

N° d'ordre : 2304

THÈSE

présentée
pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

École doctorale : TYFEP
Spécialité : Dynamique des Fluides

Par M. Charles-Etienne MARTIN

Dirigée par Bénédicte Cuenot

Etude énergétique des instabilités thermo-acoustiques et
optimisation génétique des cinétiques réduites.

Soutenue le 12 Décembre 2005 devant le jury composé de :

Mme.	Bénédicte Cuenot	Directrice de thèse
M.	Thierry Poinsot	Co-directeur de thèse
M.	Pascal Bruel	Rapporteur
M.	François Lacas	Rapporteur
M.	Geoffrey Searby	Examineur
M.	Bruno Schuermans	Examineur

Référence CERFACS : TH/CFD/05/84

Préambule

Résumé

Les chambres de combustion des turbines à gaz fonctionnent maintenant souvent dans un mode de combustion prémélangée pauvre. Cette technologie s'est rendue indispensable pour limiter les émissions polluantes (en particulier les oxydes d'azote), et ainsi satisfaire aux normes antipollution. Néanmoins l'adoption de mode de combustion prémélangée pauvre réduit considérablement la marge de stabilité de flammes en les rendant sensibles aux perturbations de l'écoulement. L'apparition d'instabilités de combustion dans ces brûleurs est alors devenu un problème récurrent pour les concepteurs. Les méthodes de contrôle actif de ces instabilités ont permis de maintenir en fonctionnement les turbines d'ancienne génération convertie au mode prémélangé. La conception et la mise au point des nouvelles turbines doit s'affranchir de ces systèmes de contrôle et offrir une stabilité naturelle par un dessin approprié. La prédiction et l'étude des instabilités de combustion restent des champs ouverts de la recherche, car il est pour l'heure toujours impossible de garantir totalement la stabilité d'une chambre nouvellement conçue.

Les méthodes de simulation instationnaires ont maintenant atteint un niveau de maturité qui leur permet de rendre compte des principaux phénomènes intervenant dans l'apparition d'instabilités de combustion. La simulation aux grandes échelles (LES) devient un outil de simulation précis et performant, capable de capturer les instabilités de combustion. Sa précision repose pour partie sur certains modèles.

Pour cela, cette thèse traite en partie de la modélisation de la chimie. L'optimisation des schémas cinétiques permet d'obtenir la précision requise sur les taux de combustion dans les simulations réactives en géométrie complexe. En outre, cette étude met en avant la capacité de la LES réactive compressible à capturer des instabilités thermo-acoustiques. L'analyse du bilan énergétique de l'acoustique met au premier plan l'importance de la prise en compte des impédances acoustiques aux entrées et sorties de la chambre.

Discipline : Dynamique des Fluides

Mots-clés : Simulation aux Grandes Echelles, Combustion prémélangée, Instabilités de combustion, Acoustique, Cinétique chimique réduite, Turbine à gaz.

Abstract

Gas turbine burners are now widely operated in lean premixed combustion mode. This technology has been introduced in order to limit pollutants emissions (especially the NOx), and thus comply with environment norms. Nevertheless, the use of lean premixed combustion decreases the stability margin of the flames. The flames are then more prone to be disturbed by flow disturbances. Combustion instabilities are then a major problem of concern for modern gas turbine conception. Some active control systems have been used to ensure stability of gas turbines retrofitted to lean premixed combustion. The current generation of gas turbines aims to get rid of these control devices getting stability by a proper design. To do so, precise and adapted numerical tools are needed even it is impossible at the moment to guarantee the absolute stability of a combustion chamber at the design stage.

Simulation tools for unsteady combustion are now able to compute the whole combustion chamber. Its intrinsic precision, allows the Large Eddy Simulation (LES) to take into account numerous phenomena involved in combustion instabilities. Chemical modelling is an important element for the precision of reactive LES. This study includes the description of an optimisation tools for the reduced chemical kinetics. The capacity of the LES to capture combustion instabilities in gas turbine chamber is also demonstrated. The acoustic energy analysis points out that the boundary impedances of the combustion systems are of prime importance for their stability.

Area : Computational Fluid Dynamics

Keywords : Large Eddy Simulation, Unsteady premixed combustion, Combustion instabilities, Acoustics, Reduced chemical kinetics, Gas turbines.

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier les rapporteurs Pascal Bruel et François Lacas, mais aussi les membres du jury Geoffrey Searby et Bruno Schuermans pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à l'examen de ce travail en acceptant de participer au jury.

Je remercie également Bénédicte Cuenot pour avoir accepté de diriger cette thèse. Je suis reconnaissant à Thierry Poinot, de m'avoir fait bénéficier de son expérience et de m'avoir fait confiance dans les orientations scientifiques de cette thèse.

Cette thèse a été financée par le projet européen Fuelchief (sixième programme cadre), en partenariat industriel avec ALSTOM suisse. Les collaborations induites par ce projet m'ont permis d'apprécier le travail et le contact d'une partie de l'équipe du laboratoire EM2C, à savoir Nathalie Dioc, Sébastien Ducruix et Denis Veynante, mais aussi au sein de ALSTOM suisse avec Peter Flohr et Bruno Schuermans.

Ma gratitude va à toute l'équipe de support informatique du CERFACS, et plus particulièrement Isabelle D'Ast et Gérard Dejean pour leur disponibilité, promptitude, compétence, et bien sûr leur humour.

Ce travail qui semble purement individuel est aussi le fruit d'une collaboration au sein de l'équipe CFD du CERFACS. Pour cela je tiens à remercier toute l'équipe CFD pour avoir su établir une ambiance de collaboration efficace et de franche camaraderie et plus particulièrement Patrick Schmitt mon binôme sur le projet Fuelchief, Laurent Benoit mon binôme au Summer Program 2004 du CTR, Alexis Giauque avec qui les discussions ont été aussi nombreuses que fructueuses, mais aussi pour leur soutien indéfectible : Guilhem Chevalier, Marta Garcia, Simon Mendez, Eléonore Riber, Thilo Schonfeld, Karine Truffin et Ariane Martin.

Table des matières

1	Introduction	11
1.1	Energie et propulsion	11
1.2	Aspect historique	12
1.3	Enjeux de la modélisation de la combustion	15
1.4	Instabilités thermo-acoustiques	16
1.4.1	Réponse aux contraintes environnementales	16
1.4.2	Stabilité réduite des flammes	18
1.4.3	Le tube de Rijke	19
1.5	Les méthodes de contrôle	22
1.6	Les méthodes d'étude et de prédiction des instabilités thermo-acoustiques	24
1.7	Une approche alternative	26
1.8	Modèles de combustion en LES	27
1.9	Organisation de ce document	30
2	L'approche Simulation aux Grandes Echelles	31
2.1	Equations de conservation pour les fluides réactifs	31
2.1.1	L'équation d'état	33
2.1.2	Variables thermodynamiques	33
2.1.3	Vitesses de diffusion et conservation de la masse	34
2.1.4	Coefficients de transport	35
2.1.5	Epaississement des fronts de flamme laminaire : Modèle de flamme épaissie (TF) pour écoulement laminaire ou la simulation directe	36
2.1.6	Cinétique chimique	37
2.1.7	Contraintes liées à l'équilibre chimique	39
2.2	Les équations constitutives de la LES	39
2.2.1	Filtrage LES	42
2.3	Modélisation des flux de sous-maille	43
2.3.1	Modélisation du tenseur de Reynolds de sous-maille	43
2.3.2	Modélisation du flux diffusif de sous-maille	45
2.3.3	Modélisation du flux de chaleur de sous-maille	45
2.4	Modèle de combustion turbulente	46

2.5	Description du solveur réactif compressible AVBP	48
2.5.1	Méthodes numériques	49
2.5.2	Conditions aux limites dans AVBP	52
3	Optimisation de cinétiques chimiques par algorithme génétique	57
3.1	Problématique et motivations	57
3.1.1	Choix de la cinétique chimique réduite	57
3.1.2	La nécessité d'ajuster la cinétique chimique	60
3.1.3	Les mécanismes cinétiques complexes	62
3.2	Automatisation de la procédure d'ajustement	63
3.2.1	Définition du problème	63
3.2.2	Définition de la fonctionnelle J	65
3.2.3	Choix du minimiseur	65
3.3	Revue des principes relatifs aux algorithmes génétiques	69
3.3.1	Structure élémentaire d'un algorithme génétique	71
3.3.2	L'Algorithme Génétique Standard (AGS)	71
3.3.3	Représentation : Binaire ou flottante?	73
3.3.4	Mécanismes de sélection	76
3.3.5	Opérateurs génétiques	78
3.3.6	Les AG et l'optimisation multi-objectifs	79
3.4	Description de l'outil d'optimisation	84
3.4.1	Structure algorithmique	86
3.4.2	Evaluation	87
3.4.3	Le noyau génétique GENOCOP	88
3.4.4	Les Opérateurs génétiques disponibles	88
3.4.5	Schéma de sélection	91
3.5	Mise en oeuvre et applications	92
3.5.1	Choix des grandeurs objectives	92
3.5.2	Exemple d'application : schéma propane une étape : C3H8- 1S-CM1	95
3.5.3	Résumé et caractéristiques des schémas produits.	97
3.5.4	Conclusion et perspectives de développement	102
4	Présentation du brûleur ECPmod et moyens expérimentaux	105
4.1	Contexte de l'étude	105
4.1.1	Combustion séquentielle	107
4.2	Description de la configuration ECP	113
4.2.1	Dessin révisé : brûleur ECPmod	114
4.2.2	Etagement de l'injection carburant	115
5	Calculs LES stables	119
5.1	Validation des calculs non-réactifs	119
5.1.1	Objectifs des calculs non-réactifs	119

