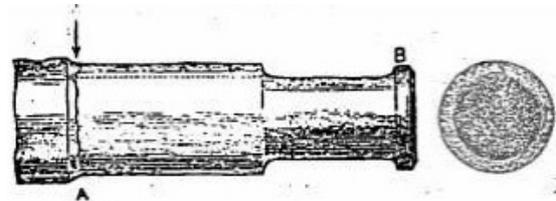


FIG. 1.21 - Étude de la fatigue d'un essieu de locomotive par *William Rankine* [160].

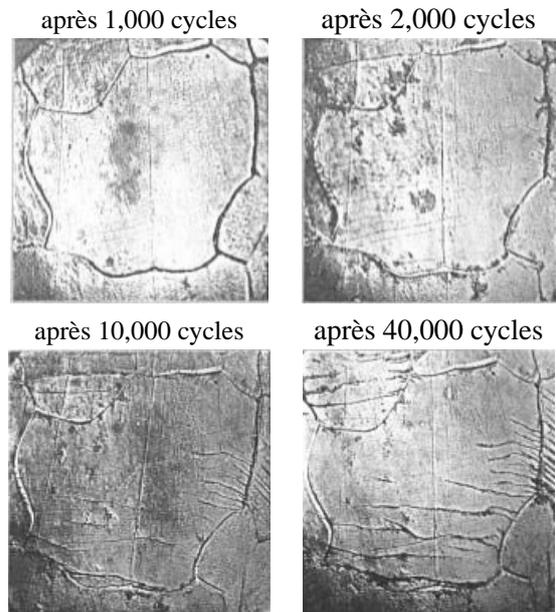


FIG. 1.22 - Évolution des fissures de fatigue selon le nombre de cycles de contraintes par *Ewing* [56]

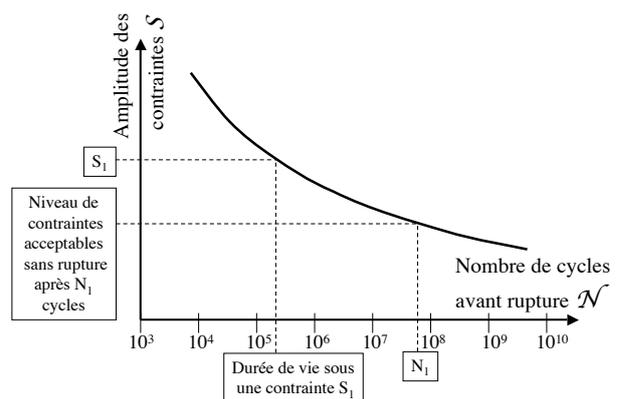


FIG. 1.23 - Courbes  $S - \mathcal{N}$  introduites par *Sir William Fairbairn* et *August Wöhler* puis par *Olivier Basquin*.

## Principe de fatigue des matériaux

La fatigue est un phénomène conduisant à la rupture d'un matériau sous l'action de contraintes cycliques, répétées ou alternées dont la valeur maximale est inférieure à la résistance à la traction du matériau. Les paramètres de la fatigue sont le nombre de cycles, le type et la composition du matériau et l'intensité de la charge appliquée.

Lorsque l'on exerce une contrainte continue (par exemple une traction) sur une pièce métallique, celle-ci commence à s'endommager par déformation plastique, à partir d'une contrainte appelée limite élastique. En théorie, il suffirait de rester en dessous de cette contrainte pour éviter l'endommagement de la pièce. Dans la pratique, on prend souvent un coefficient de sécurité important, par exemple on dimensionne la pièce de sorte qu'elle ne subisse jamais, en condition normale d'utilisation, une contrainte supérieure à la moitié de la limite élastique.

Cependant, des concentrations de contrainte apparaissent essentiellement :

- aux angles vifs de la pièce, aux entailles ;
- aux trous : perçage, ou encore pore (microbulle, défaut du matériau) ;
- aux précipités (points durs à l'intérieur de la matière).

La limite élastique peut être dépassée localement, conduisant au phénomène d'écrouissage : le matériau se durcit. Ce mécanisme a été étudié par *Frank* [59] et *Read* [162] et est communément appelé "sources de *Frank-Read*". Si les contraintes sont répétées (contraintes cycliques), à partir d'un certain moment, la zone écrouie devient trop dure et ne peut plus supporter les déformations même faibles : une fissure s'amorce. Puis, chaque fois que la contrainte se répète, la fissure s'agrandit, et cela mène rapidement à la rupture de la pièce. Si l'on regarde la surface de rupture au microscope, on observe un aspect typique : des stries globalement parallèles appariées voir (Fig. 1.22 dans l'étude d'*Ewing* [56]), correspondant à la propagation de la fissure à chaque sollicitation, puis une zone d'arrachement correspondant à la rupture finale. Globalement, le temps de germination de la fissure représente 90% de la durée de vie de la pièce, la propagation de la fissure représente 10%. Il est important de comprendre que durant 90% de la durée du phénomène, on ne voit strictement rien : il se produit juste une modification de la structure interne du métal.

Le phénomène de fatigue peut être aggravé par la corrosion : un matériau résistant très bien à la fatigue et très bien à la corrosion dans un milieu donné, peut se rompre de manière catastrophique sous l'effet combiné de la fatigue et de la corrosion.

La prévention de la rupture par fatigue repose essentiellement sur trois points :

- réduction des concentrations de contrainte : éviter les angles vifs, préférer les arrondis, utiliser des trous larges, polir la surface pour éviter les aspérités.
- choix du matériau : préférer des métaux peu alliés pour éviter la présence de précipités (compromis à trouver avec les autres propriétés nécessaires).
- surveillance des pièces sensibles et changement préventif. Malheureusement, la surveillance de pièces mécaniques au sein d'une turbine à gaz est utopique et le changement préventif de pièces diminue le temps où la machine est réellement en exploitation.

## La fatigue thermomécanique

Dans le cadre des turbines à gaz, comme pour d'autres applications à haute température, la fatigue mécanique pure n'est plus la seule mise en jeu. Il faut considérer l'impact de la thermique. On parle alors de fatigue "thermomécanique". Expérimentalement, on peut soumettre une "éprouvette" à une batterie de tests

- L'approche la plus simple consiste à effectuer plusieurs tests de fatigue mécanique isotherme, balayant une gamme de déformations pour estimer la durée de vie du matériau [88, 183]. Toutefois, cela permet mal de capturer les micromécanismes endommageant le matériau à cause des fluctuations de température.
- Une deuxième approche simple consiste à soumettre la structure à des charges thermiques et mécaniques fluctuant d'abord en phase, puis en opposition de phase [25] (Fig. 1.24). Cela revient à décomposer les déformations subies par la structure en une somme de déformations dues à la charge thermique et de déformations dues à la charge mécanique (Eq. 1.4), avec  $\mathcal{E}_{tot}$ ,  $\mathcal{E}_{th}$ ,  $\mathcal{E}_{mech}$  correspondant respectivement aux déformations totales, thermiques et mécaniques,  $T_0$  la température de référence à laquelle le test débute, et  $\alpha$  le coefficient d'expansion thermique du matériau.

$$\mathcal{E}_{tot} = \mathcal{E}_{th} + \mathcal{E}_{mech} = \alpha(T - T_0) + \mathcal{E}_{mech} \quad (1.4)$$

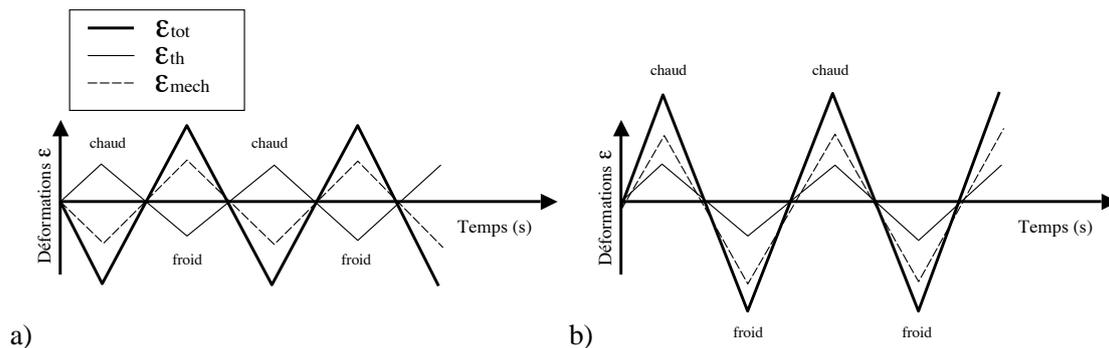


FIG. 1.24 - Déformations dues à des charges thermique et mécanique en opposition de phase a) et en phase b) pour l'évaluation de la fatigue thermomécanique.

Pour ce qui est de la modélisation de la fatigue, un panorama exhaustif des différents critères est donné dans différents articles et ouvrages [9, 98, 190]. On peut tout de même citer :

- Des approches utilisant des critères énergétiques [188]
- Des approches pratiques "macro-micro" [47] faisant le lien entre les critères locaux et une estimation de la durée de vie d'une pièce.
- Des approches globales prenant en compte un effet de la moyenne des contraintes [27]

Toutes ces méthodes d'évaluation de la fatigue ont un dénominateur commun : elles requièrent les mêmes données de base concernant les charges thermiques et mécaniques. En d'autres termes, il faut identifier les causes des pressions et des flux thermiques s'exerçant sur la structure et trouver un moyen de les évaluer précisément de manière instationnaire.

## La fatigue et les turbines à gaz

Pour les turbines à gaz spécifiquement, deux types de pièces subissent le plus de fatigue :

- Les aubes des turbines. Elles sont surtout soumises aux fluctuations de température des gaz brûlés sortant de la chambre de combustion. Cela est surtout sensible dans les turbines aéronautiques, car la compacité extrême des moteurs et la richesse supérieure induit une température non uniforme en sortie de chambre.
- Les parois de la chambre de combustion elle-même. Situées au plus proche de la flamme, elles subissent pleinement les variations de flux thermique, mais surtout le bruit intense que peut émettre une flamme lors d'instabilités de combustion (voir chapitre 1.1). De plus, dans le but d'améliorer le rendement (chapitre 1.2.2), les fabricants de turbines terrestres s'attachent à limiter la quantité d'air allouée au refroidissement. Les parois sont ainsi mises à rude épreuve. Notre étude étant focalisée sur les turbines terrestres, on se concentrera donc sur la fatigue des parois de la chambre de combustion.

Pour maximiser la durée de vie de la structure de la chambre, les industriels ont tout d'abord cherché à optimiser les formes des structures et les matériaux employés. Ils se sont donc orientés vers des matériaux de pointe comme les céramiques (qui équipent le bouclier thermique de la navette spatiale) qui supportent beaucoup mieux les fluctuations de chaleur (voir Fig. 1.25).

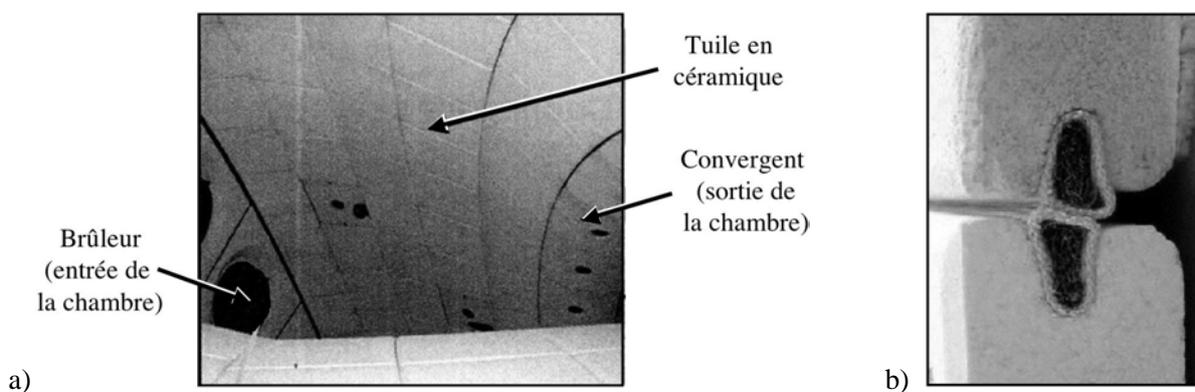


FIG. 1.25 - Vue interne d'une chambre de combustion annulaire équipée de tuiles en céramique a) et zoom sur les joints céramiques entre deux tuiles b).

Parallèlement, ils se sont attachés à trouver un moyen d'évaluer les causes des fluctuations de température et de pression qui pouvait survenir au sein des turbines et quelles implications cela pourrait avoir sur la structure. c'est ainsi qu'apparaît la nécessité de coupler la mécanique des fluides instationnaire et les calculs de structure.

## 1.3 Nécessité du couplage fluide / structure

### 1.3.1 Le projet européen *DESIRE*

#### Le projet

C'est dans cet environnement où les problématiques scientifiques et techniques deviennent de plus en plus pointues que se place le projet européen *DESIRE* : "DESIGN and demonstration of highly RELIABLE low  $NO_x$  combustion systems for gas turbines". Dans la droite ligne des accords de *Kyoto* (1997), les objectifs de ce projet sont :

- La réduction des émissions de  $NO_x$ , en passant de 25 ppm à 15 ppm à court terme<sup>1</sup>, puis 9 ppm dans un second temps (pour la combustion du méthane), sans utiliser de système catalyseur qui s'avérerait coûteux (voir section 1.2.3).
- L'utilisation plus efficace des combustibles gazeux et liquides, réduisant ainsi les émissions de  $CO_2$  (gaz à effet de serre).
- La production d'électricité "propre" allant dans le sens de la protection de l'environnement.
- L'amélioration du rendement des turbines à gaz en cycle combiné, avec pour objectif de passer de 55% à plus de 60% à moyen terme.
- L'amélioration de la fiabilité des turbines, actuellement de 95%, pour atteindre 97% à moyen terme, via la suppression ou la maîtrise des instabilités de combustion.

Ce dernier point est crucial : une fiabilité de 95% signifie que la turbine à gaz peut rester en fonctionnement nominal pendant 95% du temps. L'entretien ou les réparations des éventuelles pannes ne représentent que les 5% restant. Dès lors, un gain de fiabilité de 1% sur une turbine terrestre comme la *SGT5-4000F* représente des gains d'exploitations de l'ordre du million de dollars par an. C'est pourquoi le projet *DESIRE* donne une importance particulière au couplage fluide / structure qui pourrait permettre de comprendre précisément les phénomènes sollicitant les parois de la chambre de combustion, et d'évaluer la durée de vie des matériaux la composant. Ceci constitue le premier pas vers une optimisation fine de sa conception.

#### Les partenaires

Ce projet européen réunit différents acteurs du monde scientifique et de l'industrie, à savoir<sup>2</sup> :

- *SIEMENS PG* (Allemagne) coordonne le projet et amène son expérience dans la réalisation d'un brûleur test pour étudier les interactions fluide / structure.
- *L'Université de Twente* (Pays-Bas) conçoit et réalise ce brûleur test ainsi que la campagne expérimentale et les études vibratoires de sa structure.

---

<sup>1</sup>Court terme : moins de 5 ans - Moyen terme : entre 5 et 10 ans - Long terme : plus de 10 ans.

<sup>2</sup>La liste des actions de chacun des partenaires n'est pas exhaustive, elle permet juste de situer la place de la LES dans ce projet européen.

- Le *CERFACS* (France) est en charge des simulations numériques instationnaires (simulations aux grandes échelles, voir partie II) de cette configuration d'essai.
- Le *DLR* (Allemagne) teste trois brûleurs d'une vraie turbine à gaz dans une autre configuration d'essai (à Berlin) et effectue les simulations numériques RANS de la thermique (à Stuttgart).
- *CIMNE* (Espagne) calcule l'effet des charges thermiques et mécaniques sur des éléments de la structure de la turbine à gaz réelle.
- *KEMA* (Pays-Bas) effectue un monitoring complet d'une turbine à gaz réelle en service.
- *E-On* (Royaume Uni, anciennement Powergen) prête ses installations au monitoring de *KEMA*.

C'est l'étude du brûleur test conçu par l'*Université de Twente* qui constituera le coeur de notre étude présentée dans la partie III.

### Outils mis en oeuvre dans l'étude du brûleur-test

De nombreuses méthodes expérimentales sont mises en oeuvre pour l'étude du brûleur-test installé à l'*Université de Twente*. Ces outils de mesure seront détaillés dans le chapitre 7.1, mais toutefois on peut les résumer rapidement ici selon leur application :

**Pression dynamique :** plusieurs sondes "kulite" sont installées dans la chambre de combustion (3) mais aussi dans le plenum (1) afin d'identifier d'éventuels modes instables.

**Température et flux de chaleur :** de nombreux thermocouples permettent de vérifier la température d'entrée des gaz frais, celle en sortie de la chambre de combustion, mais aussi la température des gaz au sein du canal de refroidissement qui entoure la chambre, donnant ainsi une première approximation des pertes thermiques.

**Hydrodynamique :** la vélocimétrie laser doppler (LDV) est employée pour mesurer les champs de vitesse moyenne et RMS. Malheureusement, les équipements disponibles à l'*Université de Twente* ne permettent de faire des mesures qu'à basse vitesse. On peut toutefois comparer les résultats de la LES à froid avec ceux obtenus dans un tunnel à eau par similitude de *Reynolds*.

**Position et dynamique de la flamme :** la Chemiluminescence  $CH^*$  est la principale méthode optique permettant de situer et de quantifier la flamme. On peut admettre que la relation entre le rayonnement  $CH^*$  de la flamme et son dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  est linéaire.

**Vibrations du "liner" :** un vibromètre laser est installé sur le coté de la chambre afin de mesurer les vitesses de déformation de la paroi interne flexible de la chambre, paroi qu'on nomme abusivement "liner".

### 1.3.2 Stratégies de couplage

Le chapitre 1.2 a mis en évidence les enjeux industriels qui amènent à la nécessité du couplage fluide / structure. Cela constitue un des objectifs du projet *DESIRE*. Cependant, en admettant qu'on puisse résoudre les problèmes fluide et structure séparément, les techniques de couplage ne sont pas complètement évidentes. Il faut s'attacher à établir des stratégies de couplage.

**Couplage one-way / two-way**

On peut dans un premier temps distinguer le couplage dit "one-way" du couplage dit "two-way".

- Dans le premier, les fluctuations de pression dues au fluide excitent la structure et provoquent sa vibration, mais on néglige l'effet retour de cette vibration sur le fluide (Fig. 1.26-a). On fait ainsi l'hypothèse des petites déformations de la structure, ne provoquant pas de déplacement significatif de la paroi qui nécessiterait un mouvement de maillage du domaine fluide.
- Dans le second, on calcule les déplacements de la structure dus aux fluctuations de pression du fluide, et on impose ces déplacements sur les conditions aux limites du domaine fluide (Fig. 1.26-b). L'hypothèse des petites déformations n'est plus nécessaire dans la mesure où la géométrie du domaine fluide est modifiée (maillage mobile).

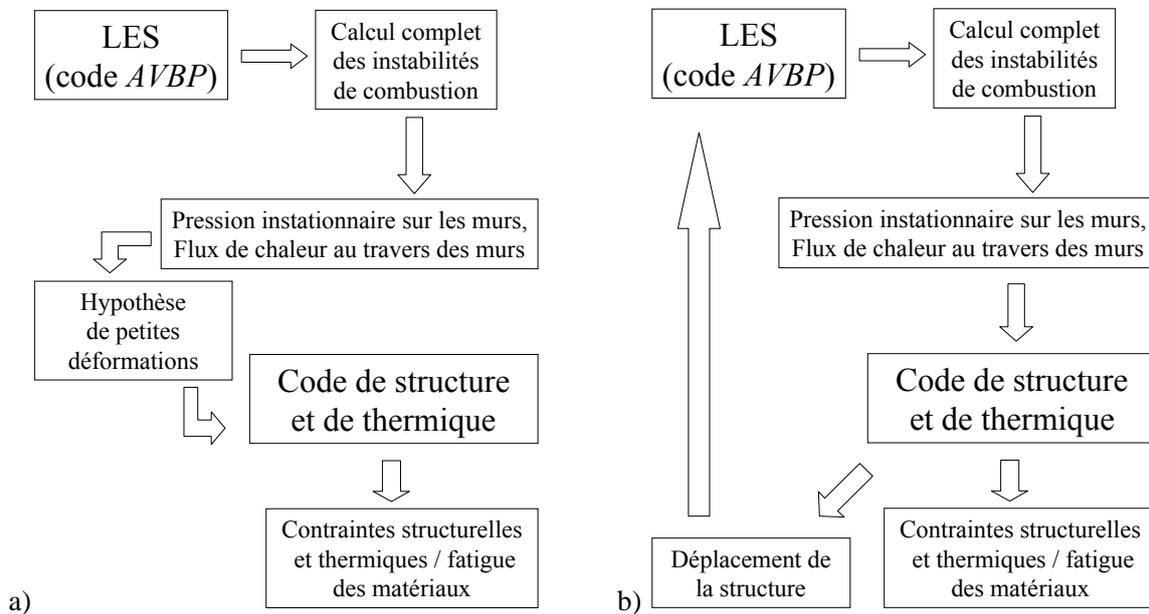


FIG. 1.26 - Schéma de principe du couplage one-way (a) et two-way (b).

**Stratégies temporelles**

Le couplage "two-way" amène le plus souvent à des procédures de couplage temporel. A chaque pas de temps, les informations sont échangées entre le code de fluide et le code de structure. Le pas de temps fluide étant beaucoup plus petit que celui utilisé par la structure (facteur 1000 entre les deux !), on peut se contenter d'échanger les informations de couplage moins souvent. Ce type de procédure est décrit par Piperno [135, 136] et est utilisé surtout en aéroélasticité, comme pour prédire le flottement des ailes [15, 193] (voir Fig. 1.27-a) ou la réponse d'une structure de génie civil comme le fameux pont de Tacoma-Narrows (voir Fig. 1.27-b). Cette stratégie est la plupart du temps associée à des maillages mobiles, comme pour les calculs des moteurs automobiles [203].

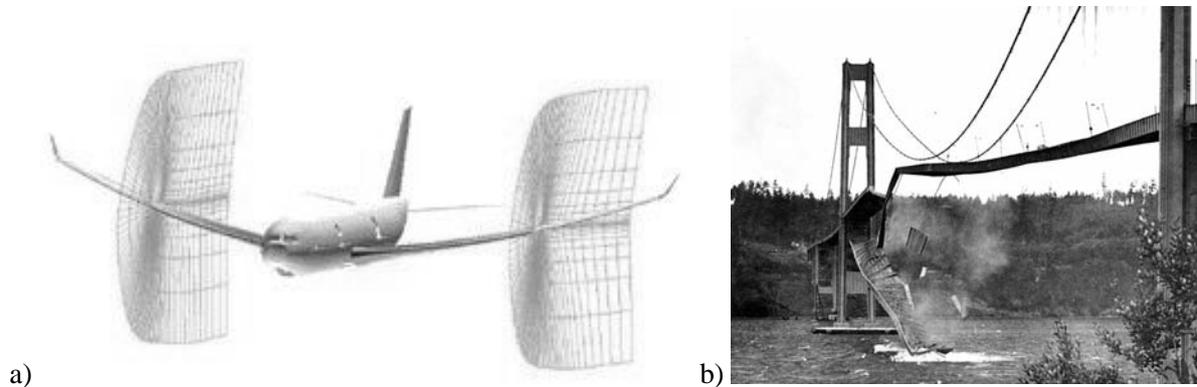


FIG. 1.27 - Exemples de couplage fluide / structure en aéroélasticité : a) Flottement des ailes de l'A340 étudié au DLR [193] ; b) Pont de Tacoma-Narrows.

### Stratégies fréquentielles

Pour l'évaluation de la fatigue des matériaux, le couplage "one-way" semble plus approprié. En effet, les déformations sont très petites et on peut se contenter de voir l'impact du fluide sur la structure sans boucle retour. Dès lors, il suffit de prédire de façon fréquentielle la répartition des charges mécaniques (pression) et thermiques (température), en faisant l'hypothèse que ces charges sont périodiques. On peut ainsi évaluer la fatigue des matériaux [27, 26] via les courbes  $S - N$  (voir chap. 1.2.4). Il est intéressant de noter que non seulement l'amplitude mais aussi la fréquence [4] des fluctuations des charges thermomécaniques sur la structure sont importantes pour l'évaluation de la fatigue des matériaux.