5.1.2	Données expérimentales	119
5.1.3	Comparaisons LES/PIV	127
5.2	Calculs Réactifs stables	136
5.2.1	Résultats	139
5.2.2	Détection des modes acoustiques	139
6	Brûleur Instable et méthodes d'analyse	153
6.1	Comportement instable du brûleur ECPmod	153
6.2	Capture d'une séquence instable sur ECPmod	154
6.2.1	Amorçage de l'instabilité	156
6.2.2	Description de la séquence instable	162
6.3	Construction d'une équation de bilan d'énergie acoustique	163
6.3.1	Mesure du taux d'amplification	166
6.4	Mise en oeuvre et analyse du bilan d'énergie acoustique	170
6.4.1	Tests Préliminaires	172
7	LES and acoustic analysis of combustion instability	183
7.1	Introduction	186
7.2	Acoustic energy equation	188
7.3	Large Eddy Simulations for reacting flows in complex geometries	189
7.3.1	Numerical methods for compressible reacting LES	189
7.3.2	Thickened Flame (TF) model and chemical scheme	191
7.4	Acoustic solver for the Helmholtz equation	193
7.5	Configuration	196
7.5.1	Geometry : a swirled premixed combustor	196
7.5.2	Boundary conditions	197
7.6	LES Results	198
7.6.1	Stable flow	198
7.6.2	Instability sequence	199
7.6.3	Growth phase	200
7.6.4	Overshoot phase and limit cycle	202
7.6.5	Decay phase	202
7.7	Acoustic Analysis results	204
7.7.1	Measurement of the flame transfer function (FTF)	204
7.7.2	Helmholtz solver results	206
7.8	Conclusions	207
7.9	References	210

Abréviations

Toutes les abréviations utilisées dans ce document sont introduites par le texte. La première occurrence d'une abréviation est mise entre parenthèses et graissée. On rappelle néanmoins ici l'ensemble des abréviations utilisées :

- AG** Algorithme génétique
- AP** Approche pareto
- BEV** Brûleur EV
- BEA** Bilan d'énergie acoustique
- DNS** Direct numerical simulation
- FPO** Front pareto optimal
- IdC** Instabilité de combustion
- LdP** Loi de paroi
- LES** Large eddy simulation
- LIF** Laser induced fluorescence
- LW** Lax-Wendroff
- MAG** Méthodes d'algorithmes génétiques
- MDD** Méthodes de descentes
- MFL** Modèle de flamme laminaire
- MOE** Multi-objectifs évolutionnaire
- NSCBC** Navier-Stokes characteristic boundary conditions
- SPO** Solution pareto optimale
- TàG** Turbine à gaz
- TBP** Turbine basse pression
- THP** Turbine haute pression
- TT** Turbine terrestre
- SEV** Sequential EV burner
- ZdR** Zone de recirculation

Chapitre 1

Introduction

1.1 Energie et propulsion

Le contexte de ce travail de thèse se place dans l'étude de la combustion par simulation numérique. La combustion est depuis plus de deux siècles, un sujet d'étude constant. En effet, ce phénomène est à l'origine de la majeure partie de l'énergie produite dans le monde. Plus de 70% de l'énergie est produite par extraction de l'énergie chimique de combustibles. La part restante se répartit entre le nucléaire et l'hydroélectrique. Dans le domaine de la propulsion, la quasi-totalité des moyens de transport utilise la combustion, de façon directe (moteurs) ou indirecte (l'électricité des trains est produite par combustion). Cet état de fait est le fruit de l'abondance des sources de combustibles sur terre. Cette abondance est menacée pour le siècle à venir, et la conversion des modes de propulsion et de production d'énergie reste problématique tant sur le plan technique qu'économique. Si la valorisation préférentielle du pétrole en tant que matière première et non comme combustible semble évidente, des combustibles alternatifs existent. Après avoir été longtemps considéré comme déchet dans l'extraction pétrolière, le gaz naturel intéresse particulièrement le secteur de la production électrique. Plus marginalement les biogaz ou combustibles renouvelables voient leur production croître. La figure 1.1 montre la part croissante du gaz naturel dans la production énergétique mondiale. Les importants stocks disponibles permettent une bonne visibilité et le développement des centrales de production électrique fonctionnant au gaz naturel en attestent. Outre les inévitables rejets de gaz carbonique, la combustion du gaz naturel, permet d'obtenir des faibles taux d'émissions polluantes, en particulier au niveau des suies quasiment absentes. Néanmoins le durcissement de normes anti-pollution, nécessite des avancées constantes sur l'aspect environnemental des systèmes de combustion en général. Nous nous concentrons dans cette étude sur des applications de type turbine à gaz, mais les développements proposés ici peuvent néanmoins s'appliquer à d'autres secteurs utilisant des fours ou incinérateurs.

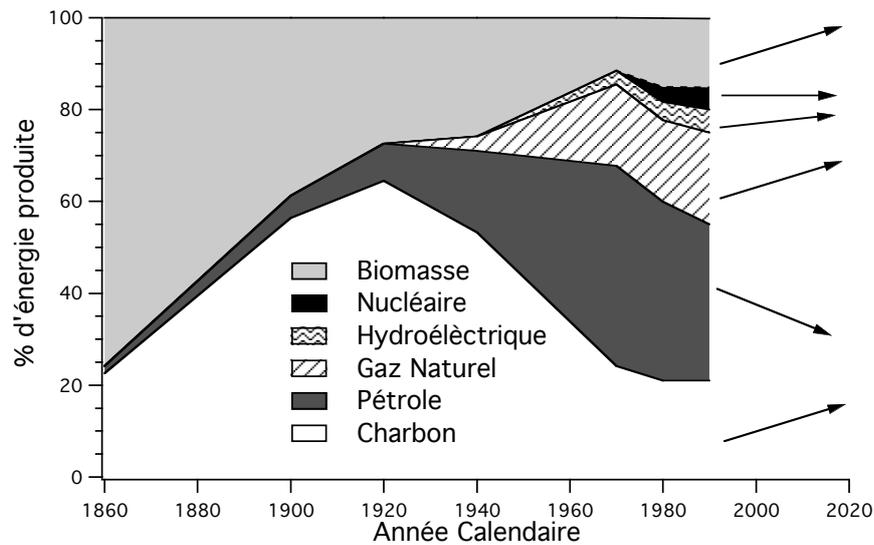


FIG. 1.1 – Répartition proportionnelle des types de carburants dans la production d'énergie mondiale au cours des derniers siècles.

1.2 Aspect historique

La prépondérance de la combustion sur les modes de production d'énergie, provient de l'héritage de la révolution industrielle. Celle-ci s'est en effet nourrie des avancées dans les domaines de la production énergétique, à commencer par la machine à vapeur. Un saut qualitatif certain a été accompli avec la mise au point de premières turbines à vapeur (Parson 1884, de Laval 1896). On remplaça la machine à vapeur à flux alternatif, synonyme de vibrations, fatigue de matériaux et mauvais rendement, par une machine à flux continu exempte de ces défauts. La turbine à vapeur avec son meilleur rendement ($\simeq 15\%$ à l'époque) fut très rapidement industrialisée (Westinghouse 1,5 MW, 1899). La modification du cycle de Rankine initial par des techniques de soutirage ou de réchauffe permet d'augmenter sensiblement le rendement des turbines à vapeur. Leur forte puissance les dédie à la production d'électricité ou à la propulsion navale. Elles sont toujours largement utilisées notamment, dans la production électrique thermique ou nucléaire. Néanmoins, la chaudière de la turbine à vapeur utilise un mode de combustion à pression atmosphérique, ce qui limite fortement les densités d'énergies. Pour obtenir les puissances requises, les installations présentent des encombrements conséquents. La turbine à gaz quant à elle, présente des qualités de compacité et légèreté ainsi qu'un bon rendement permettant son utilisation depuis la propulsion aérienne et navale à la production électrique industrielle autonome.

Le premier concept de turbine à gaz a été matérialisé par le brevet de Bar-

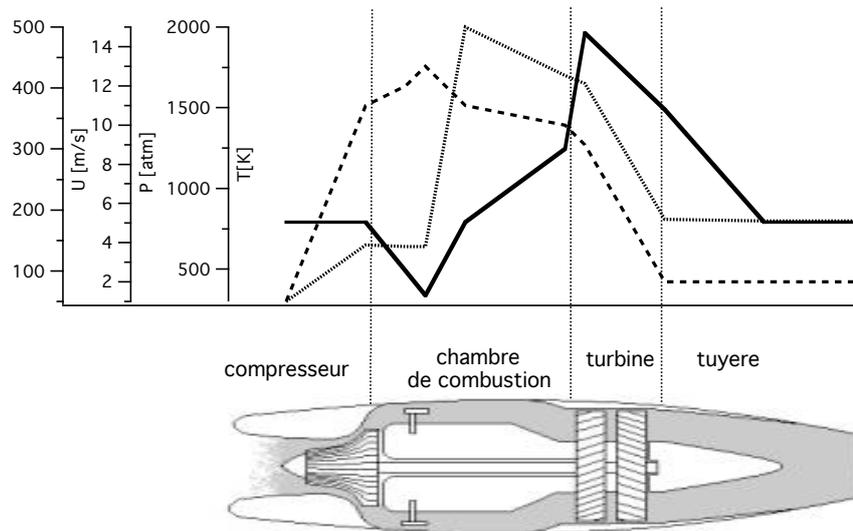


FIG. 1.2 – Evolution typique de **—** : vitesse débitante, **—** : température, **----** : pression au travers d'une turbine à gaz.

ber en 1791, dont la machine utilise le même cycle thermodynamique (cycle de Brayton Fig. 4.2) que les futures turbines à gaz. Son prototype contient tous les éléments d'une turbine à gaz à savoir, un compresseur (à piston), un chambre de combustion et l'équivalent d'une turbine de détente (Fig. 1.2). Néanmoins le développement des turbines à gaz s'est heurté à de nombreuses barrières technologiques. Il a été lent et laborieux si on le compare à celui de la turbine à vapeur dont l'industrialisation n'a pris que quelques années. À cause du manque de connaissance en aérodynamique, les compresseurs offraient des rendements calamiteux. Les turbines nécessitent des alliages résistants aux hautes températures. Les bris de turbine étaient courants et grevaient la fiabilité. Les premières turbines à gaz au sens moderne restent des prototypes (Elling 1903, Lemale 1905) avec des rendements thermiques inférieurs à 4%. Les études se poursuivent, et l'on atteint 20% de rendement à la veille de la seconde guerre mondiale. On voit la première turbine à gaz en exploitation commerciale de production électrique en 1949 aux Etats-Unis. Les progrès acquis sur les turbines terrestres (**TT**) laisse envisager leur utilisation pour la propulsion aérienne dans les années trente. Si par rapport à la TT, le principe turbo-réacteur reste le même, il est avant tout un générateur de gaz, dont l'éjection est utilisée pour produire une poussée par réaction. Néanmoins pour avionner la turbine à gaz, les concepteurs (parallèlement Whittle et Ohein 1940) durent augmenter la densité d'énergie par 20 par rapport aux TT; il leur faudra 10 ans et un effort de guerre pour y parvenir¹. Pour obtenir de pression

¹en allégeant la structure et augmentant la pression de combustion, tout en conservant une bonne compacité

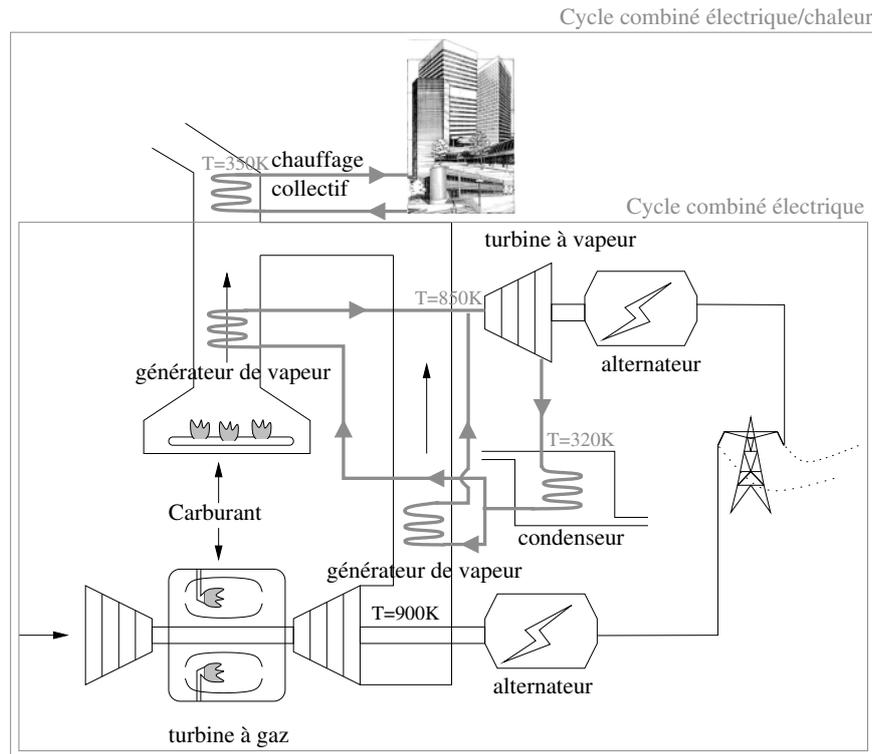


FIG. 1.3 – Schéma de principe d'une installation en cycle combiné.

de combustion élevée, pouvoir ainsi brûler plus de carburant dans un volume donné, il fallut augmenter significativement l'efficacité du compresseur. Ces efforts furent couronnés de succès puisque qu'à l'issue de la guerre, les prototypes de chasseurs à réaction surpassaient les chasseurs conventionnels, du moins en vitesse de pointe (moins vrai pour la fiabilité et l'autonomie). Dès 1950, les MiG-15 russes s'opposent aux Sabres américains dans le ciel de Corée.

Pour revenir à une préoccupation plus pacifique qu'est celle de produire de l'énergie, nous décrivons les différents types de turbines à gaz et leurs applications. Les turbines à gaz sont utilisées suivant deux modes principaux :

- Comme générateur de gaz : avec le turboréacteur (turbo-fan) généralement utilisés pour la propulsion des avions volant du haut subsonique ou/et supersonique.
- Pour produire un travail sur arbre : Les turbines terrestres (ou marines) servent pour la production électrique (ou propulsion marine). Ces turbines sont de grande puissance jusqu'à 250 MW² (ALSTOM GT26, Siemens-Westinghouse SGT-T6). Elles offrent un rendement propre de 40% et approche de 60% en cycle combiné (Fig. 1.3). Ce cycle associe une turbine

²General Electric et Westinghouse travaillent sur des machines de forte puissance, de 400 à 420 MW)

à vapeur avec une turbine à gaz donc les effluents servent à générer de la vapeur, récupérant ainsi l'enthalpie résiduelle des gaz brûlés (900 K) pour le cycle vapeur. En combinant encore un système de récupération de la chaleur résiduelle on atteint des rendements thermiques proche de 85%. La gamme de puissance de TT s'étend assez largement jusqu'aux petites turbines de 5MW (Solar Turbine, Allison). On note l'attrait récent et croissant pour les groupes électrogènes de quelques dizaines ou centaines de kW.

Le turbo propulseur, est la version volante de la turbine terrestre. Elle se différencie tout de même par une turbine libre, désolidarisée de l'arbre principal du compresseur, qui actionne l'arbre moteur. Elle a remplacé les moteurs à pistons pour les avions commerciaux (de 2500kW jusqu'à 8MW pour le TP-400) à hélice et les hélicoptères (1000 kW)

Plus anecdotique, la mise au point de micro turbines de la taille d'un bouton de chemise [5] est à l'étude (au MIT) pour la production nomade d'électricité, visant ainsi à remplacer les batteries chimiques actuelles. Leur puissance est donc de l'ordre de 20 à 50W. L'objectif opérationnel vise 2010.