Cette thèse se place dans cette optique de couplage one-way, où un signal relativement court (quelques dizaines de ms) mais le plus précis possible sera "périodisé" pour être transmis à un code de structure (par exemple ANSYS).

## 1.4 La LES dans le couplage fluide / structure

### 1.4.1 La simulation aux grandes échelles comme candidat idéal

#### Capacités prédictives de la LES

L'optique du couplage one-way requiert une méthode de mécanique des fluides numérique (CFD) pouvant prédire de manière complètement instationnaire les fluctuations de pression et de flux de chaleur aux parois des chambres de combustion des turbines à gaz. Les méthodes employées aujourd'hui pour la simulation de ces écoulements sont la plupart du temps basés sur une formulation moyennée des équations de la mécanique des fluides, dite "RANS" (Reynolds Average Navier-Stokes). Ces méthodes RANS, robustes et peu coûteuses en temps de calcul présentent un attrait évident, en permettant d'effectuer de nombreux calculs et d'obtenir des tendances rapidement selon divers paramètres. Toutefois, elles

présentent trois inconvénients majeurs :

- Tout d’abord, la nature très non-linéaire de la combustion turbulente s’accommode assez mal du caractère moyenné des méthodes RANS [132, 147]. Ces méthodes sont ainsi souvent prises en défaut.
- Ensuite, les méthodes RANS sont inadaptées au calcul de fluctuations de pression. Dans la plupart des cas, le bruit est évalué en utilisant des analogies entre énergie cinétique turbulente et fluctuations de pression (type analogie de *Lighthill*, voir l’historique, chap. 1.1.1). Il est sans doute possible de coder une équation de transport pour  $\overline{P^2}$  et ainsi en tirer les  $P_{\text{RMS}}$  mais aucune référence bibliographique traitant de cette technique n’a été trouvée.
- Enfin, les grandes échelles d’un écoulement turbulent présentent de fortes instationnarités qui se prêtent mal à la modélisation, contrairement aux petites échelles dont le caractère instationnaire apparaît comme plus universel [29, 87, 99]

La simulation aux grandes échelles ou "LES" est née de ce constat : tenter de modéliser le caractère universel des petites échelles et calculer explicitement les grandes échelles<sup>3</sup>. En effet, la simulation numérique directe (ou "DNS") de toutes les échelles de la cascade de *Kolmogorov* est en effet hors de portée en termes de temps de calcul.

La LES compressible réactive apparaît donc comme le candidat idéal pour fournir les pressions et flux de chaleur instationnaires au code de structure. Dans le cas du couplage one-way, la longueur réduite du signal fourni par la LES n’est pas aussi pénalisant qu’il n’y paraît. En effet, dans le cadre d’une instabilité de combustion, on peut parfaitement considérer le signal comme harmonique car un nombre fini de fréquences ressortent nettement du spectre.

Toutefois, la précision requise pour pouvoir envisager d’utiliser le signal de la LES pour le couplage fluide / structure est particulièrement élevée, et fournir un tel niveau de précision dans une LES réactive pose des difficultés non négligeables.

---

<sup>3</sup>La présentation détaillée de cette méthode fera l’objet de la partie II.

## Difficultés pour une LES réactive précise

Produire des résultats précis en LES n'est pas si simple qu'il n'y paraît [24]. La table 1.2 résume l'ensemble des problèmes rencontrés et propose quelques éléments pour résoudre ces problèmes.

	Problèmes	Solutions partielles	Fiabilité <sup>4</sup>	Références <sup>5</sup>
ENTRÉES	1/ Avoir la bonne géométrie	Discuter souvent avec la partie expérimentale.	*****	[186, 108]
	2/ Avoir les bons débits	Condition limite d'entrée caractéristique relaxant le débit.	*****	[124, 123]
	3/ Avoir les bons profils d'entrée	Ensemble du swirler et du plenum inclus dans le domaine de calcul : nécessité du maillage non structuré.	*****	[184]
	4/ Avoir les bonnes impédances des conditions aux limites	Domaine de calcul étendu jusqu'à un endroit où l'impédance est connue.	****	[145, 187]
SORTIES	5/ Avoir les températures adiabatiques de fin de combustion et le rendement attendu (imbrûlés)	Thermochimie à $C_p$ variable, modèle de combustion adéquat et schéma cinétique à au moins 2 étapes.	****	[91, 111]
	6/ Avoir les bonnes $\bar{T}$ en sortie	Pertes thermiques et rayonnement.	***	[86, 177]
	7/ Avoir les bons $T_{RMS}$ en sortie (aussi appelé "FRT")	Mélange et combustion prédits correctement.	**	[16]
	8/ Avoir les champs de $\bar{V}$ , $\bar{Y}_k$ , $\bar{T}$ et $\bar{P}$ .	Modèle de sous maille et lois de paroi adéquats pour avoir les pertes de charges.	****	[175, 186]
	9/ Avoir les champs de $V_{RMS}$ , $Y_{k\ RMS}$ , $T_{RMS}$	En plus de 8/, moyenner suffisamment longtemps.	**	[186, 170]
	10/ Avoir les champs de $P_{RMS}$	schémas numériques d'ordre élevés pour l'acoustique, conditions aux limites précises.	**	[38, 119]
	11/ Capturer les modes instables en termes de fréquence	Répartition de température correcte, schémas numériques d'ordre élevés pour l'acoustique.	**	[113, 185]
	12/ Prévoir l'amplitude (dB) des modes instables	Réponse exacte de la flamme aux diverses perturbations.	*	[31, 179]
	13/ Prévoir le bruit à large bande	Croiser les doigts.	*	???
	COUPLAGE	14/ Interfacer avec le code de CSD (structure)	Champs de pression (et éventuellement flux thermique) aux parois, périodicité du signal.	*

TAB. 1.2 - Difficultés rencontrées en LES réactive en vue d'un couplage fluide / structure (Flamme stabilisée).

<sup>4</sup>La fiabilité représente ici le crédit qu'on peut apporter au résultat, du plus fiable (\*\*\*\*\*) au plus hasardeux (\*).

<sup>5</sup>Les références associées ont attiré soit à un article présentant des résultats correspondants au problème soit à une méthode faisant partie des solutions partielles indiquées.

## 1.4.2 Objectifs de la thèse et limites des investigations

### Objectifs de cette thèse

La Tab. 1.2 a clairement mis en évidence que de nombreux problèmes de base étaient à éclaircir avant de pouvoir coupler la LES avec un code de structure. Cette thèse va s'attacher à améliorer la fiabilité de la LES sur chacun de ces points et de tenter un premier couplage "one-way". Pour cela, il faudra :

- Effectuer les LES préparatoires aux calculs fluide / structure sur le brûleur-test installé à l'Université de Twente (Pays-bas) (points **1/** et **2/** de la Tab. 1.2).
- Tester les méthodologies de calcul LES. En particulier, on montrera qu'un calcul "sans conditions aux limites", donc incluant les éléments amont et aval à la flamme, est nécessaire (points **3/** et **4/**).
- Valider la précision de la LES sur l'hydrodynamique de l'écoulement, particulièrement sur les champs de vitesse moyenne et de fluctuations RMS (points **8/** et **9/**).
- Estimer l'impact du schéma numérique sur la précision des résultats (points **8/**, **9/** et **10/**).
- Étudier l'effet du traitement aux murs (points **8/**, **9/** et **10/**).
- S'assurer du domaine de validité du schéma cinétique et du modèle de combustion (points **5/ 6/** et **7/**) pour le régime considéré (prémélange parfait, partiellement prémélangé ou encore diffusion).
- Mener des LES forcées et non forcées dans les mêmes conditions que l'expérience pour voir apparaître d'éventuels modes auto-instables (cas non forcé) ou bien caractériser la réponse de la flamme (cas forcé) (points **10/ 11/** et **12/**).
- Identifier le rôle spécifique des fluctuations de richesse [5, 6, 100, 101] dues au forçage, en termes de perturbations perçue par la flamme et de linéarité de sa réponse (points **11/** et **12/**).
- Analyser l'effet des pertes thermiques sur les champs de température moyens et leur impact sur la fréquence et l'amplitude des modes propres présents (points **6/ 11/** et **12/**).
- Obtenir les données instationnaires de pression aux parois et les transmettre à un code de structure (points **10/** et **14/**).

### Limite des investigations

Cette thèse n'est qu'un premier pas vers le couplage fluide / structure utilisant la LES réactive. De nombreux problèmes secondaires qu'il serait judicieux d'aborder dans un second temps seront laissés de côté.

Toutefois, étant conscient de ces problèmes, il est possible d'en citer certains a priori :

- L'effet des termes de bord du schéma numérique sur les niveaux de bruits.
- L'évaluation de la fiabilité de ces niveaux de bruit, en comparant avec une solution analytique comme un canal turbulent.
- Le gain potentiel des schémas numériques conservant l'énergie cinétique.
- La validité du modèle de flamme épaissie en diffusion.
- Le bruit numérique généré par les traitements aux limites, notamment dans les coins.
- etc...

## Précisions sur le travail fourni

Lors de cette thèse, nous avons été amené à utiliser un grand nombre de méthodes numériques différentes parmi les plus avancées qui soient. Les développements qui en ont découlé ont souvent été menés par d'autres personnes. De même, diverses données expérimentales ont aussi été exploitées. Ces mesures ont aussi été effectuées par d'autres. Ainsi, il convient de préciser d'une part ce qui a été fait spécifiquement dans cette thèse et d'autre part les travaux et données dont cette étude a pu bénéficier directement : "rendons à César ce qui appartient à César."

Sur le plan expérimental, la mise en place du brûleur-test et l'intégralité des mesures ont été effectuées par l'équipe du professeur *Jim Kok* de l'*Université de Twente*. Mon travail n'a consisté qu'en la mise en forme de ces données et la comparaison avec les résultats numériques. Plus précisément :

- *Jaap Van Kampen* [206] m'a fourni les mesures de vitesse (LDV) dans le cas non réactif (Chap. 8), les compositions équivalentes des gaz employés (Chap. 9.1.1), les mesures de pertes thermiques globales (Chap. 9.4) mais aussi les spectres expérimentaux de pression (Chap. 9.6 & 10.3) dans les cas réactifs.
- *Rob Huls* [79] s'est chargé des mesures vibratoires et à utilisé les résultats numériques que je lui ai fait parvenir pour le prototype de couplage avec ANSYS (Chap. 10.8).
- *Genie Stoeffels* a mené l'ensemble des mesures utilisant des techniques optiques, notamment par chemiluminescence  $CH^*$  (Chap. 9.3.5 & 9.4.4).

Sur le plan numérique, le code AVBP est le fruit de plus de 10 ans de travail. L'architecture de base du code a en effet été conçue par *Mike Rudyard* et *Thilo Schönfeld* en 1993 puis développé au fil des ans sous la direction de *Thierry Poinsot*. Dans un souci de concision, nous ne détaillerons que les derniers développements dont cette étude a pu bénéficier :

- La formulation "multi-espèces" du code AVBP est le résultat d'un long travail de conception et de codage de *Ghislain Lartigue* [91].
- Les conditions aux limites caractéristiques ont été implémentées initialement par *Franck Nicoud* [123, 126] dans le cas d'un gaz mono espèce. Mon travail (Chap. 5.3) a été de développer de la même manière une condition limite contrôlant le débit dans le cas d'un gaz multi espèces.
- La réduction de cinétique chimique et son optimisation par algorithme génétique a été le résultat du travail de *Charles Martin* [111]. Dans notre étude (Chap. 9.1.2), le schéma cinétique réduit du méthane "2S.CH4.CM2" a été repris et adapté pour des conditions en pression de 1.5 bar.
- Les lois de paroi thermiques ont été développées et testées par *Patrick Schmitt* [175]. Cette étude a pu bénéficier directement de cette méthode (Chap. 9.4).

Hormis cela, le travail présenté dans cette thèse est inédit, notamment l'analyse portant sur :

- Le rôle des conditions aux limites thermiques sur les modes instables de l'écoulement réactif aussi bien en termes de fréquence que d'amplitude (Chap. 9.4).
- La caractérisation (gain / déphasage) de la réponse d'un brûleur vrillé imparfaitement prémélangé à des perturbations de richesse (Chap. 10.5 & 10.6).
- L'effet de ces fluctuations sur les charges mécaniques et thermiques sollicitant les parois de la chambre de combustion (Chap. 10.7 & 10.8).
- Plus généralement, la faisabilité du couplage entre la simulation aux grandes échelles et un code de structure pour prédire les déformations d'une chambre de combustion en régime instable.



## **Deuxième partie**

# **LES des écoulements réactifs**



# Table des Matières

<b>2</b>	<b>Equations de conservation pour les fluides réactifs</b>	<b>61</b>
2.1	Equations et variables conservatives . . . . .	61
2.2	Variables thermodynamiques . . . . .	62
2.3	Equation d'état des gaz parfaits . . . . .	63
2.4	Conservation de la masse en multi-espèces . . . . .	64
2.5	Coefficients de transport . . . . .	64
2.6	Flux de chaleur . . . . .	65
2.7	Cinétique chimique . . . . .	66
<b>3</b>	<b>Equations pour la LES réactive</b>	<b>67</b>
3.1	La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES) . . . . .	67
3.2	Equations LES . . . . .	68
3.2.1	Termes non visqueux . . . . .	69
3.2.2	Termes visqueux en non réactif . . . . .	69
3.2.3	Termes de sous-maille . . . . .	70
3.3	Les modèles de sous-maille disponibles dans AVBP . . . . .	71
3.3.1	Le modèle de Smagorinsky . . . . .	72
3.3.2	Le modèle WALE . . . . .	72
3.3.3	Le modèle de Smagorinsky filtré . . . . .	73
3.4	Le modèle de flamme épaissie . . . . .	73
3.4.1	Le modèle de flamme épaissie en DNS . . . . .	73
3.4.2	Le modèle de flamme épaissie en LES . . . . .	74
	La fonction d'efficacité $E$ . . . . .	75
	Estimation de la constante $\alpha$ . . . . .	76
	Implémentation . . . . .	76
3.4.3	Le modèle de flamme épaissie Dynamique . . . . .	77
	Principe de fonctionnement . . . . .	77
	Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale . . . . .	78
3.5	Réduction de cinétique chimique . . . . .	78
3.5.1	Objectifs . . . . .	78
3.5.2	Avantages des cinétiques chimiques réduites . . . . .	79
3.5.3	Méthodes alternatives . . . . .	79

## TABLE DES MATIÈRES

---

<b>4</b>	<b>Approche numérique</b>	<b>81</b>
4.1	Discrétisation <i>Cell-Vertex</i>	81
4.1.1	Approche des résidus pondérés	81
4.1.2	Calcul des gradients	83
4.2	Schémas numériques	83
4.3	Modèles de viscosité artificielle	83
4.3.1	Introduction	83
4.3.2	Senseurs	84
	Senseur de Jameson	84
	Senseur de Colin	84
4.3.3	Opérateurs	85
4.4	Maillages	85
4.5	Performance du code	87
4.5.1	Ordre de grandeur du coût de calcul	87
4.5.2	Parallélisation et "speedup"	87
4.6	Opérateurs de moyenne	88
<b>5</b>	<b>Conditions aux limites</b>	<b>89</b>
5.1	Généralités	89
5.2	Conditions aux limites caractéristiques	90
5.2.1	Building the characteristic boundary condition	90
5.2.2	Spatial formulation	91
5.2.3	Temporal formulation	93
5.3	Construire une condition d'entrée caractéristique imposant un débit	94
5.3.1	Objectifs et conditionnement	94
	Objectifs	94
	Conditionnement : nombre de variables à imposer en 3D	94
5.3.2	Calculs des ondes	95
	Calcul des ondes d'espèces	95
	Calcul de l'onde acoustique entrante	96
	Calcul des ondes de cisaillement	96
5.3.3	Implémentation pratique	96
5.4	Lois de paroi	97
5.4.1	Lois de parois adiabatiques	97
5.4.2	Lois de parois non adiabatiques	98

## Chapitre 2

# Equations de conservation pour les fluides réactifs

### 2.1 Equations et variables conservatives

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

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{s} \quad (2.1)$$

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

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

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

**Termes non visqueux :**

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

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix} \\ \mathbf{g}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \\ \mathbf{h}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Le tenseur des contraintes  $\tau$  est défini par :

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

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

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

## 2.2 Variables thermodynamiques

L'état de référence est pris à la pression  $P_0 = 1$  bar et à la température  $T_0 = 0$  K. Les enthalpies  $\tilde{h}_{s,k}$  et entropies  $\tilde{s}_k$  sensibles de chaque espèce sont tabulées tous les 100 K de 0 à 5000 K et sont définies par les Eq. 2.7 et 2.8. Le symbole  $\tilde{\phantom{x}}$  correspond aux valeurs tabulées et l'exposant  $m$  correspond aux valeurs molaires.  $\tilde{h}_{s,k}^m$ ,  $\tilde{s}_k^m$  et la masse molaire  $W_k$  sont déterminées à partir de la table JANAF [198]. L'énergie sensible de chaque espèce est également définie à l'aide de l'Eq. 2.9.

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

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

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

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

$$C_{p,k} = \left( \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \right)_P \quad (2.10)$$

$$C_{v,k} = \left( \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \right)_V \quad (2.11)$$

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

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

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

### 2.3 Equation d'état des gaz parfaits

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

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} T \quad (2.15)$$

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\bar{W}_k} \quad (2.16)$$

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

$$\bar{r} = \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\bar{W}_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.17)$$

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.18)$$

$$\bar{C}_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.19)$$

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

$$\bar{r} = \bar{r}(x, t), \quad \bar{C}_p = \bar{C}_p(x, t), \quad \bar{C}_v = \bar{C}_v(x, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(x, t) \quad (2.20)$$

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

$$c^2 = \gamma \bar{r} T \quad (2.21)$$

## 2.4 Conservation de la masse en multi-espèces

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

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.22)$$

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

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.24)$$

En sommant les  $k$  Eq. 2.24, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.22 n'est pas nécessairement respectée. Pour assurer la conservation globale de la masse, une vitesse de diffusion corrective  $\vec{V}^c$  est ajoutée. Cette vitesse est définie par l'Eq. 2.25 [147]. Le flux de diffusion des espèces  $J_{i,k}$  est alors défini par l'Eq. 2.26.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.25)$$

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

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

## 2.5 Coefficients de transport

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique  $\mu$  est supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air<sup>1</sup>. La loi puissance, définie par l'Eq. 2.27, est utilisée pour déterminer la viscosité dynamique.

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

<sup>1</sup>Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles par rapport aux propriétés thermodynamiques

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

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{P_r} \quad (2.28)$$

La diffusivité moléculaire  $D_k$  est exprimée à l'aide des coefficients binaires  $D_{ij}$  obtenus à l'aide de la théorie cinétique des gaz [76]. La diffusivité moléculaire  $D_k$  est définie par l'Eq. 2.29 [14].

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

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

$$D_k = \frac{\mu}{\rho S_{c,k}} \quad (2.30)$$

où  $S_{c,k}$  est le nombre de Schmidt de l'espèce  $k$  supposé constant en temps et en espace.  $P_r$  et  $S_{c,k}$  modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Les valeurs sont obtenues à l'aide du logiciel PREMIX, inclus dans le package CHEMKIN [84] en calculant leur valeur dans les gaz brûlés pour une flamme de prémélange laminaire monodimensionnelle.

## 2.6 Flux de chaleur

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

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

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

où  $\lambda$  est la conductivité thermique du mélange (voir section 2.5).

## 2.7 Cinétique chimique

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

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

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

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

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

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (2.37)$$

$K_{eq}$  est la constante d'équilibre [90] définie par l'Eq. 2.38. La pression de référence est égale à  $p_0 = 1$  bar.  $\Delta H_j^0$  est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 2.39 et  $\Delta S_j^0$  la variation d'entropie pour la réaction  $j$  définie par l'Eq. 2.40.  $\Delta h_{f,k}^0$  est l'enthalpie de formation de l'espèce  $k$  à la température  $T_0 = 0$  K. Le dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  est défini par l'Eq. 2.41.

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

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (2.39)$$

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

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.41)$$

## Chapitre 3

# Equations pour la LES réactive

### 3.1 La Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES)

La Simulation aux Grandes Echelles [171, 153] est reconnue comme une approche complémentaire de la traditionnelle approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Bien que conceptuellement très différentes, ces deux approches ont pour but de produire de nouveaux systèmes d'équations de conservation permettant de reproduire et comprendre les écoulements turbulents.

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

**Approche RANS** L'opérateur est une moyenne temporelle ou une moyenne d'ensemble sur un certain nombre de réalisations du champ fluide [153, 29].

Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour toutes les échelles de la turbulence.

**Approche LES** L'opérateur est un filtre local, de taille fixée  $\Delta$ , indépendant du temps, appliqué à une seule réalisation du champ fluide. De ce *moyennage spatial* résulte une séparation entre les grandes et les petites échelles de la turbulence.

Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour les échelles de la turbulence plus petites qu'une échelle de coupure. Cette échelle de coupure entre les grandes échelles résolues et les petites échelles modélisées est liée à la taille du filtre.

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

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

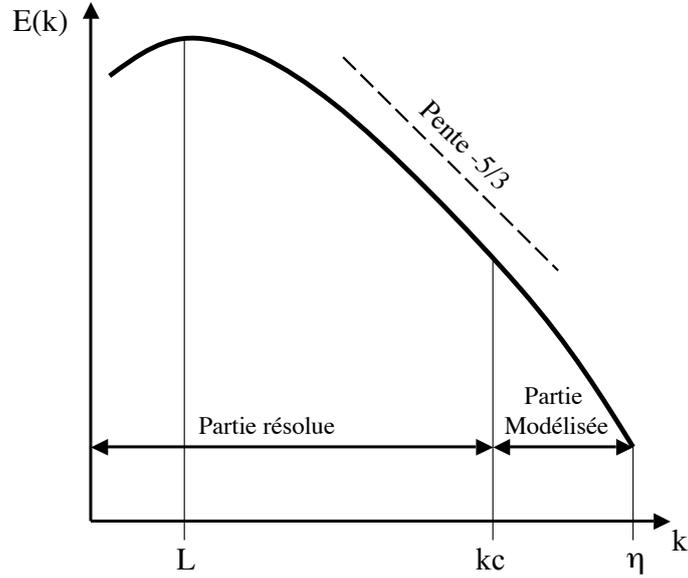


FIG. 3.1 - Spectre d'énergie d'une THI : concept LES

intrinsèquement présents dans les équations de conservation [147].

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

Les équations de conservation LES sont décrites en section 3.2, les modèles de sous-maille en section 3.3 et le modèle de combustion turbulence TF en contexte LES en section 3.4.2.

## 3.2 Equations LES

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

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (3.1)$$

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

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}} \quad (3.2)$$

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

$$\bar{\mathbf{f}}^I, \bar{\mathbf{g}}^I, \bar{\mathbf{h}}^I \quad \text{contribution non visqueuse} \quad (3.3)$$

$$\bar{\mathbf{f}}^V, \bar{\mathbf{g}}^V, \bar{\mathbf{h}}^V \quad \text{contribution visqueuse} \quad (3.4)$$

$$\bar{\mathbf{f}}^t, \bar{\mathbf{g}}^t, \bar{\mathbf{h}}^t \quad \text{contribution de sous-maille} \quad (3.5)$$

$$\text{et peuvent s'écrire : } \bar{\mathbf{f}} = \bar{\mathbf{f}}^I + \bar{\mathbf{f}}^V + \bar{\mathbf{f}}^t \quad (3.6)$$

$$\bar{\mathbf{g}} = \bar{\mathbf{g}}^I + \bar{\mathbf{g}}^V + \bar{\mathbf{g}}^t \quad (3.7)$$

$$\bar{\mathbf{h}} = \bar{\mathbf{h}}^I + \bar{\mathbf{h}}^V + \bar{\mathbf{h}}^t \quad (3.8)$$

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

### 3.2.1 Termes non visqueux

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

$$\bar{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{u}} + \bar{P} u \\ \overline{\rho_k \tilde{u}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{v}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{v}} + \bar{P} v \\ \overline{\rho_k \tilde{v}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{w}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{w}} + \bar{P} w \\ \overline{\rho_k \tilde{w}} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

### 3.2.2 Termes visqueux en non réactif

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

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

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

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

D'après Poinot et Veynante [147] Chap. 4, les termes de diffusion en LES s'écrivent :

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

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

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

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

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

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

$$\text{approximation : } \overline{J_{i,k}} \approx -\bar{\rho}\left(\bar{D}_k\frac{W_k}{W}\frac{\partial\tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k\tilde{V}_i^c\right), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.15)$$

La forme de ce tenseur est imposée par le modèle TFLES présenté en section 3.4.2.

**le flux de chaleur  $\overline{q_i}$** 

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

$$\text{approximation : } \overline{q_i} \approx -\bar{\lambda}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}\tilde{h}_{s,k}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.17)$$

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

### 3.2.3 Termes de sous-maille

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

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

Les différents termes s'écrivent :

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

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

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

La modélisation de  $\nu_t$  est détaillée en section 3.3.

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

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.21)$$

$$\text{modèle : } \overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left( D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} \widetilde{V_i}^{c,t} \right), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.22)$$

$$\text{avec : } D_k^t = \frac{\nu_t}{S_{c,k}^t} \quad (3.23)$$

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

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

$$\overline{q_i}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.24)$$

$$\text{modèle : } \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.25)$$

$$\text{avec : } \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{P_r^t} \quad \text{et} \quad P_r^t = 0.9 \quad (3.26)$$

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

$$\widetilde{V_i}^c + \widetilde{V_i}^{c,t} = \sum_{k=1}^N \left( \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S_{c,k}} + \frac{\mu_t}{\bar{\rho} S_{c,k}^t} \right) \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.27)$$

### 3.3 Les modèles de sous-maille disponibles dans AVBP

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

**section 3.3.1** le modèle de Smagorinsky

**section 3.3.2** le modèle Wall Adapting Linear Eddy (WALE)

**section 3.3.3** le modèle de Smagorinsky filtré

Ces trois modèles de sous-maille s'appuient sur la même hypothèse théorique d'invariance spatiale et temporelle du filtre LES. Des variations dans la taille du filtre dues à un maillage non uniforme ou à un maillage mobile ne sont pas directement prises en compte. Le changement de topologie de la cellule n'est pris en compte que dans le calcul local du volume de la cellule :  $\Delta = V_{cell}^{1/3}$ . En théorie, l'utilisation de viscosité artificielle en LES (voir section 4.3) est prohibée. Dans la pratique, son utilisation doit se faire avec la plus grande attention et ne doit pas dépasser la contribution du modèle de sous-maille. Les équations de conservation d'un écoulement compressible turbulent filtrées font apparaître des tenseurs et des vecteurs de sous-maille (notée SGS<sup>1</sup>) qui décrivent l'interaction entre petites échelles modélisées et grandes échelles résolues. L'influence de la sous-maille sur les échelles résolues est prise en compte au travers d'un modèle SGS utilisant une viscosité turbulente  $\nu_t$  défini par l'Eq. 3.28. Une telle approche

<sup>1</sup>SGS : Sub-Grid Scale

suppose l'effet de la sous-maille uniquement d'ordre dissipatif. Cette hypothèse n'est valide qu'en appliquant la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov [87].

$$\overline{\tau_{ij}^t} = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) \quad (3.28)$$

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

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

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

### 3.3.1 Le modèle de Smagorinsky

La viscosité turbulente est écrite :

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

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

Le modèle de Smagorinsky [189], développé dans les années 1960, fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur de multiples types d'écoulement. Il est très utilisé du fait de sa simplicité. Cette fermeture a la particularité, dans le cas d'une THI, de fournir le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Ce modèle est connu pour être trop dissipatif, spécialement près des murs et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée [171].

### 3.3.2 Le modèle WALE

Le tenseur  $s_{ij}$  est écrit :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\widetilde{g}_{ij}^2 + \widetilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \widetilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.33)$$

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.34)$$

$$\text{avec : } C_w = 0.4929 \quad (3.35)$$

Dans l'Eq. 3.33,  $\widetilde{g}_{ij}$  est le gradient de vitesse résolu. Le modèle WALE [125] fut développé pour les écoulements en proche paroi.

### 3.3.3 Le modèle de Smagorinsky filtré

Dans le modèle filtré [51], la viscosité turbulente est :

$$\nu_t = (C_{S_F} \Delta)^2 \sqrt{2 \overline{HP(\tilde{S}_{ij}) HP(\tilde{S}_{ij})}}, \quad i, j = 1, 3 \quad (3.36)$$

$$\text{avec : } C_{S_F} = 0.37 \quad (3.37)$$

Dans l'Eq. 3.36,  $HP(\tilde{S}_{ij})$  est le tenseur des déformations résolu obtenu à partir d'un champ de vitesse filtré au travers d'un filtre passe-haut. Ce modèle fut développé afin d'améliorer la représentation de phénomènes locaux typiques des écoulements turbulents [51]. Avec le modèle de Smagorinsky filtré, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

## 3.4 Le modèle de flamme épaissie

### 3.4.1 Le modèle de flamme épaissie en DNS

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

- La flamme est traitée comme une interface d'épaisseur nulle : modèle *G-equation* [132]
- La flamme est épaissie de façon à pouvoir la résoudre : modèle *Thickened Flame (TF)*

Dans le code AVBP utilisé dans cette thèse, le modèle TF [3, 2, 19, 37, 96, 95, 184, 186, 147] est utilisé pour résoudre la zone de réaction en utilisant une loi d'Arrhénius. En utilisant les Eq. 2.25 et 2.26, l'équation de conservation de la fraction massique  $Y_k$  de l'espèce  $k$  est définie par :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (3.38)$$

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

Dans le cas d'une flamme laminaire, les termes diffusifs  $\nabla J^k$  compensent les termes réactifs  $\dot{\omega}_k$ . Une analyse dimensionnelle classique [210] montre que la vitesse du front de flamme laminaire  $S_L^0$  et l'épaisseur de la flamme laminaire  $\delta_L^0$  sont contrôlées par la diffusivité thermique  $D_{th}$  et la constante pré-exponentielle  $A$  (voir section 2.7).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A} \quad (3.39)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (3.40)$$

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

$$D_{th} \xrightarrow{\text{épaississement}} F D_{th} \quad (3.41)$$

$$D_k \Rightarrow F D_k \quad (3.42)$$

$$\dot{\omega}_F \Rightarrow \frac{\dot{\omega}_F}{F} \quad (3.43)$$

L'Eq. 3.38 s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho F D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (3.44)$$

$$\text{avec } V_i^c = \sum_{k=1}^n F D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (3.45)$$

La vitesse du front de flamme est inchangée (voir l'Eq. 3.39) mais l'épaisseur du front de flamme est multipliée par  $F$  (voir l'Eq. 3.40). Ce facteur  $F$  est déterminé de manière à pouvoir résoudre le front de flamme sur un maillage DNS. L'extension du modèle TF à l'étude LES d'écoulements turbulents réactifs est discuté en section 3.4.2.

### 3.4.2 Le modèle de flamme épaissie en LES

Un point délicat de la Simulation aux Grandes Echelles des flammes est lié à l'épaisseur très fine du front de flamme, typiquement de l'ordre de  $0.1 \text{ mm}$ , qui est bien plus petite que la taille standard  $\Delta_x$  des maillages utilisés en LES. Afin de pallier à ce problème, le modèle de flamme épaissie TF a été développé afin de résoudre le front de flamme sur un maillage typique d'un calcul LES. La section 3.4.1 a présenté comment le front d'une flamme laminaire a pu être épaissi d'un facteur  $F$  :  $\delta_l^0 \Rightarrow \delta_l^1 = F \delta_l^0$ .

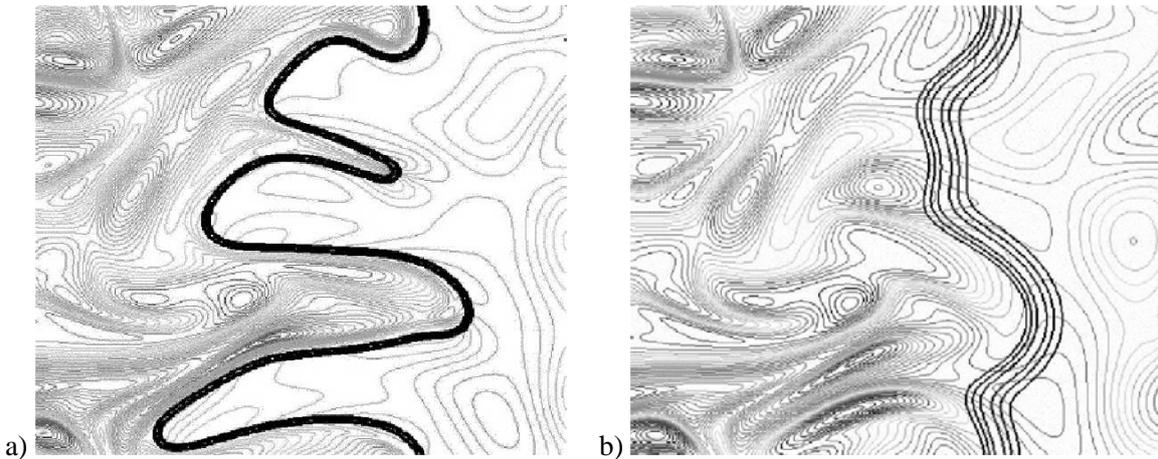


FIG. 3.2 - DNS d'interactions flamme/turbulence [3, 147]. a) flamme non épaissie, b) flamme épaissie d'un facteur  $F = 5$

Dans le cas d'une flamme turbulente, l'interaction entre turbulence et chimie est altérée. En effet, les tourbillons plus petits que  $F\delta_l^0$  n'interagissent pas avec la flamme. En conclusion, épaissir la flamme équivaut à réduire l'influence des tourbillons sur le plissement de la flamme : la surface de flamme est réduite et le taux de réaction estimé est trop faible. Afin de pallier à ce problème, une fonction d'efficacité  $E$  fut développée par Colin [37] à partir de résultats DNS (voir figure 3.2).

### La fonction d'efficacité $E$

Une description complète de la fonction d'efficacité  $E$  est disponible dans l'article de Colin *et al.* [37]. La méthodologie de ce modèle peut se décomposer en trois étapes principales :

1. Le facteur de plissement de la surface de flamme  $\Xi$  est estimé à partir de la densité de surface de flamme  $\bar{\Sigma}$ , en supposant l'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous-maille :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{s_l^0} \langle a_T \rangle_s \quad (3.46)$$

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

2. Le taux d'étirement de sous-maille  $\langle a_T \rangle_s$  est défini, à partir de la taille du filtre  $\Delta_e$  et de la fluctuation de vitesse de sous-maille  $u'_{\Delta_e}$ , par l'Eq. 3.47. La fonction  $\Gamma$ , définie par l'Eq. 3.48, correspond à la prise en compte du taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, c'est-à-dire toutes les échelles comprises entre l'échelle de Kolmogorov et la taille du filtre  $\Delta_e$  [116]. Finalement, la fonction d'efficacité  $E$  est définie par l'Eq. 3.49 comme le rapport entre le plissement de la flamme non épaissie et le plissement de la flamme épaissie.

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma u'_{\Delta_e} / \Delta_e \quad (3.47)$$

$$\Gamma \left( \frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) = 0.75 \exp \left[ - \frac{1.2}{(u'_{\Delta_e} / s_l^0)^{0.3}} \right] \left( \frac{\Delta_e}{\delta_l^1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.48)$$

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left( \frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}}{1 + \alpha \Gamma \left( \frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}} \quad (3.49)$$

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

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

Une longueur de coupure  $\delta_l^c$  est définie par l'équation 31 dans Colin *et al.* [37] de telle façon que les tourbillons plus petits que cette taille n'affectent pas le plissement de la flamme. Donc la fonction d'efficacité est utilisée si la taille caractéristique d'un tourbillon  $r$  est telle que :

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

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

$\beta$  est une constante de la fonction d'efficacité de l'ordre de grandeur de 1.

3. La taille du filtre  $\Delta_e$  correspond à la plus grande échelle influencée par l'épaississement  $\delta_l^1$ . En pratique,  $\Delta_e = 10\Delta_x$  avec  $\Delta_x = \sqrt[3]{V_{cell}}$ .

Les fluctuations de vitesse de sous-maille  $u'_{\Delta_e}$  sont estimées en utilisant l'opérateur  $OP_2$  basé sur le rotationnel du champ de vitesse pour supprimer la contribution en dilatation qui n'est pas considéré comme de la *turbulence*.

Un opérateur Laplacien, défini par l'Eq. 3.50, est directement appliqué au champ de vitesse.

$$u'_{\Delta_e} = c_2 \Delta_x^3 |\nabla^2 (\nabla \times \bar{u})|, \quad c_2 \approx 2 \quad (3.50)$$

### Estimation de la constante $\alpha$

La constante  $\alpha$  est estimée de façon à retrouver le comportement asymptotique du facteur de plissement  $\Xi$  en fonction des fluctuations de vitesse  $u'$  dans le cas de flammes fines telles que  $\Delta_e$  tend vers l'échelle intégrale  $l_t$ . Dans ce cas, le plissement  $\Xi$  tend vers un plissement maximum  $\Xi_{max}$  défini par l'Eq. 3.51. l'Eq. 3.52 qui définit  $\alpha$  se déduit de l'Eq. 3.51.

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u' / s_l^0 \quad (3.51)$$

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3c_{ms}[Re_t^{1/2} - 1]} \quad (3.52)$$

$$\text{avec : } Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad \text{et} \quad c_{ms} = 0.28 \quad (3.53)$$

Il existe plusieurs méthodes pour calculer les constantes  $\alpha$  et  $\beta$ , notamment celles proposées par Colin *et al.* [37] ou Charlette *et al.* [28].

### Implémentation

Dans le cas d'écoulements réactifs, les équations pour la conservation des fractions massiques et la conservation de l'énergie sont modifiées. Les termes visqueux modifiés sont le tenseur de diffusion des espèces  $\overline{J_{i,k}}$  (Eq. 3.54) et le flux de chaleur  $\overline{q_i}$  (Eq. 3.56). Le nouveau terme source est défini par l'Eq. 3.57.

On a donc le tenseur de diffusion des espèces :

$$\overline{J_{i,k}} = -EF \frac{\bar{\mu}}{S_{c,k}} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} + \bar{\rho}_k \tilde{V}_i^c, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.54)$$

avec

$$\tilde{V}_i^c = EF \sum_{k=1}^N \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S_{c,k}} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.55)$$

Le flux de chaleur :

$$\bar{q}_i = -EF \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p}{P_r} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \bar{J}_{i,k} \tilde{h}_{s,k}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.56)$$

Et le terme source de l'Eq. 3.2 :

$$\bar{s} = (0, 0, 0, \frac{E \bar{\omega}_T}{F}, \frac{-E \bar{\omega}_k}{F})^T \quad (3.57)$$

### 3.4.3 Le modèle de flamme épaissie Dynamique

#### Principe de fonctionnement

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

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

En d'autres termes, le modèle TF peut demeurer inchangé dans la zone de la flamme mais doit être adapté hors de cette région. Le modèle Dynamically Thickened Flame (DTF) a été développé pour prendre en compte ces deux points importants [96]. Dans ce modèle schématisé sur la Fig. 3.3, l'épaississement  $F$  n'est plus une constante mais vaut  $F_{max}$  dans la zone de réaction et  $F = 1$  ailleurs.

L'épaississement dynamique  $F$  est défini par l'Eq. 3.58. Le senseur  $S$ , défini par l'Eq. 3.59, dépend localement des fractions massiques et de la température. Ce senseur évalue si la zone est réactive ou pas à l'aide de la fonction de présence  $\Omega$ . Cette fonction utilise les paramètres de la cinétique chimique.

$$F = 1 + (F_{max} - 1)S \quad (3.58)$$

$$S = \tanh(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}), \quad \beta' = 500 \quad (3.59)$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp(-\Gamma \frac{E_a}{RT}) \quad (3.60)$$

Le paramètre  $\Gamma$  est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut :  $\Gamma = 0.68$ . Le senseur  $S$  varie entre 0 dans les zones non réactives et 1 dans la flamme.  $\Omega_0$  est déterminé en calculant le maximum de  $\Omega$  dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique 1D non épaissie.

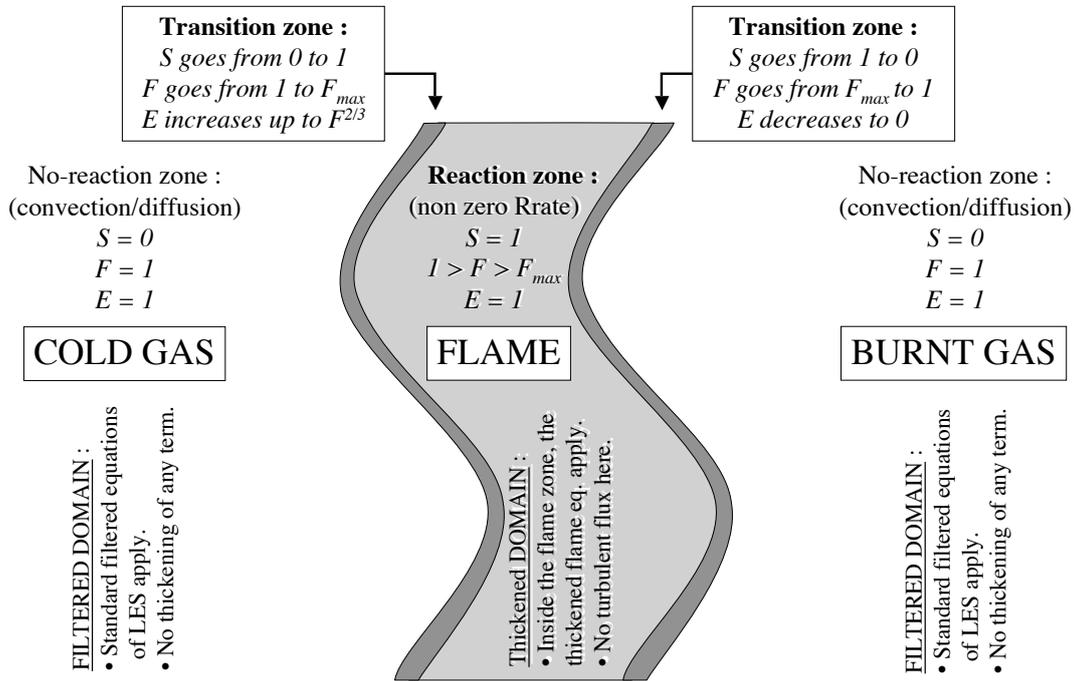


FIG. 3.3 - Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF

### Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale

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

$$F_{max} = n \frac{\delta_L^0}{\Delta} \quad (3.61)$$

avec  $\Delta$  la taille locale de la maille. Afin d'avoir un front de flamme épaissi correctement résolu, et ainsi éviter toute erreur numérique due à la raideur du front, nous prendrons  $n$  de l'ordre de 5 dans tous les calculs présentés dans la partie III.

## 3.5 Réduction de cinétique chimique

### 3.5.1 Objectifs

La simulation en combustion de configurations industrielles nous conduit à traiter de l'oxydation de nombreux hydrocarbures tels que méthane, propane, heptane ou mélanges comme le kérosène et gaz naturel. L'utilisation de modèle de flamme de type TFLES induit la nécessité de reproduire correctement une structure de flamme laminaire. Il est donc de première importance de pouvoir modéliser les réactions

chimiques au sein d'une flamme laminaire de prémélange. Le modèle de flamme laminaire doit être en mesure de reproduire les principales grandeurs globales qui caractérisent une flamme laminaire :

- La vitesse de flamme laminaire  $S_L$ , car elle est directement reliée au taux de consommation de carburant.
- L'épaisseur thermique de flamme  $\delta_L$ .
- La composition des gaz brûlés à l'équilibre  $Y_k^{eq}$ .

### 3.5.2 Avantages des cinétiques chimiques réduites

Alors que la réalité des réactions d'oxydation des carburants implique plusieurs centaines [60] voire plusieurs milliers de réactions élémentaires pour les carburants les plus lourds, l'utilisation de cinétiques réduites limite le nombre de réactions entre 1 à 4 [205]. Cela a deux principaux effets :

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

Ce principe de réduction de schémas cinétiques et de leur optimisation par algorithme génétique a fait l'objet d'une étude approfondie par *Martin* [111].

### 3.5.3 Méthodes alternatives

D'autres méthodes permettant de calculer les termes sources sur les espèces et l'énergie existent. La plupart de ces méthodes ne résolvent pas explicitement le transport des espèces ni de l'énergie [152]. Les fractions massiques  $Y_k$ ,  $\dot{\omega}_k$  et la température  $T$  sont calculées à partir de tables ou bibliothèques préétablies. Les entrées sont réduites à une ou deux variables qui sont en général la fraction de mélange  $z$  pour les flammes de diffusion et une variable d'avancement  $c$  pour les flammes prémélangées.

On peut notamment citer les méthodes de type ILDM [107] ou FPI [57, 65] qui ont démontré leur efficacité, que ce soit en LES ou en DNS [207].



# Chapitre 4

## Approche numérique

### 4.1 Discrétisation *Cell-Vertex*

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

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

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

#### 4.1.1 Approche des résidus pondérés

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

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{0} \quad (4.1)$$

où  $\mathbf{w}$  est le vecteur des variables conservatives et  $\vec{\mathcal{F}}$  est le tenseur de flux correspondant. Ce tenseur est décomposé en une partie visqueuse et une partie non visqueuse au travers de l'équation 4.2. Les termes spatiaux sont approchés dans chaque volume de contrôle pour en déduire le résidu  $\mathbf{R}_{\Omega_j}$  défini par l'équation 4.3.

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^I(\mathbf{w}) + \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{w}, \vec{\nabla} \mathbf{w}) \quad (4.2)$$

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial \Omega_j} \vec{\mathcal{F}} \cdot \vec{n} dS \quad (4.3)$$

où  $\partial\Omega_j$  est la projetée de  $\Omega_j$  le long de la normale  $\vec{n}$ . L'approche *Cell-Vertex* est applicable à des types de cellules quelconques et apparaît donc très utile pour des maillages hybride. Le résidu  $\mathbf{R}_{\Omega_j}$  défini par l'équation 4.3 est d'abord calculé pour chaque cellule en utilisant une loi d'intégration simple appliquée aux faces. Pour des faces triangulaires, les composantes individuelles du flux sont supposées varier linéairement. Pour des faces quadrilatères, où les noeuds peuvent ne pas être coplanaires, afin d'assurer l'exactitude de l'intégration pour des éléments quelconques, chaque face est divisée en triangles et intégrée sur chaque triangle. La valeur du flux est obtenue après moyennage des quatre triangles (deux divisions le long des deux diagonales). Cette propriété qui permet de conserver la linéarité joue un rôle important car elle assure une bonne précision même sur des maillages irréguliers. Il est utile d'écrire le résidu  $\mathbf{R}_{\Omega_j}$  défini par l'équation 4.3 au travers d'une cellule quelconque. L'équation 4.3 devient alors l'équation 4.4.

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{\mathcal{F}}_i \cdot d\vec{S}_i, \quad (4.4)$$

où  $\vec{\mathcal{F}}_i$  est une approximation de  $\vec{\mathcal{F}}$  aux noeuds,  $N_d$  représente le nombre de dimensions de l'espace et  $\{i \in \Omega_j\}$  sont les sommets de la cellule. Dans cette formulation, l'information géométrique a été factorisée en termes  $d\vec{S}_i$  qui sont associés aux noeuds individuels de la cellule et non à ses faces.  $d\vec{S}_i$  est la moyenne des normales pondérées par les surfaces des faces triangulaires d'un noeud commun  $i$ ,  $i \in \Omega_j$ . Pour assurer la consistance,  $\sum_{i \in \Omega_j} d\vec{S}_i = \vec{0}$ . La linéarité de l'opérateur de divergence est préservée si le volume  $V_{\Omega_j}$  est défini par l'équation 4.5.