1.3 Enjeux de la modélisation de la combustion

Les constructeurs des turbines ont toujours basé la conception de leurs systèmes sur l'exploitation de leur savoir-faire et sur leurs capacités de recherche. Il y a vingt-cinq ans, la conception des chambres de combustion reposait sur des modèles empiriques, ou analytiques ainsi que de nombreux essais de prototypes. La réduction de coût et de délais de conception, a permis d'introduire la simulation numérique au coeur du processus de conception. Le succès de cette introduction tient tant à l'amélioration de la qualité des modèles et de leur capacité prédictive qu'à l'augmentation des capacités de calcul. Il est dorénavant capital pour les industriels de disposer des outils de simulations à la fois les plus avancés mais aussi les mieux adaptés aux problématiques rencontrées. La percée de codes de calcul d'écoulement fluide est, sur ce point, édifiante. En particulier l'approche RANS permet de résoudre l'écoulement moyen dans des géométries quelconques à un coup de calcul modeste. Néanmoins, l'aspect stationnaire de l'approche a montré ses limites dans son incapacité à pouvoir capturer des phénomènes comme les instabilités de combustion dont souffrent les turbines de nouvelle génération.

Encore cantonnée il y a quelques années à la recherche académique, la simulation aux grandes échelles (**LES**) est maintenant accessible aux capacités de calculs des industrielles [84][86]. Cette approche permet, grâce à sa résolution instationnaire des équations de Navier-Stokes, de capturer une quantité importante de phénomènes entrant dans la problématique de la conception des chambres. Si son utilisation n'est pas encore totalement intégrée aux processus de conception, on y prévoit son utilisation systématique dans seulement quelques années. Les recherches menées sur la combustion numérique instationnaire, ont montré

la capacité des codes de calculs LES à simuler les écoulements réactifs sur les géométries réelles des chambres de turbines [59][47][93][73][126], fournissant ainsi de précieuses informations sur les mécanismes de stabilisation de flamme, de mélange, l'acoustique des chambres etc. Nous nous concentrons dans cette étude sur les instabilités de combustion et à en étudier les causes.

1.4 Instabilités thermo-acoustiques

Les contraintes économiques ont naturellement poussé les industriels construisant des turbines à gaz (**TàG**), à orienter l'effort de développement vers des turbines toujours plus efficaces tout en abaissant les coûts. 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 émises par les processus de combustion industriels. Les réglementations sont complexes car elles modulent ces limitations en fonction de type d'installation (four, TàG), 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) et NO_x (irritant, promoteur de l'ozone troposphérique, pluies acides, gaz à effet de serre) et suies. Aux réglementations supra étatiques (CEE, Etats-Unis) peut s'ajouter une réglementation nationale voir régionale (Californie) renforçant les limitations existantes. La réglementation locale, ajoute le plus souvent des limitations sur les émissions de CO (toxique) et d'imbrûlés et autres COV^3 (cancérogènes), absentes par exemple des directives européennes et américaines.

1.4.1 Réponse aux contraintes environnementales

Afin de pouvoir satisfaire les contraintes environnementales et anticiper leur durcissement, les constructeurs ont dû revoir leur dessin de chambres de combustion, puisque c'est là que la formation de polluants a lieu. Si auparavant l'amélioration de l'efficacité induisait un effet positif sur les polluants comme le CO et les imbrûlés, 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 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 (Fig. 1.4). La croissance des émissions y est exponentielle au delà de $1850K$, car les hautes températures favorisent l'oxydation du di-azote de l'air. Il est la source majeure de NO_x produit.

³Composés Organiques Volatiles

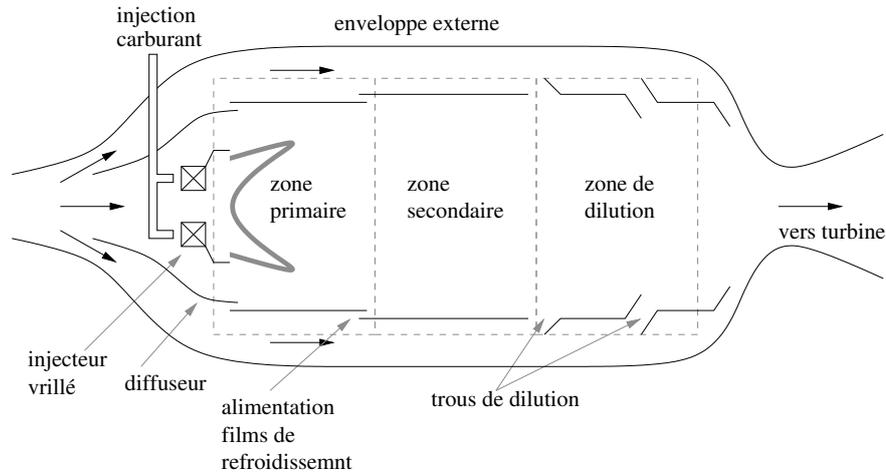


FIG. 1.4 – Principales composantes d'un brûleur conventionnel

- Le NO prompt (Fenimore), est produit au sein de la flamme. Sa contribution est aussi importante, surtout à 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 fioul, peuvent contenir quelques pour cent de composés azotés, qui réagissent durant la combustion pour former des NOx. Ce mécanisme est absent pour le gaz naturel.

Les techniques de réduction des NOx sont multiples. Elles sont pour certaines, lourdes ou encombrantes et ne peuvent être appliquées qu'aux turbines fixes, les plus contraintes sur le plan environnemental il est vrai. 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 de combustion jusqu'alors non-prémélangés font apparaître des flammes de diffusion qui brûlent à la stœchiométrie, induisant des températures très hautes ($2400K$) favorisant la production de NOx thermique. Le passage à la combustion de prémélange (ou partiellement) pauvre permet de s'assurer d'une température de zone primaire suffisamment basse, et évitant toute zone trop chaude afin de limiter la production de NOx. Les brûleurs fonctionnant en prémélange pauvre se sont alors généralisés dans toutes les productions aéronautiques mais aussi industrielles. Ce choix technologique, quasi inévitable, a permis de réaliser des gains notables sur les émissions NOx, mais pose toujours le problème de la stabilité des flammes.

1.4.2 Stabilité réduite des flammes

Une température de flamme plus basse induit une interaction plus forte avec les parois (extinction locale), et peut poser des problèmes d'accrochage de la flamme. Les flammes très pauvres, sont souvent proches de l'extinction pauvre [43] ou du soufflage (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, en particulier acoustiques. En effet, le confinement des chambres permet l'expression de modes propres. L'apparition d'instabilités thermo-acoustiques provient du couplage résonnant entre l'acoustique des chambres et la combustion instationnaire. Les instabilités thermo-acoustiques se caractérisent par une pression oscillante de grande amplitude, ainsi qu'une forte dynamique de flamme. Le mouvement de la flamme peut aller jusqu'au retour de flamme (flashback) dans le système d'injection [58] ou induire une extinction. Les vibrations engendrées peuvent endommager le système et dans tous les cas, induisent une fatigue préjudiciable à la longévité et fiabilité des systèmes. L'étude de ces instabilités est alors une question centrale pour les applications actuelles de TàG. L'accroissement de la pression dans les chambres à 40 bar pour les turboréacteurs, 10 à 30bar pour les TT 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.

Le phénomène des instabilités de combustion ne touche pas que les TàG. Leur étude s'est particulièrement développée dès les années 1950. Les développements des moteurs fusée (missiles ou programmes spatiaux) ont rencontré des problèmes d'instabilités [21][20]. Ces applications stratégiques ont apporté un soutien financier important à ces études. Depuis lors, les problèmes d'instabilités dans les moteurs-fusées sont toujours sujets de recherche [23][83]. Dans les années 1970 des problèmes d'instabilités thermo-acoustiques sont rencontrés dans les fours industriels et les systèmes de conditionnement d'air. Dans les années 1980, l'attention se porte sur les instabilités des statoréacteurs et foyer de réchauffe de turboréacteurs [153][8]. On note aussi un regain d'intérêt pour la combustion pulsée pour les fours et incinérateurs. Ces systèmes, conçus pour soutenir une combustion instable, tel un pulso-réacteur, tirent partie de l'instabilité contrôlée pour augmenter leur efficacité [57][4][156]. Ces systèmes sont intéressants puisqu'ils entretiennent les phénomènes que les applications turbines cherchent à éradiquer depuis plus de dix ans. Leur fonctionnement est soit basé sur la résonance du mode acoustique en volume (mode d'Helmholtz) soit sur celle d'un mode longitudinal à la manière d'un tube de Rijke. Le tube de Rijke est un dispositif expérimental très simple qui permet d'illustrer les principaux mécanismes [112] des instabilités thermo-acoustiques.

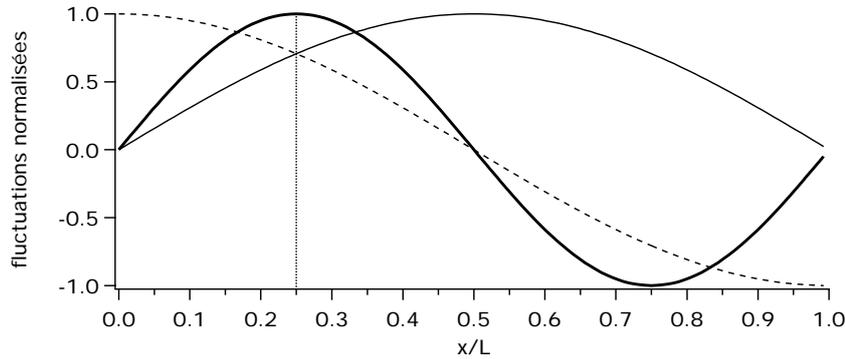


FIG. 1.5 – Tube de Rijke, distribution des grandeurs : — p_1 , ---- u_1 , — Critère de Rayleigh.