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d^2} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{x}_i \cdot d\vec{S}_i, \quad \text{avec} \quad \nabla \cdot \vec{x} = N_d \quad (4.5)$$

Une fois les résidus calculés, le schéma semi-discret est défini par l'équation 4.6.

$$\frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} D_{\Omega_j}^k V_{\Omega_j} R_{\Omega_j}, \quad (4.6)$$

où  $D_{\Omega_j}^k$  est la matrice de distribution qui fait une projection pondérée du centre  $\Omega_j$  vers le noeud  $k$  (*scatter*) et  $V_k$  est le volume de contrôle associé à chaque noeud  $k$ . La conservation est garantie si  $\sum_{k \in \Omega_j} D_{\Omega_j}^k = I$ . Dans le contexte présent, l'équation 4.6) est résolue, en utilisant une méthode explicite Euler ou une méthode Runge-Kutta à plusieurs étapes en temps, afin d'obtenir une solution stationnaire. La matrice de distribution est définie par l'équation 4.7.

$$D_{\Omega_j}^k = \frac{1}{n_n} \left( I + C \frac{\delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}} \vec{\mathcal{A}}_{\Omega_j} \cdot d\vec{S}_k \right), \quad (4.7)$$

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

### 4.1.2 Calcul des gradients

Afin de déterminer les valeurs des gradients  $\vec{\nabla} \mathbf{w}$  aux nœuds, une approximation de sa valeur liée à la cellule  $\Omega_j$  est d'abord calculée puis distribuée aux nœuds  $k$ . Le gradient à la cellule, défini par l'équation 4.8, suit une description identique à celle utilisé pour définir la divergence à l'équation 4.4. Une approximation de ce gradient à la cellule est ainsi obtenue et définie par l'équation 4.9. Une approximation de ce gradient au nœud, définie par l'équation 4.10, est obtenue en utilisant une moyenne pondérée par le volume de la cellule.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x}\right)_C \approx \frac{1}{V_C} \int \int_{\partial \Omega_C} \mathbf{w} \cdot \vec{n} \partial S \quad (4.8)$$

$$\left(\vec{\nabla} \mathbf{w}\right)_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \overline{\mathbf{w}_i} \overline{d\vec{S}_i} \quad (4.9)$$

$$\left(\vec{\nabla} \mathbf{w}\right)_k = \frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} V_{\Omega_j} \left(\vec{\nabla} \mathbf{w}\right)_{\Omega_j} \quad (4.10)$$

## 4.2 Schémas numériques

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

**schéma Runge-Kutta 3 [75]** De type volumes finis, d'ordre 3 en temps avec une intégration Runge-Kutta trois étapes, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC et a peu près aussi rapide.

**schéma Lax-Wendroff [92]** De type volumes finis, d'ordre 2 en temps avec une intégration Runge-Kutta une étape, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC mais environ deux fois plus rapide.

**schéma TTGC [38]** De type éléments finis, d'ordre 3 en temps, d'ordre 3 en espace, très précis sur des maillages non structurés, approprié à l'étude LES en géométrie complexe.

## 4.3 Modèles de viscosité artificielle

### 4.3.1 Introduction

Les schémas de discrétisation spatiale disponibles dans AVBP sont des schémas centrés. Ces types de schémas sont connus pour être naturellement sujets à des oscillations hautes fréquences (*wiggles*) dans les régions de forts gradients. Une méthode efficace pour pallier à ce problème est l'utilisation d'un terme de *Viscosité Artificielle* (VA) pour adoucir les fronts trop raides. Cette section décrit les senseurs (section 4.3.2) et les opérateurs (section 4.3.3) de la VA.

### 4.3.2 Senseurs

Un senseur  $\zeta_{\Omega_j}$  est un paramètre compris entre 0 et 1 défini pour chaque cellule  $\Omega_j$ . Dans le cas où la solution est bien résolue, le senseur est égal à 0 alors que dans le cas où la solution a de fortes variations locales, le senseur est égal à 1 et la VA est appliquée. Ce senseur est obtenu en comparant différentes évaluations du gradient d'un scalaire comme la pression, l'énergie totale ou la fraction massique. Si les évaluations sont identiques, le senseur est fixé à 0. Par contre, si les deux évaluations donnent des valeurs différentes, le senseur est déclenché. Le point crucial est de trouver une fonction pour le senseur qui soit différente de zéro seulement dans les zones utiles. Deux senseurs différents sont disponibles dans AVBP : le senseur de Jameson  $\zeta_{\Omega_j}^J$  [81] et le senseur de Colin  $\zeta_{\Omega_j}^C$  [36] qui est dérivé du senseur de Jameson. *Notation* l'indice  $k$  désigne les variables liées à un sommet  $k$  de la cellule considérée et l'indice  $\Omega_j$  désigne les variables liées à la cellule  $\Omega_j$ .

#### Senseur de Jameson

Le senseur de Jameson  $\zeta_{\Omega_j}^J$  lié à la cellule  $\Omega_j$  (défini par l'Eq. 4.11) est le maximum de tous les senseurs  $\zeta_k^J$  liés aux sommets  $k$  (définis par l'Eq. 4.12).  $S$  est le scalaire évalué par le senseur et  $(\Delta_1^k, \Delta_2^k)$  sont des évaluations différentes du gradient définies par l'Eq. 4.13.  $\Delta_1^k$  mesure la variation de  $S$  au sein de la cellule  $\Omega_j$ .  $\Delta_2^k$  est une estimation de la même grandeur en utilisant  $(\vec{\nabla}S)_k$ , le gradient de  $S$  au nœud  $k$ . Ce senseur varie proportionnellement à l'amplitude de la déviation par rapport à l'évolution linéaire. Ce senseur a une évolution *douce* d'un point de vue numérique et s'applique parfaitement pour des cas quasi-stationnaires.

$$\zeta_{\Omega_j}^J = \max_{k \in \Omega_j} \zeta_k^J \quad (4.11)$$

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \quad (4.12)$$

$$\Delta_1^k = S_{\Omega_j} - S_k \quad \Delta_2^k = (\vec{\nabla}S)_k \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \quad (4.13)$$

#### Senseur de Colin

Dans le cas d'écoulements turbulents fortement instationnaires, il est nécessaire de se munir d'un senseur plus précis, c'est-à-dire plus faible lorsque l'écoulement est suffisamment résolu et presque maximum dans les zones de non-linéarités fortes : le senseur de Colin, défini par les Eq. 4.14 à 4.18.

- $\zeta_{\Omega_j}^C$  est très petit lorsque  $\Delta_1^k$  et  $\Delta_2^k$  sont petits comparés à  $S_{\Omega_j}$ . Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si  $\Delta_1^k$  et  $\Delta_2^k$  sont de signes opposés) ou à des faibles gradients bien résolus par le schéma (si  $\Delta_1^k$  et  $\Delta_2^k$  sont de même signe).
- $\zeta_{\Omega_j}^C$  est petit lorsque  $\Delta_1^k$  et  $\Delta_2^k$  sont du même signe et du même ordre de grandeur (même si cet ordre de grandeur est grand). Ceci correspond à des gradients raides bien résolus par le schéma.
- $\zeta_{\Omega_j}^C$  est grand lorsque  $\Delta_1^k$  et  $\Delta_2^k$  sont de signes opposés et qu'un des deux est beaucoup plus grand que l'autre. Ceci correspond à une oscillation numérique de grande amplitude.

- $\zeta_{\Omega_j}^C$  est grand si  $\Delta_1^k$  ou  $\Delta_2^k$  est du même ordre de grandeur que  $S_{\Omega_j}$ . Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

Il est à noter que les définitions de  $\Psi$  et  $\epsilon^k$  changent pour l'équation de conservation des fractions massiques : la valeur de référence n'est plus  $S_k$  mais 1, valeur maximum de la fraction massique.

$$\zeta_{\Omega_j}^C = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (4.14)$$

$$\text{avec : } \Psi = \max_{k \in \Omega_j} \left( 0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \epsilon_1 S_k} \zeta_k^J \right) \quad (4.15)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \epsilon^k \max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|) \quad (4.16)$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2 \left( 1 - \epsilon_3 \frac{\max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_k} \right) \quad (4.17)$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \epsilon_2 = 0.95 \quad \epsilon_3 = 0.5 \quad (4.18)$$

### 4.3.3 Opérateurs

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

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

**4<sup>ème</sup> ordre** cet opérateur est utilisé pour diminuer les *wiggles*.

Les contributions à la cellule de l'opérateur du 2<sup>ème</sup> ordre (Eq. 4.20) et de l'opérateur du 4<sup>ème</sup> ordre (Eq. 4.21) sont reportées sur les nœuds de cette cellule  $\Omega_j$  (Eq. 4.19).

$$dw_k = \sum_j R_{k \in \Omega_j}^2 + \sum_j R_{k \in \Omega_j}^4 \quad (4.19)$$

$$\text{avec : } R_{k \in \Omega_j}^2 = -\frac{1}{N_v} \frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}} \text{smu2} \zeta_{\Omega_j} (w_{\Omega_j} - w_k) \quad (4.20)$$

$$\text{avec : } R_{k \in \Omega_j}^4 = \frac{1}{N_v} \frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}} \text{smu4} \left[ (\vec{\nabla} w)_{\Omega_j} \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) - (w_{\Omega_j} - w_k) \right] \quad (4.21)$$

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

## 4.4 Maillages

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

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

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

Maillages structurés	Maillages non-structurés
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Efficacité de l'algorithme de calcul sur les hexahédres (travail séquentiel).</li> <li>• Volume plus grand de la maille hexahédrique qu'une maille tétraédrique à iso-résolution, permettant des pas de temps plus grands (explicite).</li> <li>• Précision réelle plus grande du schéma numérique (ordre effectif [36]).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rapidité / facilité de la génération du maillage sur des géométries complexes.</li> <li>• Possibilité de raffiner à loisir dans les zones d'intérêt (zone de flamme, zone de mélange, panache d'un jet transverse...).</li> <li>• Pas de direction préférentielle pouvant perturber l'écoulement.</li> </ul>

TAB. 4.1 - Avantages respectifs des maillages structurés et non-structurés

La Tab. 4.1 donne un panorama des avantages respectifs des deux stratégies. Dans notre étude, on peut identifier clairement les zones où la résolution revêt un caractère critique<sup>1</sup> :

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

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

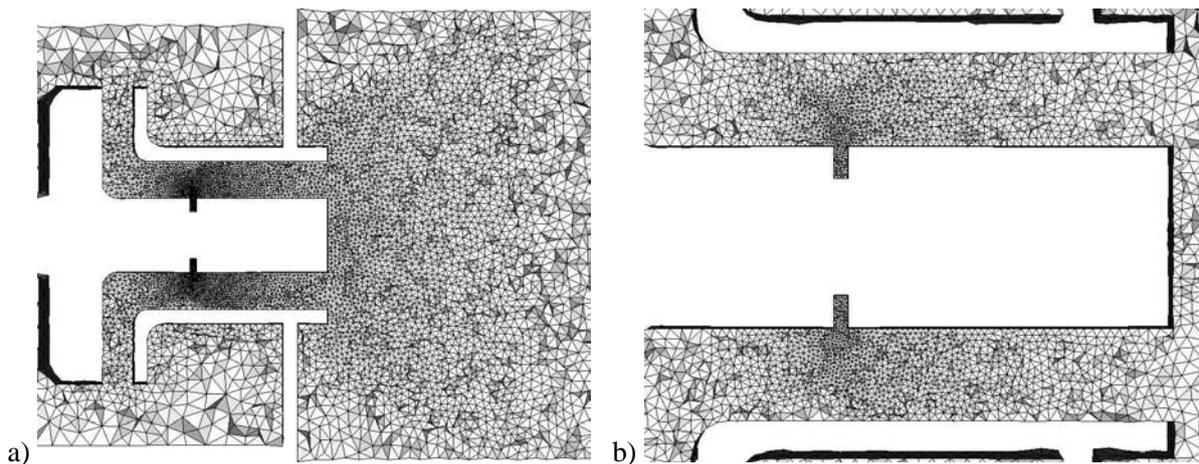


FIG. 4.1 - Coupe longitudinale du maillage utilisé pour la LES réactive a) et zoom sur la zone de mélange b).

<sup>1</sup>Les zones proches des parois ne sont pas ici considérées comme critiques car elles sont prises en compte par la loi de paroi.

<sup>2</sup>Rapports d'aspects, taille minimum, étirement et cisaillement des mailles, etc...

La Fig. 4.1 illustre le travail délicat effectué sur le maillage non-structuré et plus particulièrement le raffinement important opéré dans la zone où les jets transverses de gaz naturel se mélangent avec l'air avant de déboucher dans la chambre de combustion.

## 4.5 Performance du code

### 4.5.1 Ordre de grandeur du coût de calcul

Ce chapitre donne un ordre de grandeur des ressources machines consommées par les calculs effectués dans cette thèse. Pour plus de simplicité, on utilisera comme unité de base l'heure CPU (notée  $h_{CPU}$ ) représentant une heure de calcul sur un processeur opteron 2.4 Ghz (type calculateur "Kali" installé au CERFACS). La Tab. 4.2 détaille le coût approximatif pour chaque type de calcul présenté dans la partie III.

	Type de calcul	Coût du calcul ( $h_{CPU}$ )
Non réactif	Etablissement du débit d'entrée	60 $h_{CPU}$
	Remplissage de la chambre (transitoire)	140 $h_{CPU}$
	Moyennes à froid (AD_COLD)	100 $h_{CPU}$
Réactif adiab.	Mélange sans réaction (transitoire)	250 $h_{CPU}$
	Allumage et stabilisation de la flamme (transitoire)	250 $h_{CPU}$
	Établissement de l'écoulement réactif (transitoire)	2,000 $h_{CPU}$
	Moyennes à chaud (AD_STEADY)	1,800 $h_{CPU}$
	Pulsation du fuel (AD_FORCEXX : 6 calculs)	6 x 1,800 $h_{CPU}$
Réactif non adiab.	Établissement de l'équilibre thermique (transitoire d'un temps convectif complet)	38,000 $h_{CPU}$
	Moyennes à chaud (HL_STEADY)	1,800 $h_{CPU}$
	Pulsation du fuel (HL_FORCE15)	1,800 $h_{CPU}$
	<b>Coût TOTAL</b>	<b><math>\simeq 57,000 h_{CPU}</math></b>

TAB. 4.2 - Coût CPU pour chaque type de calcul.

### 4.5.2 Parallélisation et "speedup"

Comme présenté dans le chapitre 4.5.1, les calculs de simulation aux grandes échelles sont assez gourmands en termes de temps de calcul. Pour obtenir des résultats dans un temps acceptable, la parallélisation (utilisation de plusieurs processeurs simultanément) est nécessaire.

Cette parallélisation doit être efficace pour être pleinement utilisable. Dans AVBP, la librairie MPI est utilisée pour la communication entre processeurs. Des tests de performance ("speedup") ont été effectués notamment par *Staffelbach* [194, 195] qui démontrent la capacité du code AVBP à utiliser parallèlement un grand nombre de processeurs sans perdre d'efficacité. La Figure 4.2 montre clairement l'accroissement quasi idéal de la vitesse de calcul du code AVBP en fonction du nombre de processeurs employés.

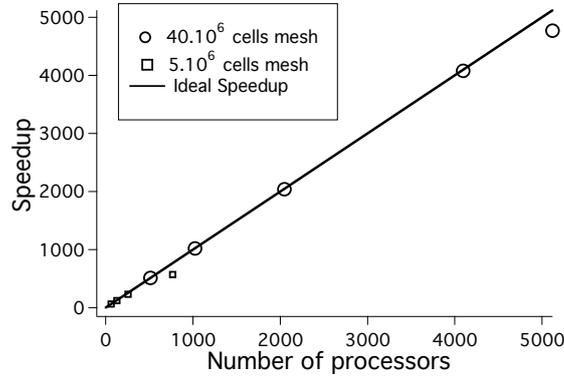


FIG. 4.2 - Speedup du code AVBP sur deux maillages à respectivement 5 millions et 40 millions de cellules [194, 195].

## 4.6 Opérateurs de moyenne

La LES est capable de fournir toutes sortes de données statistiques (moyennes et variances) qui sont, à terme, amenées à être comparés à différentes données expérimentales. Toutefois, ces statistiques de l'écoulement résolu pour une quantité  $Q$  ne sont pas sensées a priori être directement comparables aux données statistiques tirées de l'expérience. Plusieurs questions restent en suspens :

- Quel type de moyenne doit on calculer en LES : *Favre* ou *Reynolds* ?
- Quels types de données expérimentales peuvent être comparées : données filtrées ou non ?
- Peut on comparer identiquement tous les champs moyens et RMS ?

Des travaux récents de *Veynante* et *Knikker* [208, 209] répondent de manière très pragmatique à ces questions. On apprend ainsi, en ce qui concerne les champs moyens que la moyenne temporelle de *Reynolds* du champ filtré est égale au champ moyen filtré (Eq. 4.22). Si les évolutions du champ moyen sont à des échelles plus grandes que la taille du filtre LES, il est possible de confondre champ moyen et champ moyen filtré (Eq. 4.23). On a donc :

$$\langle \overline{Q} \rangle = \overline{\langle Q \rangle} \tag{4.22}$$

$$\langle \overline{Q} \rangle \approx \overline{Q} \tag{4.23}$$

Il donne aussi des indications en ce qui concerne la variance : Dans le cas du champ de vitesse  $V$ , où les échelles résolues contiennent l'essentiel de l'énergie, on peut penser que la variance peut être directement estimée à partir du champ résolu, en négligeant les autres contributions (Eq. 4.24). Ce n'est probablement pas le cas pour d'autres grandeurs (température, fraction de mélange, etc...). Ainsi, on peut, en faisant l'hypothèse (assez grossière) que l'énergie de sous maille est petite aboutir à :

$$\overline{V^2} - (\overline{V})^2 \approx \overline{\langle V \rangle^2} - (\overline{\langle V \rangle})^2 + \overline{\langle V^2 \rangle} - \langle V \rangle^2 \quad \text{avec} \quad \overline{\langle V^2 \rangle} - \langle V \rangle^2 \approx 0 \tag{4.24}$$

En Résumé, *Veynante* et *Knikker* [208, 209] démontrent qu'il est tout a fait possible de comparer moyennes et variances du champ de vitesse résolu tiré de la LES avec les mesures de vitesse expérimentales. Toutefois, les autres scalaires nécessitent beaucoup plus de précautions.

# Chapitre 5

## Conditions aux limites

### 5.1 Généralités

Les conditions limites sont un point crucial dans tout code de mécanique des fluides et spécialement dans des codes résolvant l'acoustique [142, 178].

L'intégration temporelle Runge-Kutta multi-étapes est utilisé dans AVBP. Cependant, pour des raisons de simplicité, l'exemple illustratif décrit une intégration une étape. Connaissant le vecteur solution  $U^n$  au temps  $t$ , la solution  $U^{n+1}$  au temps  $t + \Delta t$  s'écrit de façon générale :

$$U^{n+1} = U^n - \mathcal{R}\Delta t \quad (5.1)$$

L'exposant  $n$  est utilisé pour rappeler que le code explicite ne se sert que des données à l'itération  $n$ . En chaque noeud du bord, le résidu  $\mathcal{R}$  calculé par le schéma est corrigé par les conditions aux limites. Il est important de noter que, pour que le problème soit mathématiquement bien posé, le nombre nécessaire et suffisant de variables à corriger est dicté par le type de conditions aux limites (traitement d'entrée ou de sortie, voir [147] - Chap.9). Le résidu peut l'être de deux façons différentes :

**Méthode non caractéristique :** En imposant directement les variables conservatives cibles au travers des résidus.

**Méthode caractéristique :** En effectuant une décomposition en ondes pour modifier les résidus [197]. C'est le principe de la méthode NSCBC<sup>1</sup> développée par *Poinsot et Lele* [143] et étendue aux écoulements multi-espèces par *Moureau et Lartigue* [119].

Nous allons nous attacher à expliquer plus en détail comment est construite cette deuxième méthode dans le chapitre 5.2. Nous ne détaillerons pas la première méthode. Le lecteur qui chercherait de plus amples informations est invité à se reporter au "Handbook" d'AVBP<sup>2</sup>.

---

<sup>1</sup>NSCBC pour Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition

<sup>2</sup>[http://www.cerfacs.fr/~avbp/AVBP\\_V5.X/HANDBOOK/handbook.pdf](http://www.cerfacs.fr/~avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK/handbook.pdf)

## 5.2 Conditions aux limites caractéristiques

The underlying key concept of characteristic boundary conditions is the following : waves that are leaving the domain are well-computed by the numerical scheme (in a sense, they only contain “upwind” information) and must be left unchanged, while waves entering the domain cannot be computed by the numerical scheme (they transport “downwind” information) and must therefore be replaced by user-defined values. These values are given by the physics of the boundary conditions.

The procedure of Boundary Condition treatment is summarised on Fig. 5.1. This sketch will help to understand all implementation details exposed in sections 5.2.1 to 5.2.3.

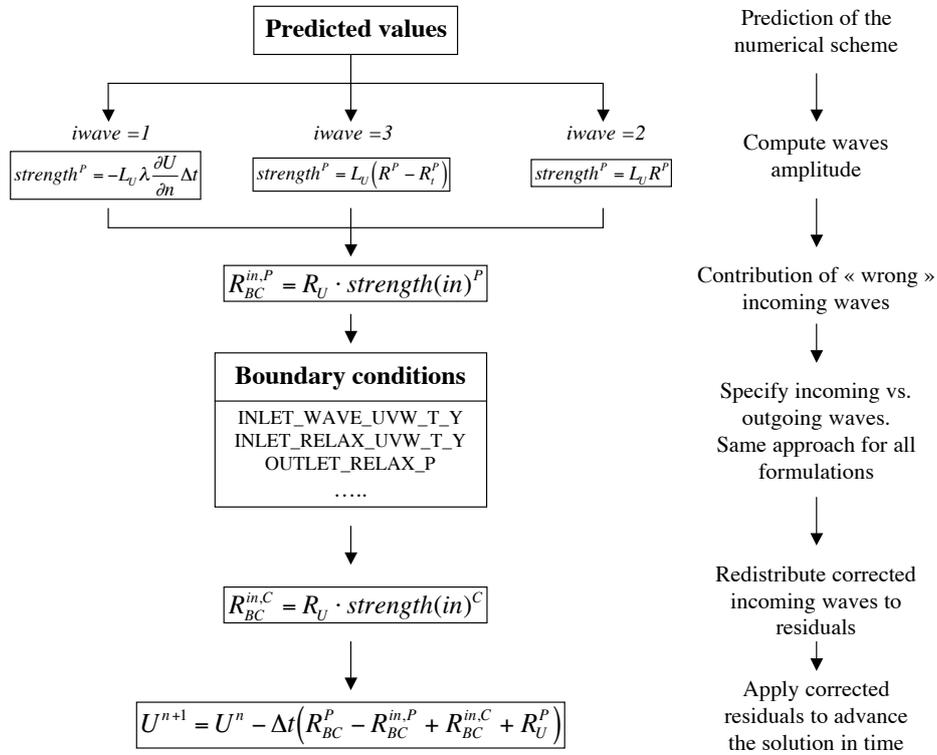


FIG. 5.1 - Scheme of the global procedure for characteristic boundary conditions.

### 5.2.1 Building the characteristic boundary condition

The explicit time advancement scheme of AVBP leads to the predicted value  $U_{pred}^{n+1}$  :

$$\partial U = U_{pred}^{n+1} - U^n = -\mathcal{R}^P \Delta t \quad (5.2)$$

The total residual  $\mathcal{R}^P$  can be split into two parts :

$$\partial U = -\Delta t (\mathcal{R}_{BC}^P + \mathcal{R}_U^P) \quad (5.3)$$

$\mathcal{R}_{BC}^P$  which will be modified by the BC treatment and  $\mathcal{R}_U^P$  which will be left unchanged. The objective of the BC treatment is to construct the final value of  $U$  at time  $n + 1 : U^{n+1}$

$$U^{n+1} = U^n - \Delta t(\mathcal{R}_{BC}^C + \mathcal{R}_U^P) \quad (5.4)$$

where  $\mathcal{R}_{BC}^C$  is the part of the residual which has been corrected using  $\mathcal{R}_U^P, U^n$ , the type of BC and the target values. The correction is made in the following way :

$$\mathcal{R}_{BC}^C = \mathcal{R}_{BC}^P - \mathcal{R}_{BC}^{in,P} + \mathcal{R}_{BC}^{in,C} \quad (5.5)$$

i.e. by substituting the contribution on the residuals of the predicted "wrong" (see section 5.1) incoming waves  $\mathcal{R}_{BC}^{in,P}$  by their correct values given by the boundary condition  $\mathcal{R}_{BC}^{in,C}$ . A fundamental issue is now : how to choose the residual part to update  $\mathcal{R}_{BC}^P$  ?

In AVBP there are two main methods to update  $\mathcal{R}_{BC}^P$  linked to the spatial and temporal formulation described in the next sections. Other ways to choose the part of update do exist, using :

- the advection terms of the bicharacteristic equations [75]
- a Fourier decomposition of the solution at the boundary [66]
- viscous and reacting terms [199]
- a decomposition between the convective and the acoustic part to build the waves [158, 157]

They won't be presented here because they are not used in AVBP now. More details and comparisons between all these methods can be found in [126] and in AVBP handbook.

### 5.2.2 Spatial formulation<sup>3</sup>

In the spatial formulation, which is the initial form of the NSCBC method [145], the  $\partial W$  are defined from spatial gradients :

$$\partial W = \text{strength} = -\lambda \frac{\partial W}{\partial n} \Delta t \quad (5.6)$$

where  $\lambda$  is a vector containing the eigenvalues of the normal jacobian, i.e. the propagation speed of the waves. This means that the variations of characteristic variables in the spatial formulation are proportional to normal gradients of variables. Following the development of *Poinsot* [145] we can introduce the  $\mathcal{L}$  notation :

$$\mathcal{L} = \lambda \frac{\partial W}{\partial n} \quad (5.7)$$

More informations on NSCBC and on the equivalence with the  $\partial W$  notation can be found in appendix B. To build the boundary condition, as detailed in section 5.2.1, variations of characteristic variables  $\partial W$  must be obtained from residuals. The computations of the `strength` from the residuals  $\mathcal{R}^P$  is then performed using the **normal residual approach**. This corresponds to the NSCBC formulation [145] in

---

<sup>3</sup>*wave* = 1 or 3

which spatial derivatives normal to the boundary are used to update  $\mathcal{R}_{BC}^P$ . To do this, the residual  $\mathcal{R}^P$  must be split in two parts :

$$\mathcal{R}^P = \underbrace{\widehat{\mathcal{R}}_n^P}_{\text{normal part}} + \underbrace{\mathcal{R}_t^P + \mathcal{R}_{Diffusion}^P + \mathcal{R}_{Chemistry}^P}_{\text{non normal part}} \quad (5.8)$$

The NSCBC method assumes that only the normal part must be updated :

$$\mathcal{R}_{BC}^P = \widehat{\mathcal{R}}_n^P \quad (5.9)$$

while the non normal part is unchanged :

$$\mathcal{R}_U^P = \mathcal{R}_t^P + \mathcal{R}_{Diffusion}^P + \mathcal{R}_{Chemistry}^P \quad (5.10)$$

So variations of conservative variables linked to the normal residual can be written as

$$\partial U = -\widehat{\mathcal{R}}_n^P \Delta t \quad (5.11)$$

The normal part of the residuals can be defined in the following way :

$$\widehat{\mathcal{R}}_n^P = N_U \frac{\partial U}{\partial n} \quad (5.12)$$

where  $N_U = A_U n_x + B_U n_y + C_U n_z$  is the normal jacobian in conservative variables. Thanks to the wave decomposition (see App. B.2),  $N_U$  is :

$$N_U = R_U D L_U \quad (5.13)$$

where, as usual,  $D$  is the eigenvalues diagonal matrix. The values of predicted strength are obtained by :

$$\text{strength}^P = \partial W = -L_U \partial U = -L_U R_U D L_U \frac{\partial U}{\partial n} \Delta t = -L_U \lambda_i \frac{\partial U}{\partial n} \Delta t \quad (5.14)$$

Characteristic variables variations are therefore calculated using spatial normal derivates of conserved variables. The BC are applied to impose the ingoing waves  $\text{strength}(\text{in})^C$  and the solution is projected back to the residuals according to eq. 5.5 :

$$\mathcal{R}_{BC}^C \Delta t = (\mathcal{R}_{BC}^P - \mathcal{R}_{BC}^{in,P} + \mathcal{R}_{BC}^{in,C}) \Delta t \quad (5.15)$$

where :

$$\begin{aligned} \Delta t \mathcal{R}_{BC}^P &= R_U \text{strength}^P \\ \Delta t \mathcal{R}_{BC}^{in,P} &= R_U \text{strength}(\text{in})^P \\ \Delta t \mathcal{R}_{BC}^{in,C} &= R_U \text{strength}(\text{in})^C \end{aligned} \quad (5.16)$$

The final value for  $U^{n+1}$  is then :

$$U^{n+1} = U^n - \Delta t \mathcal{R}_{BC}^C - \Delta t \left[ \mathcal{R}_t^P + \mathcal{R}_{Diffusion}^P + \mathcal{R}_{Chemistry}^P \right]$$

Note that this method does not enforce strictly the value of  $U^n$  on the boundary since the tangential, viscous and chemical terms are not accounted for when assessing the corrected value of the incoming waves.

O. Colin in his PhD thesis [36] developed an alternative method for calculating the normal part of the residuals ( $iwave = 3$ ). The idea is to subtract the transverse part of the residual from the total residual.

$$\mathcal{R}_{BC}^P = \mathcal{R}_n^P = \mathcal{R}^P - \mathcal{R}_t^P \quad (5.17)$$

This transverse residual  $\mathcal{R}_t^P$  can be calculated on the boundary using the "complete" centered numerical scheme. On the contrary, gradients normal to the wall used for  $iwave = 1$ , are calculated with a "truncated" and less precise scheme, since, on the boundary, we have access only to cells inside the domain.

### 5.2.3 Temporal formulation<sup>4</sup>

Computing spatial derivatives as in the spatial form can be difficult. An alternative solution is to use time variations to evaluate  $\mathcal{R}_{BC}^P$  : in the temporal formulation originally introduced by *Thompson* [204], the  $\partial W$  are defined as

$$\partial W = \frac{\partial W}{\partial t} \Delta t = \text{strength} \quad (5.18)$$

Characteristic variables variations are then calculated as a temporal variation (not a temporal derivative) of primitive (or conserved) variables. The computation of the variations of characteristic variables *strength* from the residuals  $\mathcal{R}^P$  (as detailed in section 5.2.1) is then performed using the **full residual approach**. In this case the total residual  $\mathcal{R}^P$  is used for  $\mathcal{R}_{BC}^P$  so that  $\mathcal{R}_U^P = 0$  in eq. 5.3. The predicted variations in conservative variables are now

$$\partial U = -\mathcal{R}^P \Delta t \quad (5.19)$$

where  $\mathcal{R}^P$  is the actual residual calculated by AVBP before the application of boundary conditions. This means that only time changes are used to compute waves and there is no need for normal spatial gradients. Now predicted variations of characteristic variables can be computed from the variations of conservative variables using the left passage matrix  $L^U$  (detailed in annex B).

$$\text{strength}^P = \partial W = L_U \partial U = -L_U \mathcal{R}^P \Delta t \quad (5.20)$$

All waves going out of the domain are left unchanged in *strength*<sup>P</sup> while corrected incoming waves *strength*(in)<sup>C</sup> are computed using the relations detailed in annex B. Having modified *strength*(in)<sup>P</sup>, the corrected  $\mathcal{R}_{BC}^C$  is obtained, as for the spatial formulation, by :

$$\mathcal{R}_{BC}^C \Delta t = (\mathcal{R}_{BC}^P - \mathcal{R}_{BC}^{in,P} + \mathcal{R}_{BC}^{in,C}) \Delta t \quad (5.21)$$

where :

$$\begin{aligned} \Delta t \mathcal{R}_{BC}^P &= R_U \text{strength}^P \\ \Delta t \mathcal{R}_{BC}^{in,P} &= R_U \text{strength}(\text{in})^P \\ \Delta t \mathcal{R}_{BC}^{in,C} &= R_U \text{strength}(\text{in})^C \end{aligned} \quad (5.22)$$

<sup>4</sup> $iwave = 2$

and  $U^{n+1}$  can finally be obtained by Eq. 5.4 :

$$U^{n+1} = U^n - \mathcal{R}_{BC}^C \Delta t \quad (5.23)$$

## 5.3 Construire une condition d'entrée caractéristique imposant un débit

### 5.3.1 Objectifs et conditionnement

#### Objectifs

L'objectif de ce chapitre est de donner un exemple de construction de condition limite relaxant de manière caractéristique le débit  $\rho u_n$ , la température  $T$  et les espèces  $Y_k$ . Le débit sera en outre injecté de façon purement normale ( $u_{t1}$  et  $u_{t2} = 0$ ). La difficulté est d'exprimer les ondes à imposer uniquement en fonction des variables cibles  $(\rho u_n, u_{t1}, u_{t2}, T, Y_k)^{\text{target}}$  et des grandeurs connues à l'itération  $n$ .

Cette condition sera utilisée dans les calculs présentés dans la partie III. Elle présente l'avantage de pouvoir être utilisée dans une configuration où la perte de charge entre l'entrée et la sortie est assez grande (et surtout inconnue), et ainsi de relaxer vers la même valeur de débit cible peu importe la densité à l'entrée. De plus, ses propriétés acoustiques sont identiques à celles décrites par *Selle et al.* [187]. Des cas-tests élémentaires ont bien sûr été effectués, mais ils ne seront pas présentés dans cette thèse.

#### Conditionnement : nombre de variables à imposer en 3D

Tout d'abord, il faut prescrire toutes les  $3 + k$  les ondes entrantes<sup>5</sup> pour que le système soit mathématiquement bien posé. L'onde sortante  $\partial W^2$  est laissée intacte, à savoir :

$$\begin{aligned} \partial W^1 & : \text{Onde acoustique entrante} \\ \partial W^3 & : \text{Onde de cisaillement entrante} \\ \partial W^4 & : \text{Onde de cisaillement entrante} \\ \partial W^{4+k} & : \text{Ondes d'espèces entrantes (k)} \end{aligned} \quad (5.24)$$

Cela nous amène à imposer conjointement la température et les espèces au travers des ondes d'espèces. Pour alléger les notations, on peut définir une onde entropique, somme de toutes les ondes d'espèces :

$$\partial W^s = \sum_{j=1}^k \partial W^{4+j}$$

---

<sup>5</sup>écrites avec la notation  $\partial W$ , voir annexe B

### 5.3.2 Calculs des ondes

#### Calcul des ondes d'espèces

On cherche à exprimer  $\partial W^{4+k}$  uniquement en fonction des valeurs cibles  $(\rho u_n, u_{t1}, u_{t2}, T, Y_k)^{\text{target}}$  et des grandeurs conservatives à l'itération  $n$ . En partant du jeu d'Eq. B.58, on a :

$$\partial W^{4+k} = \rho \partial Y_k + Y_k \partial W^s \quad (5.25)$$

Il reste à expliciter  $\partial W^s$ , ce qui est nettement plus délicat. On part de la loi des gaz parfaits<sup>6</sup> :

$$P = \rho r T \quad (5.26)$$

où,

$$r = \mathcal{R} \sum_k \frac{Y_k}{W_k} \quad (5.27)$$

On commence par différentier ces deux relations :

$$\partial P = \rho r \partial T + \rho T \partial r + r T \partial \rho \quad (5.28)$$

avec,

$$\partial r = \mathcal{R} \sum_k \frac{\partial Y_k}{W_k} \quad (5.29)$$

Ensuite, on peut tirer du jeu d'Eq. B.58 les relations caractéristiques suivantes :

$$\partial P = \frac{1}{2} \rho c (\partial W^1 + \partial W^2) \quad (5.30)$$

et,

$$\partial \rho = \frac{\rho}{2c} (\partial W^1 + \partial W^2) + \partial W^s \quad (5.31)$$

En identifiant les Eq. 5.28 et 5.30, on obtient :

$$\frac{1}{2} \rho c (\partial W^1 + \partial W^2) = \rho r \partial T + \rho T \partial r + r T \partial \rho \quad (5.32)$$

Il ne reste plus qu'à remplacer les termes en  $\partial r$  et  $\partial \rho$  donnés par les Eq. 5.29 et 5.31 et de simplifier pour isoler  $\partial W^s$  :

$$\partial W^s = \frac{\rho(\gamma-1)}{2c} (\partial W^1 + \partial W^2) - \rho \frac{\partial T}{T} - \rho \mathcal{R} T \sum_k \frac{\partial Y_k}{W_k} \quad (5.33)$$

Ainsi, en réinjectant l'Eq. 5.33 dans l'Eq. 5.25, on obtient l'expression de l'onde d'espèce  $\partial W^{4+k}$  :

$$\boxed{\partial W^{4+k} = Y_k \left( \frac{\rho(\gamma-1)}{2c} (\partial W^1 + \partial W^2) - \rho \frac{\partial T}{T} - \rho \mathcal{R} T \sum_k \frac{\partial Y_k}{W_k} \right) + \rho \partial Y_k} \quad (5.34)$$

<sup>6</sup>Attention,  $W_k$  est la masse molaire de l'espèce  $k$  à ne pas confondre avec  $\partial W^{4+k}$ , l'onde de l'espèce  $k$ . De plus,  $\mathcal{R}$  est la constante des gaz parfaits ( $8.314 \text{ J.mole}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )

### Calcul de l'onde acoustique entrante

De la même manière que dans le paragraphe précédent, on commence par différentier  $\rho u_n$  :

$$\partial(\rho u_n) = \rho \partial u_n + u_n \partial \rho \quad (5.35)$$

On tire  $\partial \rho$  et  $\partial u_n$  du jeu d'Eq. B.58 :

$$\partial u_n = \frac{1}{2} (\partial W^1 - \partial W^2) \quad (5.36)$$

et,

$$\partial \rho = \frac{\rho}{2c} (\partial W^1 + \partial W^2) + \partial W^s \quad (5.37)$$

Il ne reste plus qu'à remplacer dans l'Eq. 5.35 et à isoler le terme en  $\partial W^1$ , en notant  $M_n$  le nombre de Mach normal ( $u_n/c$ ) :

$$\boxed{\partial W^1 = \frac{2}{\rho(M_n+1)} \partial(\rho u_n) - \frac{2(M_n-1)}{\rho(M_n+1)} \partial W^2 - u_n \partial W^s} \quad (5.38)$$

### Calcul des ondes de cisaillement

Les ondes de cisaillement peuvent être obtenues directement à partir du jeu d'Eq. B.58 :

$$\boxed{\partial W^3 = \partial u_{t1}} \quad (5.39)$$

$$\boxed{\partial W^4 = \partial u_{t2}} \quad (5.40)$$

### 5.3.3 Implémentation pratique

En théorie, une condition non réfléchissante, où la vitesse d'entrée est normale à la condition limite et qui ne modifie pas la composition peut se traduire de manière extrêmement simple :

$$\begin{aligned} \partial W^1 &= 0 \\ \partial W^3 &= 0 \\ \partial W^4 &= 0 \\ \partial W^{4+k} &= 0 \end{aligned} \quad (5.41)$$

Dans la pratique, une telle condition est exposée à une dérive moyenne de toutes les variables, et de plus, il est impossible de prescrire un ensemble de valeurs cibles vers lesquelles la condition limite doit relaxer. Pour obtenir une condition relaxant de manière caractéristique le débit  $\rho u_n$ , la température  $T$  et

les espèces  $Y_k$ , il faut, en plus des expressions des ondes obtenues dans les Eq. 5.34, 5.38, 5.39 & 5.40, utiliser quelques hypothèses :

- On remplace la différentielle  $\partial X$  par sa différence discrète  $X^{\text{target}} - X^n$ , relaxée par un coefficient<sup>7</sup>  $K_X \Delta t$ . Par exemple la différentielle  $\partial(\rho u_n)$  devient  $K_{\rho u_n} \Delta t ((\rho u_n)^{\text{target}} - (\rho u_n)^n)$
- Pour être non réfléchissant, on fait l’hypothèse que toute onde entrante n’est pas fonction d’une onde sortante, ce qui revient ici à dire  $\partial W^2 = 0$
- On peut aussi ”découpler” les ondes en supposant que toutes sont indépendantes deux à deux.

On obtient dans notre cas le système qui constituera les ondes imposées par la condition limite :

$$\begin{aligned}
 \partial W^1 &= \frac{2}{\rho(M_n+1)} K_{\rho u_n} \Delta t ((\rho u_n)^{\text{target}} - (\rho u_n)^n) \\
 \partial W^3 &= K_t \Delta t (0 - u_{t1}^n) \\
 \partial W^4 &= K_t \Delta t (0 - u_{t2}^n) \\
 \partial W^{4+k} &= -\rho Y_k \left( \frac{K_T \Delta t (T^{\text{target}} - T^n)}{T} + \mathcal{R}T \sum_k \frac{K_Y \Delta t (Y_k^{\text{target}} - Y_k^n)}{W_k} \right) + \rho (Y_k^{\text{target}} - Y_k^n)
 \end{aligned} \tag{5.42}$$

## 5.4 Lois de paroi

Le principe de fonctionnement des lois de paroi adiabatiques et non-adiabatiques sont présentés respectivement dans les Chap. 5.4.1 et 5.4.2. Pour plus de détail, nous invitons le lecteur à se reporter à la thèse de *Patrick Schmitt* [175] qui a implémenté et testé ce traitement, ainsi qu’à l’article à paraître [176] dans *J. Fluid. Mech.* Il s’agit d’une loi basée directement sur les approches RANS classiques. Cette loi a été testée en détail dans des canaux turbulents [175].

### 5.4.1 Lois de parois adiabatiques

La loi de paroi adiabatique (appliqués aux cas AD\_COLD, AD\_STEADY et AD\_FORCEXX présentés au Chap. 6.3) fonctionne selon le principe suivant.

Le cisaillement à la paroi  $\tau_{wall} = \rho u_\tau^2$  est calculé de façon itérative sur chacune des faces du mur avec :

- La hauteur de la cellule  $y_{wall}$  perpendiculaire au mur.
- La vitesse moyenne  $u_2$  des premiers point dans l’écoulement<sup>8</sup>.
- La viscosité  $\nu_{wall}$  et la densité  $\rho_{wall}$  au mur.

Les variables adimensionnées par la distance au mur et la vitesse dans la couche limite sont définies par :

$$y^+ = \frac{y_{wall} u_\tau}{\nu_{wall}} \quad u^+ = \frac{u_2}{u_\tau} \tag{5.43}$$

<sup>7</sup>Attention,  $X$  est ici un indice, et les différents  $K_X$  sont prescrits par l’utilisateur.

<sup>8</sup>La vitesse  $u_2$  est en fait la moyenne de tous les points de la cellule collée contre le mur qui ne sont pas sur le mur lui-même.

Ensuite, la vitesse de frottement est calculée suivant la valeur de  $y^+$ , soit par une relation linéaire (Eq. 5.44), soit par une loi de paroi logarithmique (Eq. 5.45).

$$y^+ \leq 11.445 \quad : \quad u^+ = y^+ \quad (5.44)$$

$$y^+ > 11.445 \quad : \quad u^+ = \kappa^{-1} \ln(Ey^+) \quad (5.45)$$

$$\text{avec } \kappa = 0.41 \quad \text{et} \quad E = 9.2$$

De plus, le flux de chaleur normal et la vitesse normale au mur sont fixés à zéro. Ainsi, la partie "Dirichlet" de cette condition limite est équivalente à un mur glissant, ce qui implique un traitement particulier des coins [175].

## 5.4.2 Lois de parois non adiabatiques

On peut faire évoluer la condition de loi de paroi adiabatique présentée au chapitre 5.4.1 afin d'imposer des pertes thermiques (appliqués aux cas HL\_STEADY et HL\_FORCEXX présentés au Chap. 6.3).

La température au mur  $T_{wall}$  permet tout d'abord de calculer les propriétés thermodynamiques ( $\nu_{wall}, \rho_{wall}, C_{p_{wall}}$ ). Ensuite, en utilisant la température moyenne  $T_2$  des premiers points dans l'écoulement<sup>9</sup>, on peut définir la température adimensionnée :

$$T^+ = \frac{\rho_{wall} C_{p_{wall}} u_\tau (T_{wall} - T_2)}{q_{wall}} \quad (5.46)$$

$$\text{avec } q_{wall} = \frac{T_{ref} - T_{wall}}{R_{wall}} \quad (5.47)$$

Ayant déjà déterminé la vitesse de frottement  $u_\tau$ , la température au mur est calculée suivant la valeur de  $y^+$  selon une loi similaire à celle pour la vitesse (Eq. 5.44 & 5.45).

$$y^+ \leq 11.445 \quad : \quad T^+ = Pr y^+ \quad (5.48)$$

$$y^+ > 11.445 \quad : \quad T^+ = \kappa^{-1} Pr_t \ln(Fy^+) \quad (5.49)$$

$$\text{avec } \kappa = 0.41 \quad \text{et} \quad F = 2.96$$

Le calcul de  $R_{wall}$  pour les calculs de la partie III sera présenté en détail dans le Chap. 9.4. Toutefois, il est important de noter que lorsque  $R_{wall} \rightarrow \infty$ , le comportement de la loi de paroi tend vers la loi adiabatique, et lorsque  $R_{wall} \rightarrow 0$ , il tend vers une loi isotherme. Cette approche permet d'éviter de spécifier la température aux parois et constitue une première approche vers un calcul dual combustion / thermique dans les parois.

---

<sup>9</sup>La température  $T_2$  est en fait la moyenne de tous les points de la cellule collée contre le mur qui ne sont pas sur le mur lui-même.