1.4.3 Le tube de Rijke

Le tube Rijke est composé d'un simple tube ouvert à ses deux extrémités, dans lequel on place une source de chaleur dans sa partie basse. On utilise classiquement une grille chauffée comme source de chaleur. Avec cette configuration, l'instabilité ne se déclenche que si le tube est en position verticale. En effet, la source de chaleur est passive et fixe, c'est à dire qu'elle ne réagit pas aux fluctuations de vitesse acoustique (au pire la grille refroidie). Lorsque le tube est vertical, la chaleur de la grille induit un courant de convection naturelle moyen de bas en haut. Lorsque la grille est soumise aux fluctuations de vitesse, le transfert de chaleur est perturbé (à la manière d'un anémomètre à fil chaud), l'air se dilate brusquement au passage de la grille, créant ainsi une perturbation acoustique qui entretient le mode stationnaire. Si le tube est horizontal, le phénomène de dilatation brusque n'a pas lieu puisque les particules d'air proche de part et d'autre de la grille sont quasiment en équilibre thermique avec la grille.

Rayleigh [113] propose une explication du phénomène 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 p_1 et dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{T_1}$. Si leur produit est positif, l'instabilité est amplifiée ; si le produit est négatif, elle est amortie. Intégré sur une période puis en volume, le critère de Rayleigh permet de savoir si le système est potentiellement instable ou non. Si on suppose les deux fonctions harmoniques, le déphasage doit être inférieur à $\pm \frac{\pi}{2}$. Dans le cas du tube de Rijke, le mode acoustique excité est le mode demi-onde. Il présente des noeuds de pression acoustique p_1 à ses extrémités (Fig. 1.5). Le mode étant stationnaire la vitesse acoustique u_1 est déphasée⁴ de $\frac{\pi}{2}$ par rapport à p_1 . On a donc : $p_1(x, t) = \sin(\frac{\pi x}{L}) \sin(\omega t)$ et $u_1(x, t) = \cos(\frac{\pi x}{L}) \sin(\omega t)$. Pour estimer la distribution du critère de Rayleigh, on suppose que la perturbation du dégagement de chaleur est proportionnelle à u_1 . Le critère de Rayleigh est donc

⁴Ceci n'est exact que si on a rigoureusement $p_1 = 0$ aux extrémités du tube

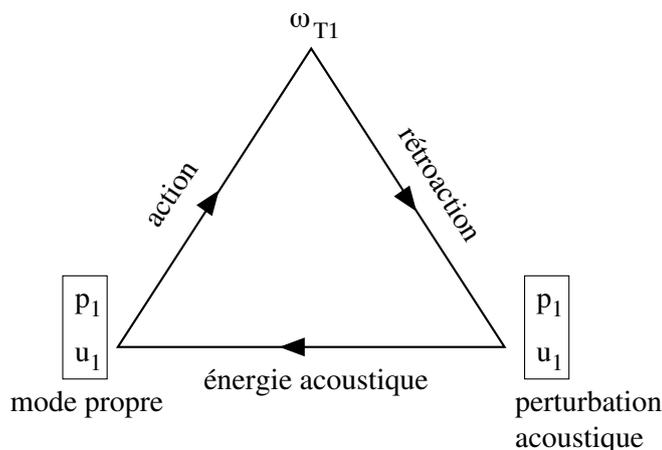


FIG. 1.6 – Schéma de principe de la boucle d'instabilité thermo-acoustique.

proportionnel dans ce cas au produit $p_1 u_1$. En intégrant sur une période, on trouve une distribution du critère de Rayleigh $\simeq \sin(\frac{\pi x}{L}) \cos(\frac{\pi x}{L})$. Comme on l'observe sur la figure 1.5, le critère n'est positif que dans la première moitié du tube et présente un maximum au quart de la longueur. C'est en positionnant la source de chaleur à cet endroit qu'on obtient la plus forte amplification de l'instabilité. Le critère de Rayleigh apparaît comme terme source dans l'équation de bilan d'énergie acoustique en milieu réactif. Ce critère est donc souvent avancé comme condition nécessaire mais non suffisante à l'apparition des instabilités thermo-acoustiques. En effet il ne prend pas en compte les éventuelles dissipations de l'énergie acoustique au sein du système.

Cet exemple nous permet d'exposer les phénomènes fondamentaux qui interviennent dans l'existence d'une instabilité thermo-acoustique. Comme la figure 1.6 l'illustre, l'existence de mode propre au système induit un champ acoustique qui va perturber la source de chaleur. La source perturbée, produit à son tour une perturbation de type acoustique, seule capable de remonter l'écoulement et d'interagir avec le système en amont. Cette rétroaction est directe puisque la variation du dégagement de chaleur est terme source dans l'équation des ondes pour les milieux réactifs [105] :

$$\nabla \cdot (c_0 \nabla p_1) - \frac{\partial^2 p_1}{\partial t^2} = (\gamma - 1) \frac{\partial \dot{\omega}_{T,1}}{\partial t} \quad (1.1)$$

où l'indice 0 indique une grandeur moyenne, et l'indice 1 la partie fluctuante. Les perturbations acoustiques émises par la source peuvent aussi interagir avec les conditions limites du système pour être réfléchies par exemple. L'énergie de ces perturbations peut alors alimenter le mode propre qui est en est à l'origine. On ferme ainsi la boucle d'amplification de l'instabilité.

L'action du champ acoustique dans le cas du tube de Rijke combine l'effet des perturbations de vitesse et les transferts thermiques de la grille. 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 [13][25]. On peut citer comme phénomènes pouvant induire une perturbation du dégagement de chaleur :

Variation de richesse : Les variations de richesse sont une source majeure de perturbation du dégagement de chaleur. 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 [124]. Ces variations locales de richesse peuvent être alors largement atténuées avec un mélange efficace. Ce mode d'interaction a été étudié en particulier par Lieuwen *et al.* [68]. Les résultats montrent que la dernière génération de turbines bas NOx (Dry Ultra Low NOx), fonctionnant en régime de prémélange pauvre, est particulièrement sensible aux variations de richesse. Cette sensibilité peut être attribuée à la relation entre la richesse et le dégagement de chaleur. Les perturbations de richesse sur une flamme proche de limite d'extinction pauvre, produisent des variations importantes des caractéristiques de la flamme telles que température 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 proches de la stœchiométrie.

Variation de surface de flamme : Les perturbations de vitesse déforment directement la flamme, ce 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 [127][65], théoriques [29][65][30] et numériques [127]. 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 l'épaisseur de flamme, alors on observe des déformations importantes du front de flamme [127]. Les conditions du maximum d'interaction semblent reliées à des valeurs du nombre de Strouhal $\frac{\omega L_f}{u_0}$ (où L_f

est la taille caractéristique de flamme). Schuller [127] propose par analyse dimensionnelle que l'amplitude des perturbations de surface de flamme est contrôlée par $\frac{\omega L_f}{S_L}$ et $\frac{S_L}{U_0}$.

Interaction flamme/tourbillon : Le rôle d'instabilités hydrodynamiques peut 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 mélange 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 [115][103][24][12][10]. La fréquence de détachement des tourbillons peut être fortuitement 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 mélange peuvent être efficacement excitées par le champ de vitesse acoustique [121]. Poinso *et al.*[103] 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 [136].

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 [74]. Ce phénomène est en général associé aux instabilités de type grondement (rumble, $f < 150Hz$) qui apparaît parfois au démarrage de turbines aéronautiques. [31][107]

L'action globale du champ acoustique sur la flamme est indirecte et résulte d'une combinaison de ce type d'effets. Chacun induisant un déphasage particulier entre p_1 et $\dot{\omega}_{T,1}$. Ce déphasage est fonction des temps caractéristiques respectivement associés aux phénomènes mise en jeu.

1.5 Les méthodes de contrôle

La suppression des instabilités de combustion est un défi majeur pour le design 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. L'usage du contrôle passif implique la modification du système, par un changement de géométrie, de type d'injection, installation de baffles, augmentateurs de mélange, générateurs de tourbillons, résonateurs acoustiques etc. Le contrôle actif implique l'usage de procédures dynamiques, fonction de l'état du système (injection carburant pulsée, forçage acoustique etc.). Les deux méthodes ont prouvé leur efficacité opérationnelle [121][95]. Paschereit [95], 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 (branche "action" sur Fig. 1.6) 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 une certaine connaissance du phénomène que l'on souhaite altérer. La mise au point de ces systèmes peut être longue, et utilise souvent la méthode essai-erreur pour optimiser l'efficacité du système de contrôle.