## **Troisième partie**

# **Simulations des instabilités de combustion de la chambre *DESIRE***



# Table des Matières

<b>6</b>	<b>Presentation of the DESIRE test rig</b>	<b>105</b>
6.1	Experimental test rig . . . . .	105
6.2	Computational domain and resulting issues . . . . .	108
6.2.1	Choice of computational domain . . . . .	108
6.2.2	Resulting issues . . . . .	108
6.3	Operating conditions . . . . .	109
6.3.1	Reference operating point . . . . .	109
6.3.2	Cases simulated . . . . .	110
<b>7</b>	<b>Additional diagnostic tools</b>	<b>111</b>
7.1	Experimental diagnostics . . . . .	111
7.1.1	Cold flow diagnostics . . . . .	111
7.1.2	Hot flow diagnostics . . . . .	112
7.1.3	Acoustic diagnostics . . . . .	113
7.2	Helmholtz solver : <i>AVSP</i> . . . . .	113
<b>8</b>	<b>Cold flow simulations</b>	<b>115</b>
8.1	Cold flow qualitative analysis . . . . .	115
8.1.1	Presentation and objectives . . . . .	115
	Presentation of comparisons performed . . . . .	115
	Objectives of cold flow simulations . . . . .	115
8.1.2	Flow analysis . . . . .	116
	General flow behaviour . . . . .	116
	Qualitative effect of the law of the wall . . . . .	117
8.2	Comparisons with experimental data . . . . .	118
8.2.1	Comparisons using "no-slip" wall treatment . . . . .	118
8.2.2	Comparisons using "wall law" treatment . . . . .	118
8.3	Influence of numerical scheme . . . . .	125
<b>9</b>	<b>Non pulsated reacting flow</b>	<b>127</b>
9.1	Reduction of chemical complexity . . . . .	127
9.1.1	Gases composition . . . . .	127

## TABLE DES MATIÈRES

---

9.1.2	Kinetic scheme for methane . . . . .	128
9.2	Mixing analysis . . . . .	130
9.2.1	Objectives of mixing studies . . . . .	130
9.2.2	Unsteady behaviour : phenomenology . . . . .	130
9.2.3	Mean behaviour . . . . .	131
9.2.4	Combustion regime . . . . .	131
9.2.5	Influence of numerical scheme on mixing . . . . .	131
9.3	Adiabatic reacting cases . . . . .	133
9.3.1	Objectives of unforced flow studies . . . . .	133
9.3.2	Verification of thickened zone . . . . .	133
9.3.3	Reacting flow dynamics . . . . .	134
9.3.4	Unsteady flame structure . . . . .	136
	Takeno index . . . . .	136
	Three-dimensional flame structure . . . . .	136
	Local one-dimensional flame structure . . . . .	136
9.3.5	Comparison of mean flame position . . . . .	138
9.4	Non adiabatic reacting cases . . . . .	138
9.4.1	Heat losses computation . . . . .	138
9.4.2	Mean heat losses . . . . .	140
9.4.3	Instantaneous heat losses . . . . .	141
9.4.4	Comparison with experimental data . . . . .	142
9.4.5	Influence of heat losses on the flow field . . . . .	142
9.5	Acoustic analysis using Helmholtz solver . . . . .	144
9.6	Unsteady modes in the unforced case . . . . .	145
<b>10</b>	<b>Pulsated reacting cases</b>	<b>147</b>
10.1	Phenomenology and forcing method . . . . .	147
10.1.1	Phenomenology . . . . .	147
10.1.2	Forcing method . . . . .	148
10.2	Self amplification of excitation . . . . .	150
10.3	Unsteady modes in the forced case . . . . .	151
10.4	Phase-locked averaged analysis . . . . .	152
10.4.1	Observed mechanism . . . . .	152
10.4.2	Influence of heat losses . . . . .	153
10.5	Flame transfer function . . . . .	154
10.5.1	Definition of $n$ and $\tau$ for fuel pulsation . . . . .	154
	Original definition . . . . .	154
	Low frequency asymptotic value . . . . .	154
10.5.2	Evaluation of $n$ and $\tau$ for fuel pulsation . . . . .	155

10.5.3	Comparison with experiment . . . . .	155
10.6	Linearity of the flame response . . . . .	156
10.7	Thermal load of the structure . . . . .	157
10.7.1	Global heat fluxes fluctuations . . . . .	157
10.7.2	Local heat fluxes fluctuations . . . . .	158
	Heat losses along the cycle . . . . .	158
	Unsteady heat losses at the wall . . . . .	159
10.8	Mechanical load of the structure . . . . .	160
10.8.1	Prototype of fluid / structure coupling . . . . .	160
10.8.2	Coupling results . . . . .	161
	Results in the unforced case . . . . .	161
	Results in the forced case . . . . .	162

## TABLE DES MATIÈRES

---

# Chapitre 6

## Presentation of the DESIRE test rig

### 6.1 Experimental test rig

The test rig is a 125 kW lab-scale burner developed by University of Twente and Siemens PG in the framework of the European Community project DESIRE (Design and Demonstration of Highly Reliable Low  $NO_x$  Combustion Systems for Gas Turbines, see section 1.3.1). The experiment was specifically developed for the project in order to investigate combustion instabilities, their impact on the liner but also to facilitate a full LES computation from inlet to chimney (no small holes which could decrease dramatically the time step), thereby suppressing uncertainties related to boundary conditions. This particular point will be detailed further in section 6.2.

The Test-rig combustion and cooling air is provided by a Diesel engine driven dual scroll compressor with a maximum mass flow of 1000 m<sup>3</sup>/h. Natural gas is supplied from a small natural gas compressor station, having a maximum mass flow of 60 m<sup>3</sup>/h. Both fuel and air flow rates are controlled by a *Bronckhorst* mass flow controller with an accuracy of less than 1%. The air that is used for combustion is preheated by a 120 kW electrical preheater, able to heat up 280 liters per second from room temperature to 300°C.

The natural gas flow is led through a pulsator (Moog valve), which is able to pulsate this flow with a maximum frequency of 400 Hz and a pulsation level of several percentages of the mean mass flow, dependent on the operating condition and the frequency of oscillation. The pulsator is discussed in more detail in section 10.1.

Figure 6.1 presents the test-rig as installed in University of Twente's laboratory, i.e. mounted vertically in a specially designed frame. Optical access and vibrometer windows are clearly visible as well as the cooling air feeding lines but the complexity of the setup doesn't give much insight on the inner geometry.

Figure 6.2 now introduces the whole inner geometry and summarises the flow path. Figure 6.3 shows closer views of the various flow passages. The preheated air comes out of the compressor into the air supply room. Then it flows into the plenum through the acoustic decoupling system pipes (Fig. 6.3-b).

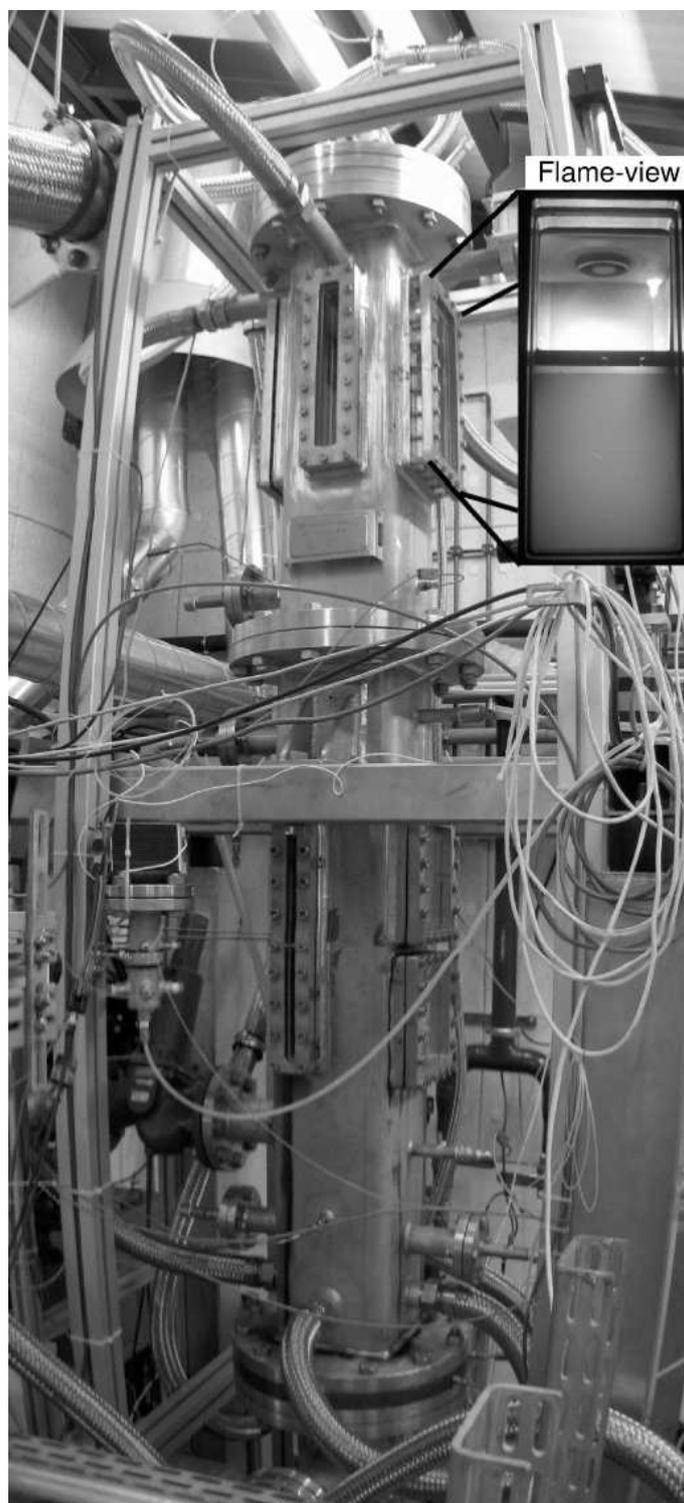


FIG. 6.1 - *Photograph of DESIRE setup and inserted view of the flame through Suprasil quartz glass windows.*

The principle of the acoustic decoupling system is to act like an acoustically fully reflecting device due to the high velocity ratio between the upstream and downstream plenum and the small pipes.

After the swirler (Fig. 6.3-a), the air mixes with natural gas which is injected at a normal angle into the air cross flow through four small holes to ensure sufficient mixing. The mixture then reaches the very long combustion chamber ( $\approx 2$  m) where the flame is stabilized and burnt gases leave the chamber through the outlet flange (Fig. 6.3-c). A cooling channel surrounds the combustion chamber in order to maintain wall temperatures below  $T = 1200K$ .

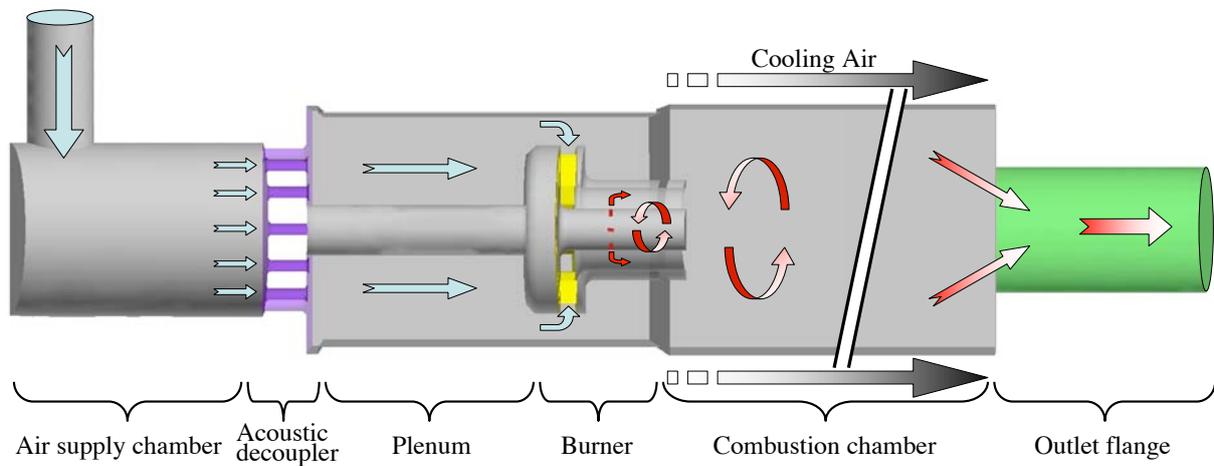


FIG. 6.2 - Full LES computational domain and summarization of the flow path to the combustion chamber.

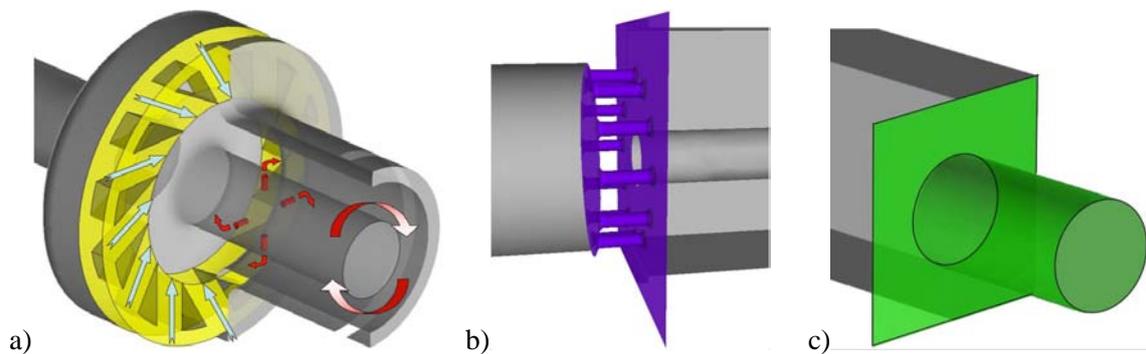


FIG. 6.3 - Details of the domain : a) swirler vanes, b) acoustic decoupling system and c) outlet flange.

## 6.2 Computational domain and resulting issues

### 6.2.1 Choice of computational domain

Choosing the limits of a computational domain is a difficult compromise between accuracy requirements and computational costs. For usual RANS simulations which expect to capture only basic hydrodynamics of the flow, the computational domain can be reduced to the very region of interest, i.e the combustion chamber (Fig. 6.4-a). Some low cost simulations can even be done by computing a quarter of a domain starting after the swirler vanes and getting rid of their geometrical complexity. Strong (and hazardous) assumptions are most of the time hidden behind these reduced domains :

- The mixture feeding the flame is supposed to be fully premixed.
- The acoustics of the setup is completely ignored.
- The inlet velocity profiles are tuned to mimic the real ones or even worse left uncertain.

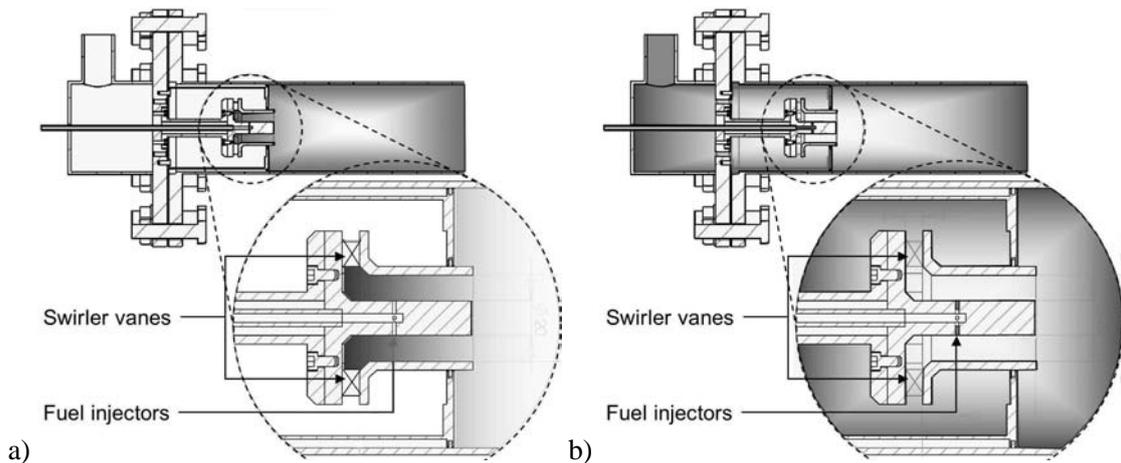


FIG. 6.4 - *Computational domain issues : a) domain usually selected for low cost simulations. b) domain required for accurate simulations.*

### 6.2.2 Resulting issues

Capturing combustion instabilities needs at least to treat properly some crucial phenomena :

- The efficiency of the mixing must be well evaluated.
- The velocity profiles in the mixing region and at the inlet of the chamber must be realistic.
- The acoustics of the setup must be reproduced adequately.

Therefore, the computational domain required for accurate LES (Fig. 6.4-b) is very different from the standard domain (Fig. 6.4-a) :

- The fuel jets in the air cross flow must be explicitly computed and sufficiently discretized. The resulting meshes are shown in section 4.4.
- Instead of tuning inlet velocity profiles [186], another strategy consists in computing the inlet and start the domain further upstream (Fig. 6.4-b). As a matter of fact, the swirler vanes have to be explicitly computed.
- The boundary condition must be placed at a location where they can be acoustically well defined. Then, by knowing the impedance of the Boundary condition [187], and having the right temperature distribution (for speed of sound) in the domain, potentially self-excited acoustic modes may appear.

So the LES computational domain (Fig. 6.4-b) includes all parts from the air supply room to the outlet flange. This is necessary to have the right acoustic impedance for the combustion chamber, to predict accurately the chamber acoustic modes and to minimize the uncertainties on boundary conditions. The acoustic behaviour upstream of the combustion chamber is ensured by the fully reflecting acoustic decoupling system (Fig. 6.3-b) and downstream of the combustion chamber, the impedance at the outlet (Fig. 6.3-c) is controlled through the NSCBC linear relaxation method [187] (fully non-reflecting).

The cooling channel is not explicitly simulated but its thermal properties are taken into account in the wall law treatment. This specific point will be detailed further in section 9.4.

## 6.3 Operating conditions

### 6.3.1 Reference operating point

The reference operating point investigated is basically the same for cold, reacting and pulsated flows :

- The air supply room feeds the chamber with 72.4 g/s of air, preheated at 573 K. This leads to a Reynolds number of 22000 (based on the bulk velocity at the burner mouth and its diameter) and a swirl number [70] of 0.7 (at the same location).
- The same amount of air (72.4 g/s) but this time at ambient temperature (298 K) flows into the cooling channel. Therefore, the corresponding Reynolds number of 5700 (based on the bulk velocity in the channel and its height) allows to consider it as fully turbulent.
- The natural gas is injected at ambient temperature (298K) at a flow rate of 3.06 g/s. Note that the natural gas is replaced here by methane (76.7% in mass) and nitrogen (23.3% in mass), so that the global equivalence ratio of the setup is 0.55.
- The mean pressure of the test rig is 1.5 bar.

Both fuel and air inlets mass flow rates are controlled using the "mass flow rate relaxed" Boundary Condition presented in Chap. 5.3.

### 6.3.2 Cases simulated

Table 6.1 summarizes the parameters of the different LES cases.

CASE	NS_COLD	AD_COLD	AD_STEADY	AD_FORCE05	AD_FORCE10	AD_FORCE15	AD_FORCE30	AD_FORCE50	AD_FORCE80	HL_FORCE15	HL_STEADY
Wall law	None	Adiabatic								Heat loss	
$\dot{m}_A$	72.4 g/s at 573 K										
$\dot{m}_F$	N/A	N/A	3.06 g/s at 298 K								
$F$ (Hz)	N/A	N/A	N/A	300 Hz							N/A
$\dot{m}_F' / \dot{m}_F$	N/A	N/A	N/A	05%	10%	15%	30%	50%	80%	15%	N/A

TAB. 6.1 - Cases simulated and corresponding operating parameters.

The reader must be aware of some important points :

- No fuel is injected at all in the cold flow simulations (cases NS\_COLD & AD\_COLD).
- The cold flow simulations (cases NS\_COLD & AD\_COLD) were done using a 3<sup>rd</sup> order in space and time numerical scheme (*TTGC*), whereas the reacting simulations employed a 2<sup>nd</sup> order scheme (*Lax-Wendroff*) mainly for computational costs reasons.
- No wall law treatment is applied in the preliminary cold flow simulation (case NS\_COLD). It is replaced by a standard "no-slip" adiabatic wall Boundary Condition.
- The study on the linearity of the flame response (cases AD\_FORCE05 to AD\_FORCE80) is performed with adiabatic law of the wall.

Results related to the various cases are described respectively in the following chapters :

- Case NS\_COLD : Section 8.2.1 only.
- Case AD\_COLD : Chapter 8 excepts section 8.2.1.
- Case AD\_STEADY : Chapter 9 excepts section 9.4.
- Case HL\_STEADY : Section 9.4 to 9.6.
- Cases AD\_FORCEXX : Sections 10.1 to 10.5.
- Case HL\_FORCE15 : Sections 10.3, 10.4, 10.7 and 10.8.

# Chapitre 7

## Additional diagnostic tools

The aim of this chapter is to present the various experimental techniques available for comparison with LES but also the *Helmholtz* solver which can be useful for joint analysis of modes susceptible to occur [185].

### 7.1 Experimental diagnostics

#### 7.1.1 Cold flow diagnostics

The LES velocity profiles are compared with measured profiles from a water tunnel experiment. The water tunnel is a geometrically exact copy of the combustion test rig. The fluid that is used is water instead of air. Due to experimental limitations, the Reynolds number in the water tunnel is a third of the Reynolds number in the gaseous rig ( $Re \approx 21,000$  evaluated with the bulk velocity and the diameter at the mouth of the burner, i.e. 50 mm). Fortunately, the self similarity of turbulent flows ensure that dimensionless velocities are comparable.

The water tunnel is made out of perspex, allowing forward scattering Laser Doppler Velocimetry (LDV) to measure the velocity profiles downstream of the burner exit. The accuracy of the system is less than 0.1% of its full measurement scale, whereas the resolution depends on the size of the measurement volume. A 400 mm focal-length lens with a measurement volume of 6.5x0.22x0.22 mm is used. The measured velocity at a discrete point is the average velocity in the measurement volume. For all measured velocities, the axis of the measurement volume is aligned with the direction in which the velocity gradients are lowest, thereby increasing the resolution.

Data acquisition is done by a DIFA spectral analyser installed on a PC. The transient velocity signals from the photomultipliers are sampled at 800 Hz for 40.96 seconds. Subsequently, the mean value and the variance of the 32,768 samples are determined. The power spectral density (PSD) of the measured signal shows that the sampling frequency is large enough to catch most of the phenomena in the flow, i.e. the PSD at 400 Hz is more than two orders of magnitude lower than the velocity amplitudes at lower

frequencies.

To compare simulation results (using air as a medium) with water tunnel results the mean velocities and the variances are non-dimensionalized by the bulk velocity at the burner mouth  $U_B$  and by  $(U_B)^2$ , respectively [169].

### 7.1.2 Hot flow diagnostics

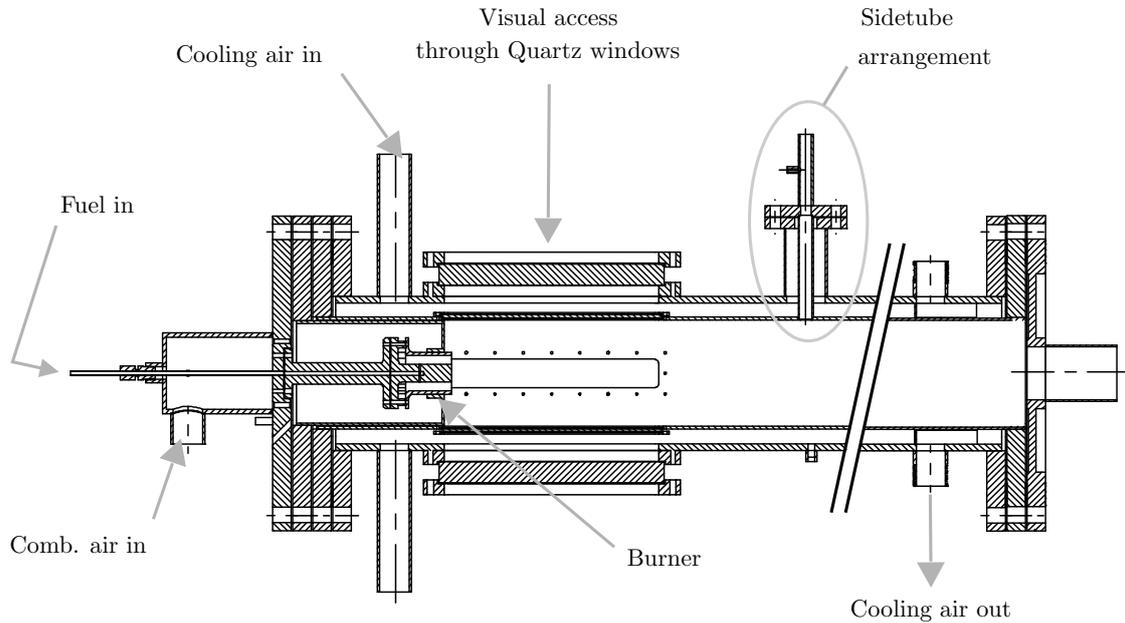


FIG. 7.1 - Overview of the main components in the flame zone of the DESIRE setup.

The combustion process can be observed optically through quartz glass windows that are mounted in the liner and pressure vessel on 3 sides of the combustion section (Fig. 7.1). The view port size is  $120 \times 150$  mm, which is large enough to see the whole flame.

It is often assumed that  $CH^*$  (electronically excited molecules are indicated with a ‘\*’) is linearly related to the heat release rate.  $CH^*$  is only present in the main reaction zone, in contrast to  $OH$ , which survives after it due to the slow recombination reactions. Since  $OH$  has a steep increase in the main reaction zone [121] not its concentration but its gradient is an indication for the flame front, which requires a better signal quality.