Initiés dans les années 1950 par les pionniers étudiant les instabilités dans le moteur-fusée (Marble, Cox, Crocco et Cheng), les systèmes de contrôle actif injectent dans les brûleurs des perturbations dont l'effet découple les phénomènes responsables des oscillations. Ils sont constitués d'un contrôleur et d'un actuateur (boucle ouverte). Les systèmes en boucle fermée utilisent un senseur (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. Appliquées avec succès sur des brûleurs modernes, les perturbations peuvent être appliquées sur l'alimentation de carburant [96] ou utiliser un forçage acoustique déphasé (type anti-bruit) [101]. S'ils sont extrêmement efficaces, en particulier en boucle fermée auto-adaptative, 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. On les considère actuellement comme des palliatifs. 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.

1.6 Les méthodes d'étude et de prédiction des instabilités thermo-acoustiques

Avant que le problème des instabilités de combustion (**IdC**) soit reconnu par l'industrie des TàG, 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. La nature complexe du couplage entre la flamme et l'acoustique continue de faire du contrôle des instabilités de combustion un point essentiel dans le dessin et le développement des TàG mais aussi dans de nombreuses autres applications de combustion. Les différentes techniques de prédiction des IdC peuvent être classées en trois catégories :

Les méthodes de bas ordre : Ces méthodes pionnières ont été développées pour se contenter des capacités de calculs limitées et tirent donc parti au maximum de modélisations poussées. Elles utilisent une modélisation complète pour chaque élément du système de combustion. On classe dans cette catégorie le code réseau [7] qui modélisent le système par un ensemble d'éléments acoustiques 1D, d'impédance connus (type fonction de transfert), 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.

Codes acoustiques : En linéarisant les équations de Navier-Stokes perturbées pour les fluides réactifs, on obtient une équation des ondes inhomogènes pour les perturbations acoustiques de pression (Eq. 1.1). Cette approche tridimensionnelle peut être résolue dans le domaine temporel ou fréquentiel [110][7][22]. Les principaux points durs restent la fermeture du terme combustion et détermination et la prise en compte de conditions limites acoustiques réalistes. Les solutions approchées sont obtenues par des méthodes éléments-finis (Galerkin, résidus pondérés etc.).

Résolution Directe : Les développements récents des simulations instationnaires réactives à coût informatique abordable (LES) permettent de résoudre directement les phénomènes d'instabilités.

Les deux premières approches nécessitent une loi de fermeture pour le terme de dégagement de chaleur. Ces modèles de fermeture relient en général les perturbations de vitesse et/ou pression aux fluctuations du dégagement de chaleur. Le modèle le plus célèbre reste sans doute le modèle $n - \tau$ de Crocco et Cheng [21]. 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_1 et les fluctuations

de chaleur $\dot{\omega}_{T,1}$. La phase entre les deux signaux est contrôlée par un temps de retard τ .

$$\dot{\omega}_{T,1} = n\dot{\omega}_{T,0}(1 - e^{i\omega\tau})\frac{p_1}{p_0}$$

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 populaire est à l'origine de nombreux dérivés [143]. Dans tous les cas, les paramètres (n, τ) de ces modèles sont inconnus, le modèle doit être calibré (analytique, expérience, numérique). Le principal défaut de ces méthodes 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.

En partant de l'hypothèse que le dégagement de chaleur peut s'écrire :

$$\dot{\omega}_T = \rho_u S_L A_f \Delta h$$

avec ρ_u la densité des gaz frais, S_L la vitesse de flamme, A_f la surface de flamme et Δh la chaleur de réaction. On peut alors différentier les perturbations agissant sur la flamme [69][48], comme la variation de vitesse de flamme, les variations de surface [17][30].

Le calcul direct des IdC exige des capacités de calculs 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'IdC, il faut être capable de capturer de nombreux phénomènes aux échelles de temps et longueurs extrêmement variées :

- dynamique globale du brûleur et les instabilités hydrodynamiques associées
- l'acoustique du brûleur
- les phénomènes de transport
- la cinétique chimique
- les transferts de chaleur
- l'atomisation et vaporisation, pour les foyers à carburant liquide

Dans les IdC associées à des modes longitudinaux, les longueurs d'onde correspondantes sont plusieurs fois supérieures à la taille de la chambre ($\simeq 1m$) 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 de particulière importance, les approches RANS sont naturellement écartées. Le seul paradigme de calcul permettant un compromis entre précision et coût calcul, reste la simulation aux grandes échelles (LES). La LES ne résolvant pas les plus petites échelles de la turbulence, elle utilise une modélisation pour prendre en compte leurs effets. Pour la LES réactive, un modèle de combustion turbulente est aussi nécessaire. Son utilisation s'est démocratisée au long de ces dernières années, à mesure que

les puissances de calculs disponibles ont augmenté. Il est aujourd'hui possible de tourner des calculs LES réactifs de configuration industrielle sur une modeste grappe de PC. Contrairement aux approches précédentes, l'approche directe ne nécessite pas de modèle de fermeture propre à l'étude des IdC.

1.7 Une approche alternative

Les méthodes exposées précédemment, tentent à la fois d'identifier les modes propres du système et de déterminer leur taux d'amplification (ou d'amortissement). Néanmoins la susceptibilité de certains modes à être amplifiés ou amortis peut fortement dépendre de la sélection du mécanisme d'amplification et/ou d'amortissement inclus dans la modélisation. Nous voulons ici associer l'approche directe, c'est-à-dire associer une simulation par LES d'une séquence instable dans un brûleur, à une analyse énergétique de l'acoustique. Bien que les équations de conservation pour l'énergie acoustique soient déjà établies [16][151][61][14][105], avec des formulations variant légèrement suivant les hypothèses retenues, on ne trouve trace dans la littérature de la vérification de ces équations de bilan. L'intérêt d'opérer la fermeture de telles équations réside dans le calcul des différents termes qui la composent. L'évaluation de ces termes durant les différentes phases d'une instabilité (croissance, saturation, éventuellement amortissement) donnent des informations capitales sur les mécanismes pouvant servir à supprimer cette IdC. On pourra étudier en particulier les contributions des différents termes dans la croissance ou l'amortissement de mode énergétique à toutes les fréquences. Pour ces raisons, l'approche énergétique se positionne comme outil de diagnostic pour le dessin (ou contrôle) de brûleurs robustes aux IdC.

L'équation de conservation de l'énergie acoustique issue de la linéarisation des équations de Navier-Stokes perturbées prend une fois intégrée en volume la forme suivante [151] :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} e_1 dV = - \oint_{\partial\Omega} p_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} dS - \oint_{\partial\Omega} e_1 \mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Omega} (s_c - s_d) dV \quad (1.2)$$

Le premier terme du membre de droite est la contribution du flux acoustique aux limites du domaine, tandis que le second terme prend en compte la convection de l'énergie acoustique par l'écoulement moyen. Ce terme peut être négligé sous l'hypothèse de faible nombre de Mach. Le dernier terme du second membre regroupe les termes source et puits d'énergie. On décompose ce terme en deux contributions. La première s_c , traduit l'interaction du champ de pression acoustique à la perturbation du dégagement de chaleur, et peut être de signe quelconque. Ce terme est relié au critère de Rayleigh. La seconde contribution s_d , est purement dissipatrice et regroupe une somme de phénomènes dont [151] :

- Amortissement des parois dû à la dissipation visqueuse au sein des couches limites. On peut aussi y ajouter les effets bien plus conséquents des parois

- perforées et fentes de refroidissement.
- L’amortissement dû à une charge de particules, provenant d’un spray par exemple.
 - La dissipation visqueuse qui est sensée avoir peu d’influence à basse fréquence, mais voit sa contribution augmenter pour les hautes fréquences. C’est peut être une des raisons de l’absence d’IdC à très haute fréquence.
 - L’amortissement par relaxation de flamme. C’est une forme de dissipation qui dépend de la fréquence, du temps de relaxation chimique (qui est une mesure du taux de réaction) et du rapport de vitesse du son entre les gaz brûlés et gaz frais.

La contribution de ces différents mécanismes dans l’augmentation de l’énergie acoustique du système peut alors être estimée dans le facteur d’amplification de l’énergie acoustique g :

$$g = \frac{-\oint_{\partial\Omega} p_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} dS - \oint_{\partial\Omega} e_1 \mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} s_d dV + \int_{\Omega} s_c dV}{2E_1 V} \quad (1.3)$$

$$\text{avec } E_1 = \int_{\Omega} e_1 dV \quad (1.4)$$

Si le terme source est positif et prépondérant devant les termes de dissipation et de flux, alors le système est susceptible de développer une IdC aux conditions données. Dans l’étude menée ici, les termes de dissipation sont négligés, l’attention est concentrée sur le rôle des flux acoustiques dans l’équilibre acoustique des systèmes de combustion fonctionnant en prémélange.

1.8 Modèles de combustion en LES

La nécessité de résoudre l’acoustique des chambres de combustion oblige à utiliser des codes LES compressibles pour l’étude des IdC par approche directe. Une composante importante des codes LES réactifs consiste bien évidemment dans le ou les modèles de combustion implémentés. Sans détailler les premiers modèles mis au point comme l’Eddy Break Up de Spalding, on s’intéresse prioritairement aux modèles les plus avancés actuellement et les plus couramment utilisés :

Modèle Equation de G : Ce modèle se base sur une description géométrique de la flamme [59]. Le front de flamme est matérialisé par un niveau particulier G^* d’une grandeur G . L’évolution du champ de G est régie par une équation advectant le front à la vitesse de flamme turbulente S_T :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla G = S_T |\nabla G| \quad (1.5)$$

Le modèle de description doit être complété par une fermeture S_T en sous-maille. On base cette fermeture sur une expression qui relie S_T aux fluctua-

tions turbulentes de la vitesse u' :

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + \alpha \left(\frac{u'}{S_L} \right)^n \quad (1.6)$$

où α et n sont des constantes à ajuster ou déterminer dynamiquement. Le champ de G est a priori découplé du champ de variable d'avancement de la réaction. De fait le champ de G peut suivre des gradients contrôlés au niveau du front. La description géométrique du front, rencontre néanmoins des problèmes numériques (apparition de rebroussements⁵), et limite son domaine de validité au régime de flammelettes.

L'approche "Level Set" développée par Peters [97] étend la validité au régime de flammes minces ($S_T \simeq S_L$) en intégrant au modèle un terme diffusif modélisant l'influence des échelles de Kolmogorov sur la zone de préchauffage. Les problèmes numériques sont résolus en considérant G comme la distance au front de flamme. On s'assure alors de la régularité du champ de G en imposant la condition : $|\nabla G|=1$. Son application concluante à la LES réactive a été développée par Pitsch et Duchamp [28][100]

Modèle de densité surface de flamme : Cette approche décrit le taux de réaction moyen en fonction d'une densité de surface de flamme. On suppose que l'avancement local par unité de surface de flamme s'écrit :

$$\dot{\omega}_T = \rho_0 w_L \Sigma$$

où w_L est le taux de consommation moyen de flamme et Σ , la densité de surface de flamme. Le principal avantage est de séparer la chimie incluse dans la modélisation de w_L , de l'interaction flamme /turbulence, prise en compte par le modèle décrivant Σ . On peut déterminer w_L à partir d'une bibliothèque de flammelettes. La détermination de Σ peut être tirée de relations algébriques [9] ou par résolution d'une équation de conservation [142][146].

Modèle de flamme épaissie : C'est le modèle qui sera utilisé dans les calculs présentés dans cette étude. Dans ce modèle initialement élaboré pour des simulations directes (DNS) réactives, la flamme est explicitement calculée avec des taux de réaction suivant une loi d'Arrhenius. Afin de pouvoir résoudre la structure de flamme sur le maillage LES, on épaissit artificiellement la flamme en augmentant la diffusivité thermique. Les équations de transport des espèces sont aussi modifiées de manière à conserver les taux de réaction laminaires. De cette façon, les vitesses de flamme sont conservées, malgré l'épaississement [18]. Les détails de ce modèle sont fournis au Chapitre 2. Les principaux avantages sont sa simplicité de mise en oeuvre et sa prise en compte des effet cinétiques. L'utilisation de lois d'Arrhenius

⁵cusps

pour modéliser le taux de réaction⁶, permet sans traitement particulier, de prendre en compte l'allumage, l'extinction, interaction flamme/parois, les effets de cinétique chimique etc. Son extension à la LES a nécessité le développement du modèle d'efficacité [19](Sec. 2.4) pour prendre en compte le effet de la combustion en sous-maille. Cette approche possède la caractéristique appréciable de dégénérer naturellement vers la DNS. Les revers de l'épaississement de la flamme de δ_L^0 à $F\delta_L^0$ concernent la modification du nombre de Damköhler, qui compare les échelles de temps turbulent τ_t , et chimique τ_c :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{L_I S_L}{u' \delta_L^0}$$

L'épaississement diminue le nombre de Damköhler à $Da^{th} = Da/F$. La flamme épaissie est rendue moins sensible aux effets de courbure dus à la turbulence, elle devient par contre plus sensible à l'étirement comparativement à une flamme non-épaissie [2]. Les tourbillons de la taille $F\delta_L^0$ voient leur interaction avec le front de flamme altérée. On peut minimiser ces effets en les incorporant dans le modèle de combustion de sous-maille. Le modèle d'efficacité peut alors calculer précisément l'effet des échelles résolues de taille supérieure à environ $10\delta_L^0$ sur la combustion en sous-maille. Une flamme trop épaissie verra sa dynamique modifiée alors que l'effet du modèle de combustion turbulente lui reste inchangé. Pour cela il convient d'épaissir la flamme le moins possible.

⁶On peut néanmoins envisager d'autre moyen, comme les chimies tabulées.

1.9 Organisation de ce document

Ce mémoire de thèse porte principalement sur l'étude des instabilités de combustion dans les chambres de combustion des turbines à gaz par une approche LES associée à une analyse de l'énergie acoustique. Un chapitre et néanmoins dédié à l'optimisation des performances des schémas réduits de cinétique chimique. Outre cette introduction qui constitue le premier chapitre, ce mémoire de thèse, se divise en six chapitres :

Le chapitre 2 regroupe les formulations du modèle de Navier-Stokes pour les écoulements compressibles réactifs. On y introduit le modèle de la simulation aux grandes échelles ainsi qu'une description du solveur AVBP utilisé pour les calculs.

Le chapitre 3 décrit la méthodologie employée pour l'optimisation des schémas cinétiques réduits. L'utilisation d'un algorithme génétique par l'outil d'optimisation, motive une revue des méthodes d'algorithmes génétiques.

Le chapitre 4 est dédié à la description du brûleur expérimental ECPmod utilisé pour les calculs servant à capturer une instabilité de combustion.

Le chapitre 5 répertorie les validations effectuées sur les calculs non-réactifs. Ces validations s'appuient sur des mesures expérimentales fournies par le laboratoire EM2C de l'Ecole Centrale de Paris.

Le chapitre 6 introduit l'approche énergétique de l'étude des instabilités de combustion et présente différents cas de validation de cette approche basés sur des expériences numériques de cas élémentaires.

Le chapitre 7 inclut l'article à paraître dans AIAA journal portant sur la fermeture du bilan d'énergie acoustique dans un brûleur prémélangé dont le niveau d'instabilité peut être modulé. Cet article intègre aussi un travail de collaboration sur la prédiction des modes instables à l'aide d'un solveur thermo-acoustique.

Chapitre 2

L'approche Simulation aux Grandes Echelles

2.1 Equations de conservation pour les fluides réactifs

Cette section présente les équations de conservations pour les fluides réactifs. Ces équations sont basées sur le modèle de Navier Stokes, et prennent en compte la présence de différentes espèces chimiques, ainsi que les variations de densité. On ne fait en outre aucune hypothèse d'incompressibilité. Dans un premier temps, on ne suppose aucun modèle de résolution. Le jeu d'équations proposé est donc valable pour la simulation directe. Dans un second temps, le modèle de résolution de la simulation aux grandes échelles (LES) est appliqué.

Le jeu d'équation de conservation décrivant le modèle de Navier-Stokes peut être écrit sous la forme compacte suivante :

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

où \mathbf{w} est le vecteur des grandeurs conservatives :

$$\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$$

Avec respectivement : ρ , u , v , w , E , ρ_k , la masse volumique, les trois composantes cartésiennes de la vitesse, l'énergie massique, et les densités partielles $\rho_k = \rho Y_k$ des K espèces chimiques. Le vecteur des termes sources se réduit à :

$$\mathbf{s} = (0, 0, 0, \dot{\omega}_T, -\dot{\omega}_k)^T \quad (2.2)$$

La modélisation du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ et du taux de production d'espèce $\dot{\omega}_k$ est décrite en Sec. 2.1.6.