The radical  $CH^*$  is measured by chemiluminescence with a high speed camera (Redlake) supplied with an intensifier (LaVision). A 430 nm band pass filter (bandwidth of 10 nm) is used to filter the  $CH^*$  radiation at the  $CH^*$  electronic band. The camera is gated for  $100 \mu s$  and a movie of at least 100 images is recorded at 50 Hz. The images of the movie are corrected for background and non linear camera response and averaged.

A drawback of chemiluminescence is that no local flame behaviour can be studied since it is a line of sight technique, which means that the measured  $CH^*$  concentration is the integral of all  $CH^*$  in the line of sight of the camera. When the shape of the flame is known, special techniques can be applied to obtain a planar picture from line of sight measurements, e.g. Abel transformation ('onion peeling') for axi-symmetrical data [1]. Although the whole flow-field is not axi-symmetrical due to the square combustor, this assumption can be considered as valid for the flame itself. However, the reflections and cut off near the wall as well as the aberrations of Abel transformation close to the axis yield non physical signal in these regions.

Moreover, in terms of thermo-acoustic measurements, the integrated  $CH^*$  chemiluminescence measurements can be viewed as a direct measure for the volume-integrated heat release rate.

### 7.1.3 Acoustic diagnostics

To obtain the acoustic response of the system due to combustion, pressure measurements are made using Kulite pressure sensors. To decrease the thermal load on these sensors, they are placed in a sidetube (Fig. 7.1) ended by an anechoic tube. Furthermore, to allow high pressure measurements, the backside of the sensor is connected to the pressurised rig using a long thin tube, which damps out all dynamic pressure signal on the back side, only providing a static back pressure. The pressure sensor signal is amplified and subsequently acquired using a Siglab data acquisition system at a sample frequency of 2.56 kHz.

## 7.2 Helmholtz solver : AVSP

If the reactive Navier-Stokes equations are linearized around a mean state (noted  $\bar{x}$ ), the general form of the Helmholtz equation is obtained [39, 147],

$$\nabla \cdot (c^2 \nabla p') - \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} = -(\gamma - 1) \frac{\partial \dot{\omega}_T}{\partial t} - \gamma \bar{p} \nabla \vec{u} : \vec{u} \quad (7.1)$$

where  $p'$  is the pressure perturbation,  $\dot{\omega}_T$  is the unsteady local heat release,  $\bar{p}$  the average pressure and  $c$  is the local sound speed.  $c$  changes considerably in reacting flow : it depend on the local value of  $\gamma$ , on the molecular weight  $W$  and on temperature  $T$  :  $c = \sqrt{\gamma \mathcal{R} T / W}$ , where  $\mathcal{R} = 8.314 J / (mol K)$ . The two source terms in the RHS of Eq. 7.1 are related to the unsteady combustion and turbulent noise, respectively. To obtain this equation, the following assumptions are needed :

- Low Mach number flow
- No volume forces
- Linear acoustics (i.e., small perturbations)
- Large scale fluctuations
- Homogeneous mean pressure
- Constant polytropic coefficient  $\gamma$

The wave equation is usually not solved in the time domain but in the frequency domain by assuming harmonic pressure variations at frequency  $f = \omega/(2\pi)$  for pressure and for local heat release perturbations, where  $i^2 = -1$

$$p' = \Re (P'(x, y, z) \exp(-i \omega t)) \quad (7.2)$$

$$\dot{\omega}_T = \Re (\Omega'_T(x, y, z) \exp(-i \omega t)) \quad (7.3)$$

Introducing Eq. 7.3 into Eq. 7.1 and neglecting the turbulent noise compared to the combustion forcing lead to the Helmholtz equation where the unknown quantities are the complex pressure oscillation amplitude  $P'$  at frequency  $f$  and the heat release amplitude field  $\Omega'_T$  :

$$\nabla \cdot (c^2 \nabla P') + \omega^2 P' = i\omega(\gamma - 1)\Omega'_T \quad (7.4)$$

This equation is the basis of three-dimensional Helmholtz codes. Knowing the sound speed ( $c$ ) distribution, i.e. knowing the local composition and temperature, provides the eigenfrequencies  $f_k$  and the associated structure of the mode  $P'_k(x, y, z)$ . At this point, two approaches of increasing complexity are found :

- First, the effects of unsteady combustion can be neglected by setting  $\Omega'_T = 0$ . This is equivalent to finding the eigenmodes of the burner, taking into account the presence of the flame through the mean temperature field but neglecting the flame effect as an acoustic active element.
- In a second step, the active effect of combustion can be taken into account if a model linking  $\Omega'_T$  and  $P'$  can be derived to close Eq. 7.4. This is usually the difficult part of the modeling because it requires the determination of the transfer function between acoustics and flame.

For the present study, the effects of the flame were neglected ( $\Omega'_T = 0$ ) and a parallel iterative solver called *AVSP* was used to solve Eq. 7.4 on hybrid meshes [97]. The required mean field of sound speed is obtained by postprocessing the LES results for cases *AD\_STEADY* and *HL\_STEADY* so that the effect of flame through the mean temperature is properly accounted for. The impedances imposed at the inlet and outlet correspond to a velocity and a pressure node respectively.

Since studies of low/medium frequency instabilities do not require refined meshes, eigenmodes of large configurations can be computed in a reasonable time thanks to the parallelism of *AVSP*. Details about solving Eq. 7.4 with general boundary conditions and acoustically active flame are discussed in [11, 12, 113]. Other examples of joint use of LES and Helmholtz solvers to investigate combustion instabilities are given in [112, 185].

# Chapitre 8

## Cold flow simulations

### 8.1 Cold flow qualitative analysis

#### 8.1.1 Presentation and objectives

The non reacting cases are first investigated in this chapter, i.e. cases NS\_COLD and AD\_COLD. Results presented in sections 8.1 & 8.2 use the TTGC numerical scheme (Third order in space and time [37]) on a mesh containing 900.000 tetrahedral cells.

#### Presentation of comparisons performed

As introduced in section 4.6, LES mean and RMS resolved velocity fields are susceptible to be compared to experimental data (measured with LDV, see section 7.1.1). Unfortunately, LDV equipment required to measure high velocities is not available at University of Twente. By using a *Reynolds* similarity, it is possible to measure accurately lower velocities in a water tunnel and compare the resulting data with LES.

The location of 1D velocity profiles where comparisons are performed (see section 8.2) are presented on Fig. 8.1, as well as the planes defined as "Transverse plane" and "Longitudinal plane" which will be used along the next chapters.

#### Objectives of cold flow simulations

The main objectives of non-reacting simulations are :

- The validation of cold flow LES in a complex geometry.
- The evaluation of its accuracy on the RMS fields.
- The influence of some numerical parameter (wall treatment, scheme, mesh)

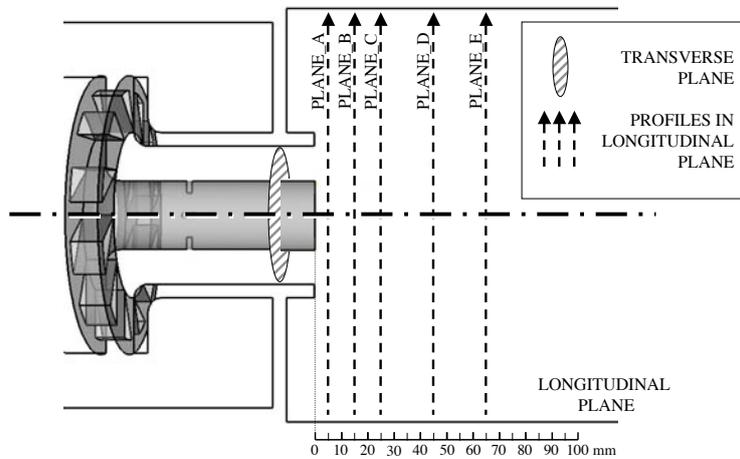


FIG. 8.1 - Cross section of the test geometry and location of the planes used in Fig. 8.4 to 8.10.

The cold flow behaviour will be first qualitatively analysed before comparing with water tunnel LDV measurements.

### 8.1.2 Flow analysis

#### General flow behaviour

The general mechanism leading to the opening of a swirled jet is well known [70, 72, 106] : Depending on the intensity of the swirl, the jet is susceptible to break down and form a central recirculation zone, where axial velocities are negative (Fig. 8.2). The critical value of the swirl number where this bifurcation occurs [72, 106] is  $S_c = 0.6$ .

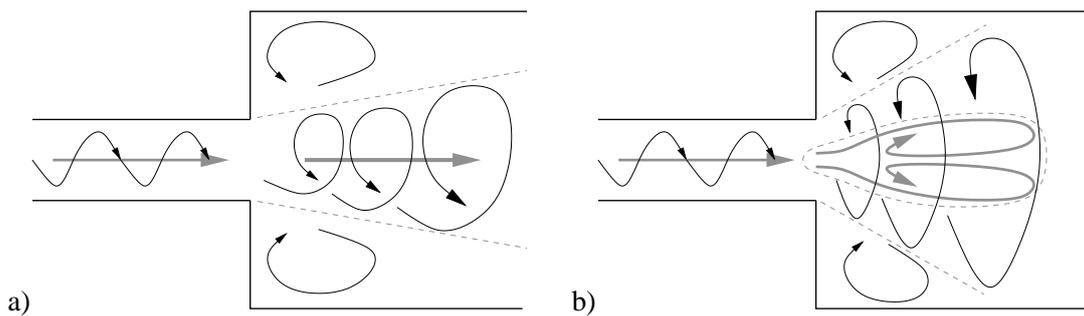


FIG. 8.2 - Opening of a swirled jet in a dump : a) low swirl ( $S < 0.6$ ); b) high swirl ( $S > 0.6$ ).

The cold flow simulation clearly evidences a behaviour similar as the one described on Fig. 8.2-b, which is consistent with the swirl number of  $S = 0.7$ . Instantaneous axial velocity fields in longitudinal plane are displayed on Fig. A.1 & A.2. The white isoline also delimits the region where backflow occurs (i.e.  $u < 0$ ). The central recirculation zone which closes around  $x = 330$  mm (see Fig. A.1) is more or

less axisymmetric. No unsteady coherent structure (known as Precessing Vortex Core [70, 200]) destabilises this symmetry. However, some vortices coming out of the lips of the burner seems to interact with the opening jet.

### Qualitative effect of the law of the wall

The difference between the flows computed with either "no slip" (case NS\_COLD) or "wall law" (case AD\_COLD) wall treatment is not obvious. Instantaneously, Fig. A.2 tends to demonstrate that the intensity of lateral recirculation zones are decreased with the use of no slip walls. The impact on the swirled jet itself is illustrated on Fig. 8.3.

The upper half of Fig. 8.3 shows the mean axial velocity field in longitudinal plane and delimits recirculation zones for case AD\_COLD while the lower half displays the same field for case NS\_COLD. This confirms that the lateral recirculation zones are decreased by the use of no slip walls. The swirled jet also seems slightly more opened for case NS\_COLD, which changes the mean shape of central recirculation zone.

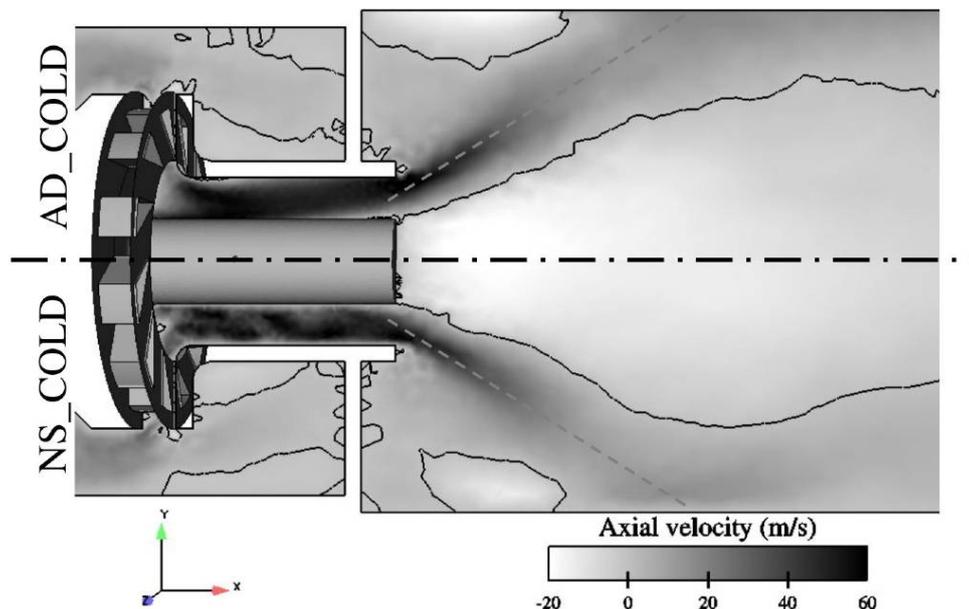


FIG. 8.3 - Comparison of mean opening angle of the swirled jet ; Top : Wall Law ; Bottom : Wall No Slip ; Black line : recirculation zone.

All of these differences will be easier to evidence on quantitative comparisons with experiment (section 8.2).

## 8.2 Comparisons with experimental data

### 8.2.1 Comparisons using "no-slip" wall treatment

LES and LDV data are first compared using one-dimensional velocity profiles on the longitudinal plane at several locations from the burner exit (Plane\_A : 5mm, Plane\_B : 15mm, Plane\_C : 25mm, Plane\_D : 45mm and Plane\_E : 65mm) (see location of cuts on Fig. 8.1).

Fig. 8.4 to 8.6 show preliminary simulations using a "no slip" wall treatment (case NS\_COLD) while Fig. 8.7 to 8.9 employ a wall law (case AD\_COLD). The scale for all profiles in Fig. 8.4 to 8.9 are the same. Experimental data and LES resolved fields are non dimensionalised by the bulk velocity at the mouth of the burner.

LES of case NS\_COLD captures more or less the shape of the mean and RMS profiles. Unfortunately, the agreement on the amplitude of the profiles is very poor. The zero velocity imposed associated with coarse mesh at the walls clearly has a strong and undesirable effect on the flow.

### 8.2.2 Comparisons using "wall law" treatment

Using from now on the wall law treatment, Fig. 8.7 to 8.9 show the good agreement between experimental data and LES results in both shape and amplitude of the mean velocity components and even on their RMS fluctuations. The opening angle of the swirled jet, the intensity of central recirculation zone and the re-attachment of the lateral recirculation zones are predicted correctly.

As introduced qualitatively in section 8.1 (Fig. 8.3), the opening angle of the swirled jet is clearly decreased by the use of wall law treatment. Comparing Fig. 8.4-a and Fig. 8.7-a clearly demonstrates this point.

In summary, the joint use of wall function and *Smagorinsky* subgrid model seems to perform very well. A more sophisticated subgrid scale model is not required (e.g. Dynamic *Smagorinsky* [63]). This choice is supported by the simulations of *Cabot & Moin* [20] using a similar discretisation and wall-function approach on channel flows.

The impact of the numerical scheme is still to be investigated and will be detailed in section 8.3.

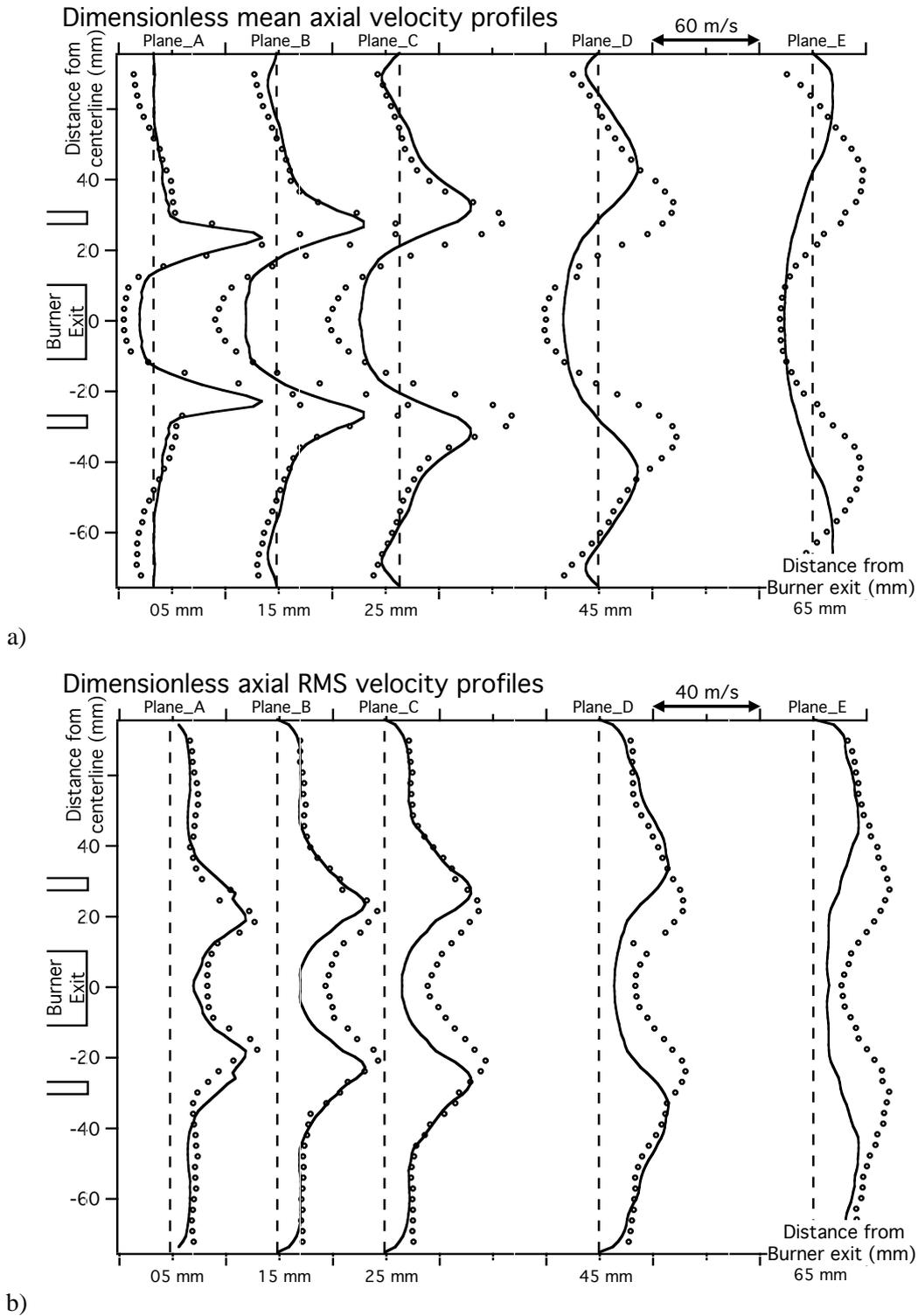
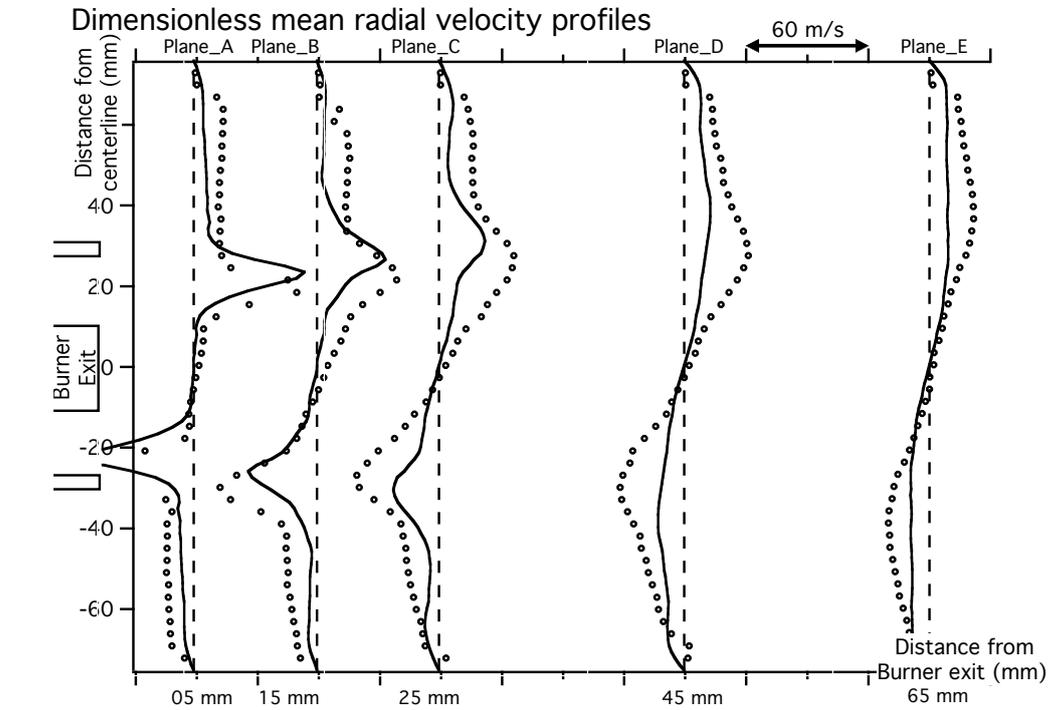
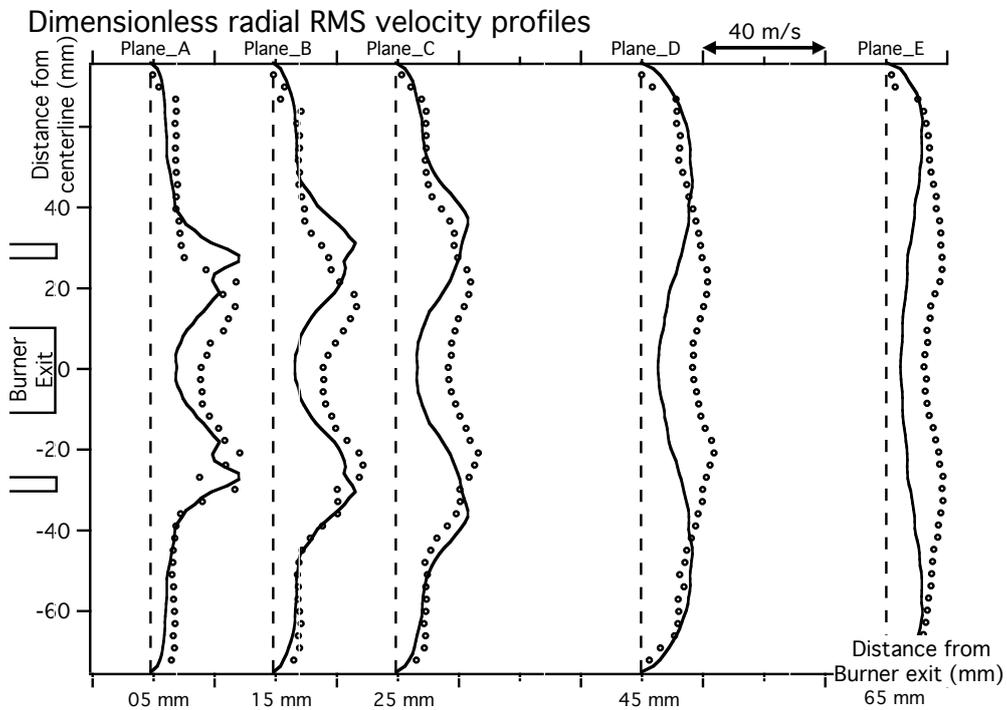


FIG. 8.4 - Comparison of axial velocity statistical profiles : a) mean values, b) RMS values ; Symbols : Experiment ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case NS\_COLD).



a)



b)

FIG. 8.5 - Comparison of radial velocity statistical profiles : a) mean values, b) RMS values ; Symbols : Experiment ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case NS\_COLD).

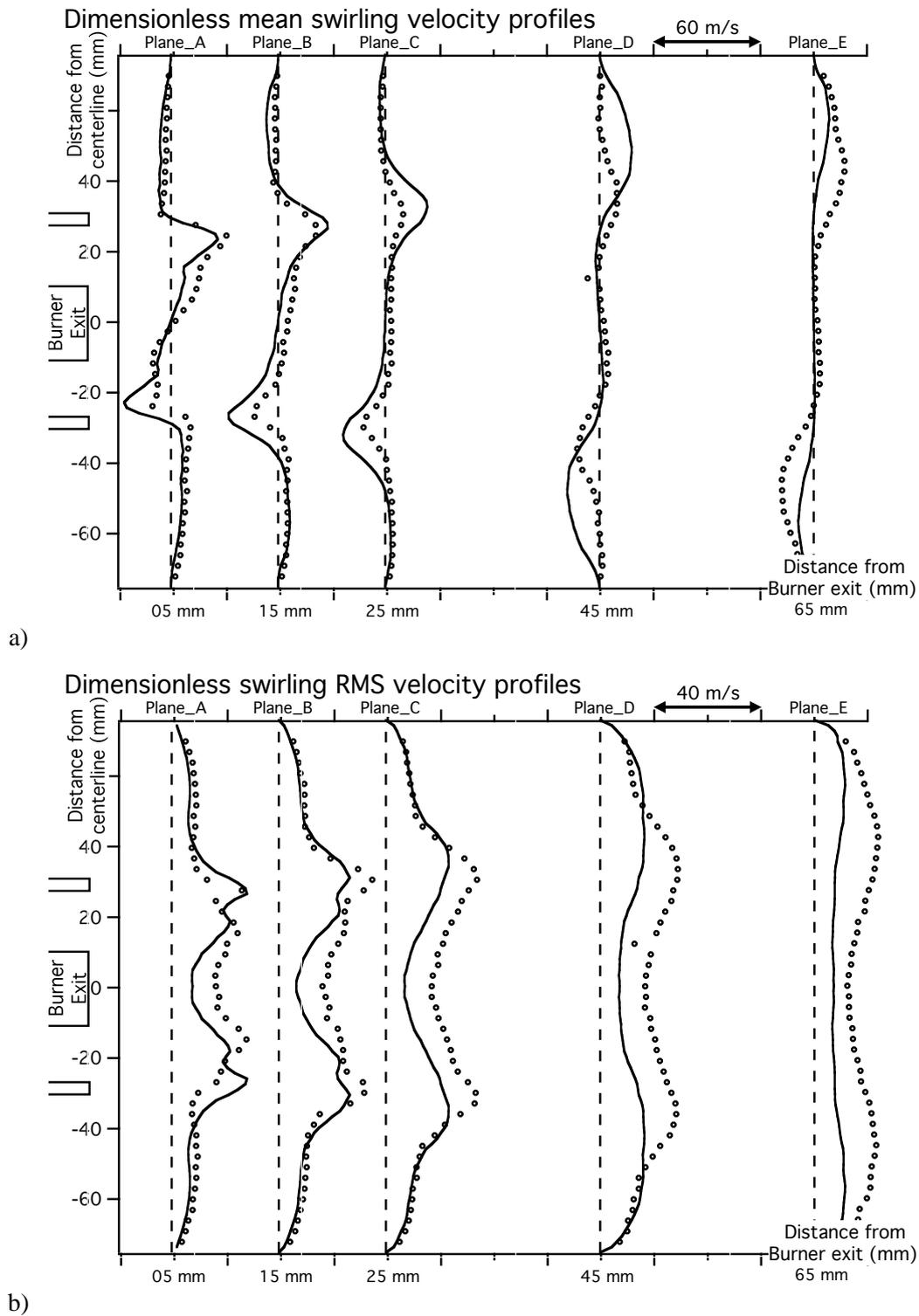
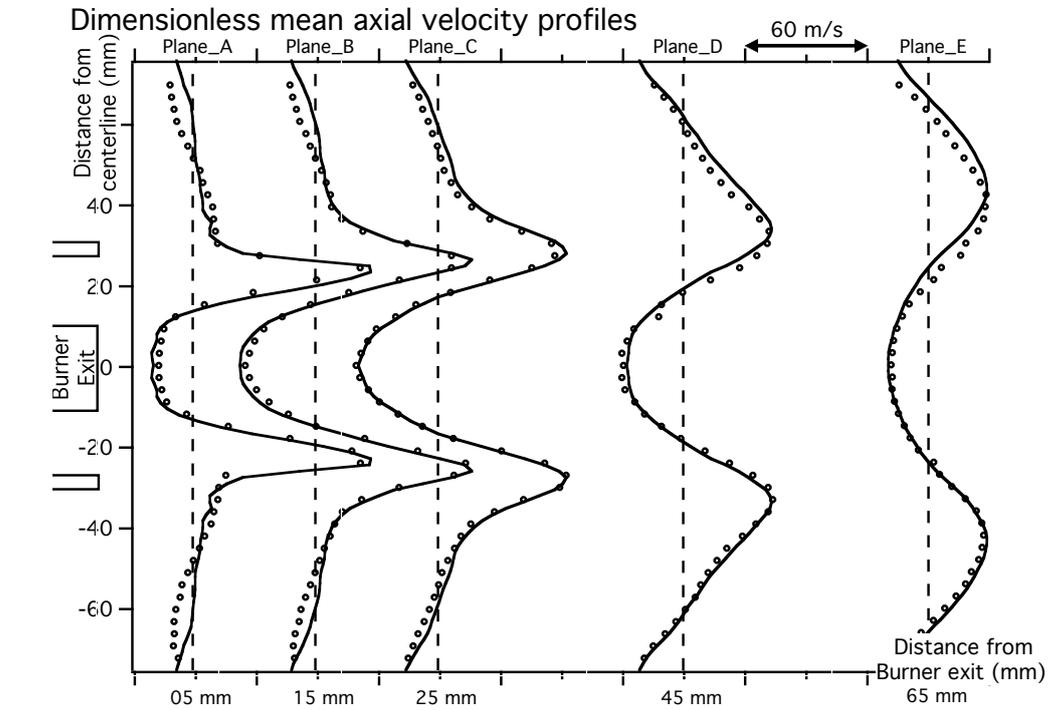
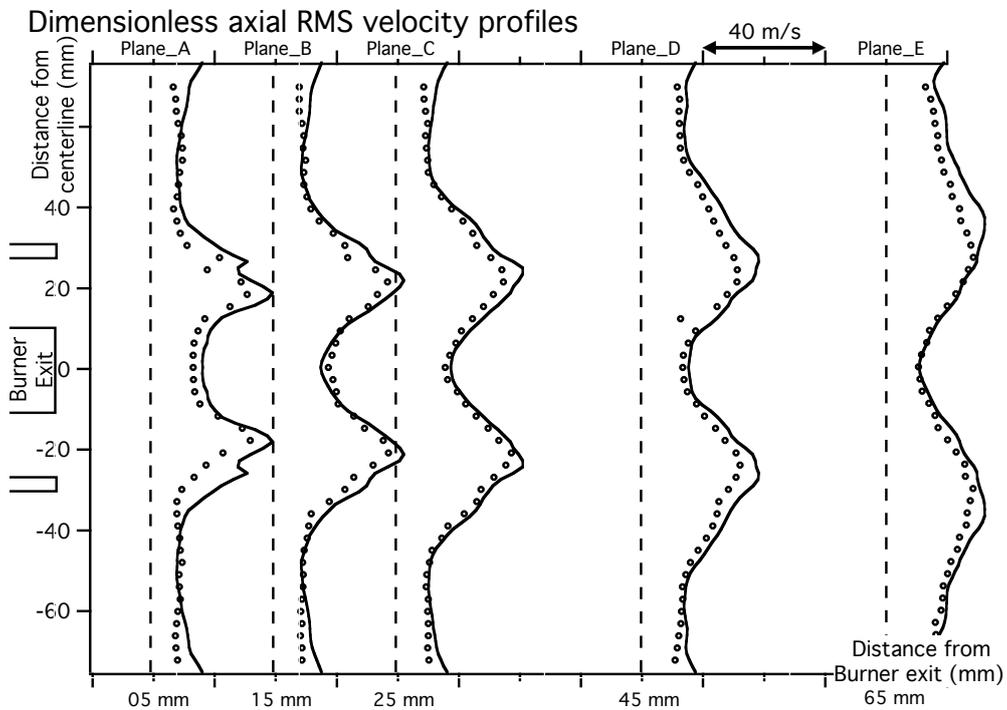


FIG. 8.6 - Comparison of swirling (orthoradial) velocity statistical profiles : a) mean values, b) RMS values ; Symbols : Experiment ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case NS\_COLD).



a)



b)

FIG. 8.7 - Comparison of axial velocity statistical profiles : a) mean values, b) RMS values ; Symbols : Experiment ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case AD\_COLD).

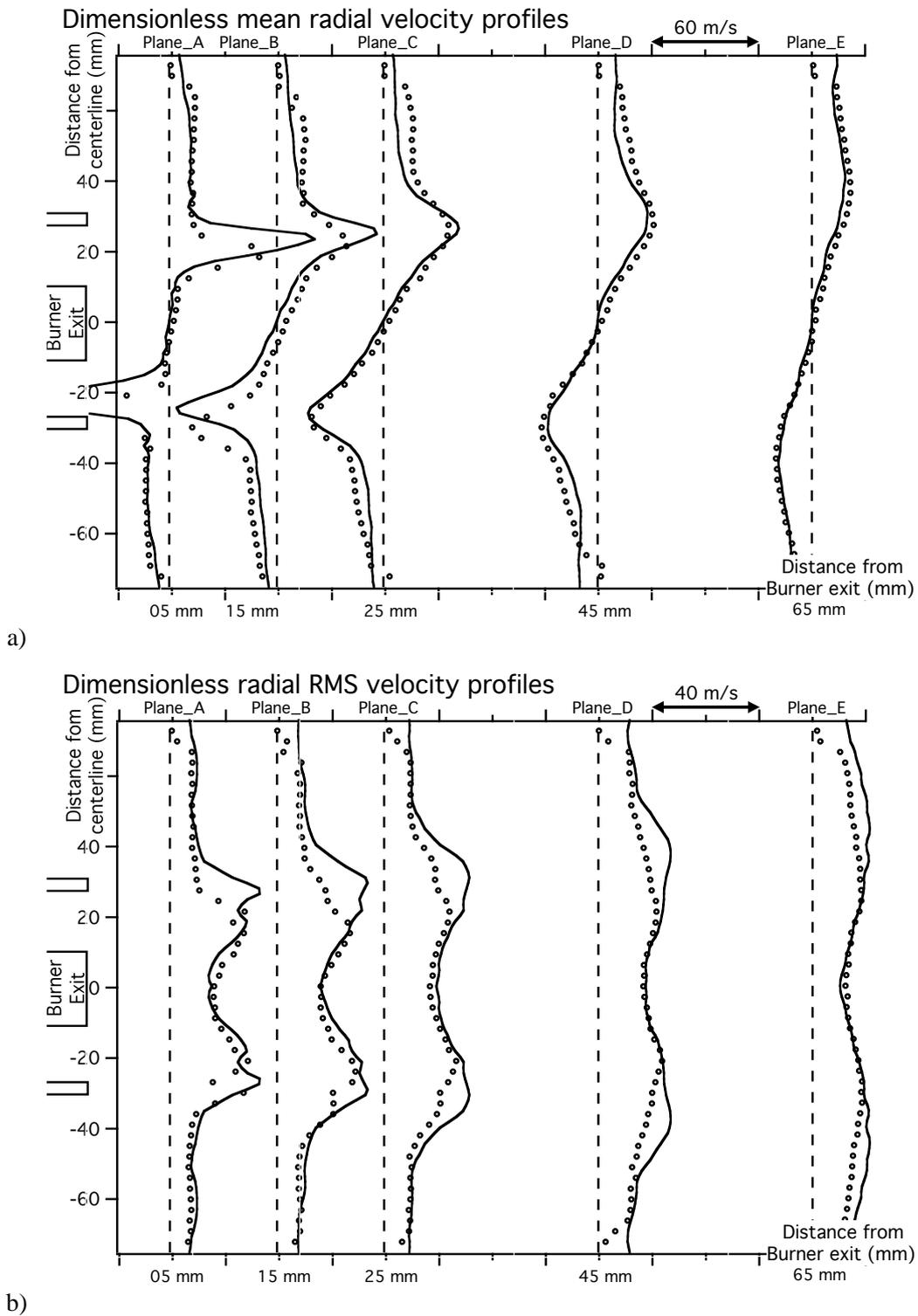


FIG. 8.8 - Comparison of radial velocity statistical profiles : a) mean values, b) RMS values ; Symbols : Experiment ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case AD-COLD).

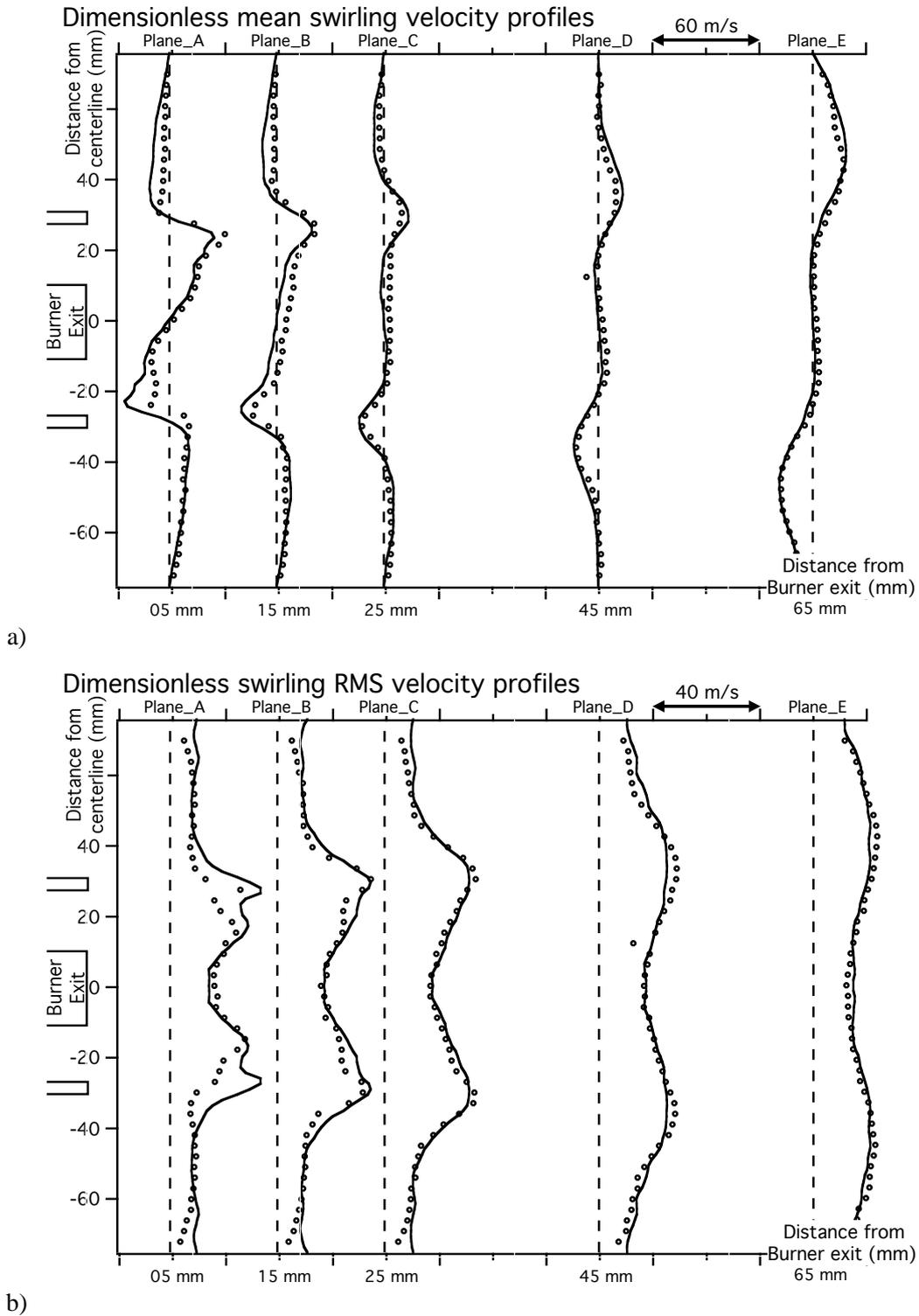


FIG. 8.9 - Comparison of swirling (orthoradial) velocity statistical profiles : a) mean values, b) RMS values ; Symbols : Experiment ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case AD\_COLD).

### 8.3 Influence of numerical scheme

Choosing a numerical scheme for LES is a far more difficult task than for steady RANS simulations. Special care must be taken about dissipation and dispersion properties. Results of Fig. 8.7 were obtained with a 3<sup>rd</sup> order scheme (TTGC) and a fine mesh (900.000 elements).

To evaluate both the influence of the mesh and the scheme accuracy, this subsection compares results obtained with a 2<sup>nd</sup> order scheme (Lax-Wendroff) and the 3<sup>rd</sup> order Taylor Galerkin scheme (TTGC). This investigation is performed on two different meshes : a coarse one (600.000 elements) and a fine one (900.000 elements).

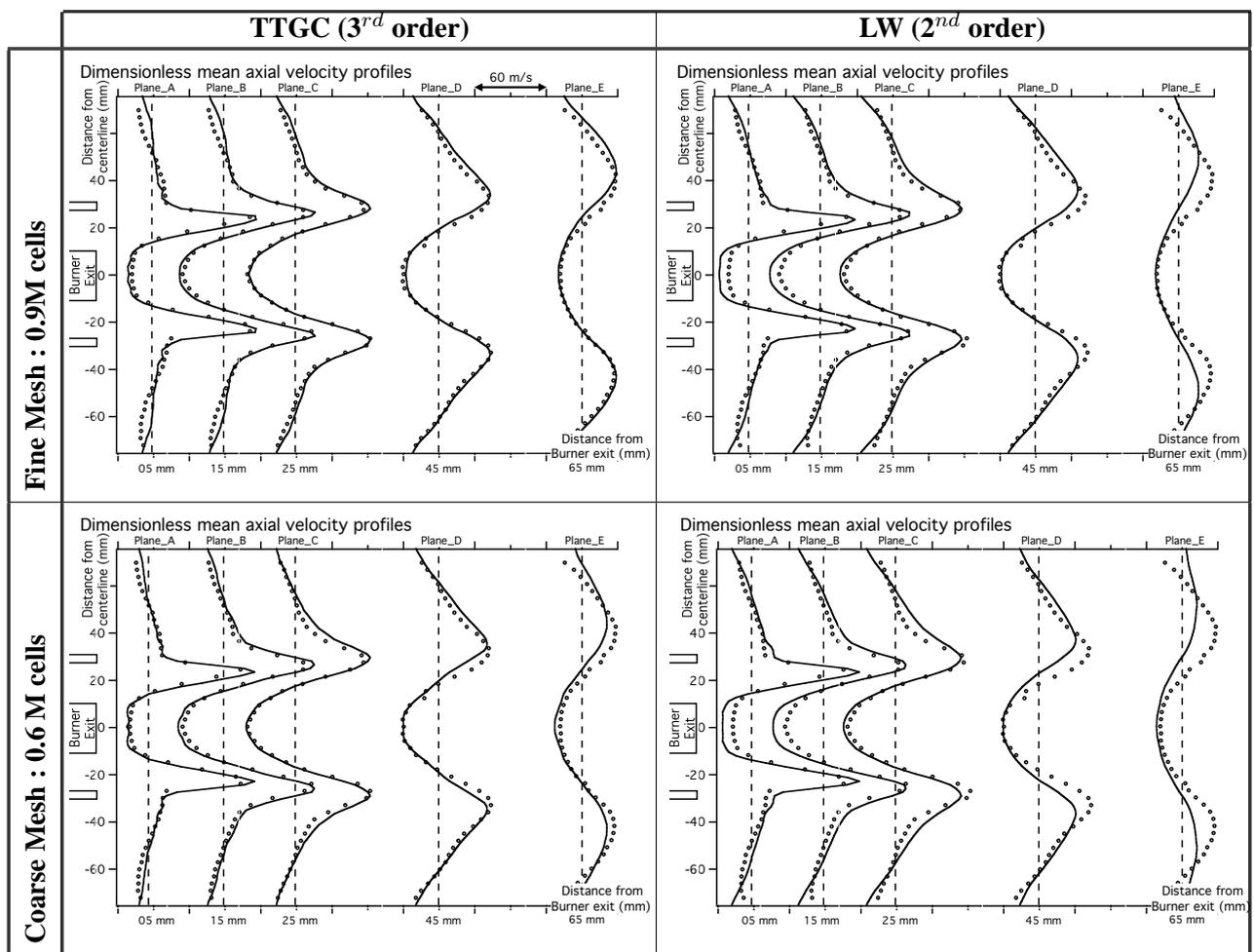


FIG. 8.10 - Influence of the scheme ; Symbols : EXP ; Solid line : LES ; dashed line : zero line (case AD\_COLD).

Figure 8.10 displays the same axial velocity profiles than shown on Fig. 8.7-a) for these two schemes (columns) and two meshes (rows) : the intensity of recirculations zones is clearly better computed with TTGC than with LW. High-speed zones are dissipated too rapidly with LW. Even TTGC on the coarse mesh performs better than LW on the fine mesh.

The impact of the numerical scheme on the small structures is obvious on Fig. 8.11. TTGC (Fig. 8.11-a) provides much more details on the axial velocity field than LW (Fig. 8.11-b). In spite of that, and for CPU costs reasons, all reacting simulations will be done with LW numerical scheme.

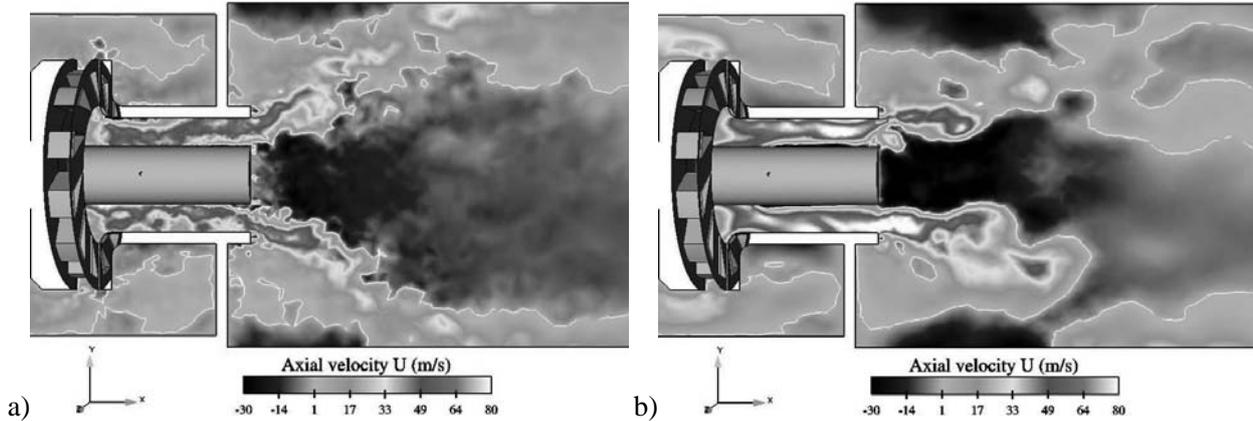


FIG. 8.11 - Influence of the scheme on small structures ; a) TTGC scheme ; b) LW scheme (case AD\_COLD).

However, in terms of cost efficiency, the conclusion differs slightly : even if studies by *Colin* [38, 36] clearly demonstrated that the use of higher order schemes yields more accuracy than refining the mesh<sup>1</sup>, the level of accuracy reached in the region close to the burner<sup>2</sup> with LW on the fine mesh is sufficient. Considering also that LW on a fine mesh remains cheaper than TTGC on a coarse mesh, and that the mesh will be refined anyway to have a well resolved flame, this explains why LW has been chosen for the reacting computations in the next sections.

<sup>1</sup>These studies were done at iso computational cost between TTGC and LW.

<sup>2</sup>Between Plane\_A and Plane\_D, where the flame is expected to be.

Lire  
la seconde partie  
de la thèse

- Chapitre 9 :  
Non pulsated reacting flow
- Chapitre 10 :  
Pulsated reacting cases
- Conclusion générale
- Bibliographie
- Annexe A :  
Planches en couleur
- Annexe B :  
Characteristic wave decomposition
- Annexe C :  
Article soumis au *31st Symposium  
International on Combustion*
- Annexe D :  
Article soumis à *Combustion and Flame*