On décompose habituellement le tenseur de flux en une partie visqueuse et non-visqueuse :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{w})^I + \mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V \quad (2.3)$$

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

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho E + p)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (\rho E + p)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

La pression hydrostatique est déterminée à l'aide de l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 2.12) :

$$p = \rho(\gamma - 1)\left(E - \frac{1}{2}\mathbf{u}^2\right) \quad (2.5)$$

Les composantes du tenseur des flux visqueux $\mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V$ prennent la forme suivante :

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

$$\mathbf{g}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

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

où \mathbf{q} , \mathbf{J}_k , sont respectivement le flux de chaleur et le flux diffusif (Sec. 2.1.3) associé à l'espèce k . τ est le tenseur de contraintes explicité par les relations :

$$\tau_{ij} = 2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll}\right), \quad i, j = 1, 3 \quad (2.7)$$

et

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right), \quad i, j = 1, 3 \quad (2.8)$$

où μ est la viscosité moléculaire (Sec. 2.1.4).

2.1.1 L'équation d'état

Nous supposons que le mélange réactif est composé d'un nombre fini K d'espèces gazeuses. Les gaz ainsi que leur mélange seront supposés obéir à la loi des gaz parfaits. La composition du mélange peut être caractérisée par l'ensemble des valeurs prises par les fractions massiques Y_k de chaque espèce définies par :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (2.9)$$

où m_k est la masse de l'espèce k dans un volume donné et m la masse totale de ce volume. On définit alors la pression p comme la somme des pressions partielles p_k :

$$p = \sum_{k=1}^K p_k \quad \text{avec} \quad p_k = \rho_k \frac{R}{W_k} T \quad (2.10)$$

comme la densité du mélange est définie par :

$$\rho = \sum_{k=1}^K \rho_k \quad (2.11)$$

l'équation d'état s'écrit donc :

$$p = \rho \frac{\mathcal{R}}{W} T \quad \text{i.e.} \quad p = \rho r T \quad (2.12)$$

où r est la constante du mélange de gaz parfaits dépendant à la fois du temps et de l'espace.

Le poids moléculaire moyen W du mélange est défini à l'aide de la masse molaire W_k , et la fraction molaire X_k de l'espèce k par :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k} \quad \text{ou bien} \quad W = \sum_{k=1}^K X_k W_k \quad (2.13)$$

2.1.2 Variables thermodynamiques

La constante r et les capacités calorifiques (massiques) dépendent de la composition locale du mélange :

$$r = \frac{\mathcal{R}}{W} = \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^K Y_k r_k \quad (2.14)$$

$$C_p = \sum_{k=1}^K Y_k C_{p,k} \quad (2.15)$$

$$C_v = \sum_{k=1}^K Y_k C_{v,k} \quad (2.16)$$

où $\mathcal{R} = 8.3143 J/mol.K$ est la constante universelle des gaz parfaits. Le coefficient polytropique du mélange est défini par :

$$\gamma = C_p/C_v \quad (2.17)$$

L'état de référence correspond à $p_0 = 1$ bar et $T_0 = 0$ K. Les enthalpies sensibles et entropies de chaque espèce sont calculées à l'aide de :

$$h_{s,k}(T) = \int_{T_0=0K}^T C_{p,k} dT = \frac{h_{s,k}^m(T) - h_{s,k}^m(T_0)}{W_k} \quad (2.18)$$

$$s_k(T) = \frac{s_k^m(T) - s_k^m(T_0)}{W_k} \quad (2.19)$$

Les valeurs des $h_{s,k}^m(T)$ et $s_k^m(T)$ sont obtenues à partir de tables préétablies (JANAF [138]). On exprime alors l'énergie sensible de chaque espèce k :

$$e_{s,k}(T) = \int_{T_0=0K}^T C_{v,k} dT = h_{s,k}(T) - r_k T \quad (2.20)$$

On obtient alors pour le mélange :

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^K \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^K Y_k e_{s,k} \quad (2.21)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^K \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^K Y_k h_{s,k} \quad (2.22)$$

2.1.3 Vitesses de diffusion et conservation de la masse

Pour les mélanges multi-espèces, on utilise souvent pour définir les vitesses de diffusions V_k^i de chaque espèce, l'approximation de Hirshfelder *et al.*[45] :

$$Y_k \mathbf{V}^k = -D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \quad (2.23)$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k , D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce de k dans le mélange (Sec. 2.1.4). Néanmoins cette approximation n'assure pas nécessairement la conservation de la masse i.e. :

$$\sum_{k=1}^K Y_k V_i^k = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.24)$$

Afin de s'en assurer on introduit une vitesse de correction dont la définition est tirée de Eq. 2.23 et Eq. 2.24 :

$$\mathbf{V}^c = \sum_{k=1}^K D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.25)$$

On explicite alors le flux diffusif :

$$\mathbf{J}_k = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k - Y_k \mathbf{V}^c \right) \quad (2.26)$$

2.1.4 Coefficients de transport

Viscosité dynamique

Le calcul de la viscosité dynamique n'est pas rigoureusement exact puisqu'on fait l'hypothèse que la viscosité n'est pas fonction du mélange. On suppose que qu'elle est proche de celle de l'air car les mélanges sont composés la plupart du temps d'une majorité de N_2 . L'erreur introduite est relativement faible au regard des approximations faites par exemple sur les grandeurs thermodynamiques (grandeurs tabulées, supposées évoluer linéairement etc.) On utilise alors l'expression de Sutherland [139] :

$$\mu = c_1 \frac{T^{3/2}}{T + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (2.27)$$

où c_1 et c_2 sont des constantes à ajuster qui pour l'air ($T_{ref} = 273 \text{ K}$) sont $c_1 = 1.71\text{e-}5 \text{ kg/m.s}$ et $c_2 = 110.4 \text{ K}$ [149]

Conductivité thermique

La conductivité thermique λ est déterminée via le nombre de Prandtl Pr qui est spécifié¹ par l'utilisateur et considéré comme constant dans l'espace et le temps :

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

Coefficient de diffusion

Le calcul exact des coefficients D_k (i.e. de l'espèce k dans le mélange) est une tâche complexe et coûteuse demandant le calcul des coefficients de diffusion binaire D_{ij} (i.e. l'espèce i dans l'espèce j), qui nécessitent le calcul d'intégrales

¹En général fixé à $Pr \simeq 0.7$ dans les simulations

de collisions ([45]). Néanmoins, un tel niveau de précision pour le transport diffusif n'est pas nécessaire pour nos applications où les cinétiques chimiques sont extrêmement simplifiées. On utilise alors une approximation où le nombre de Schmidt S_c est considéré comme constant dans l'espace et le temps pour chaque espèce :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho S_{c,k}} \quad (2.29)$$

Comme on le voit les définitions du nombre de Prandtl et Schmidt servent à modéliser respectivement la diffusion thermique et moléculaire laminaire.

Flux de chaleur

Le flux de chaleur est exprimé à l'aide de la relation de Fourier pour la conduction auquel on ajoute un terme de transport de chaleur par diffusion entre les espèces (Eq. 2.26) :

$$\mathbf{q} = \underbrace{-\lambda \nabla T}_{\text{Flux conductif}} - \underbrace{\rho \sum_{k=1}^K \left(D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k - Y_k \mathbf{V}^c \right) h_{s,k}}_{\text{Flux diffusif}} \quad (2.30)$$

$$= -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^K \mathbf{J}_k h_{s,k} \quad (2.31)$$

2.1.5 Epaississement des fronts de flamme laminaire : Modèle de flamme épaissie (TF) pour écoulement laminaire ou la simulation directe

Pour les simulations directes ou calculs laminaires réactifs, il est souvent utile de pouvoir propager un front de flamme sans résoudre exactement la structure de flamme. En effet, celle ci demande la plupart du temps une résolution supérieure à celle nécessaire pour résoudre l'écoulement non-réactif. Il existe pour contourner cette difficulté plusieurs approches discutées en Sec. 1.8. La méthode utilisée dans AVBP (Thickened Flame Model [2][18][64]) fait appel à une technique d'épaississement artificiel du front de flamme initialement proposé pour des écoulements réactifs bidimensionnels par [11]. L'idée fondamentale découle d'une analyse dimensionnelle classique [151] qui montre que l'épaisseur de flamme est proportionnelle à la diffusion thermique :

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho (\mathbf{u} + \mathbf{V}^c) Y_k) = \nabla \cdot \left(\rho D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.33)$$

En augmentant artificiellement la diffusion dans la flamme, on obtient un épaississement du front mais aussi une modification de la vitesse de flamme laminaire². Cet effet, non souhaité, est annulé en modifiant à son tour le taux de production de l'espèce dans Eq. 2.33. La diffusivité thermique et moléculaire $D_{th} = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ et D_k sont remplacées respectivement par FD_{th} et FD_k (le nombre de Lewis $Le_k = \frac{D_{th}}{D_k}$ est conservé). Le front étant épaissi, le taux de réaction de l'espèce en question est lui divisé par le facteur F afin de conserver l'intégrale du taux de consommation de carburant inchangée. On conserve ainsi la vitesse de flamme laminaire :

$$S_L = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F}{\rho_1 \Delta Y_F} \quad (2.34)$$

L'équation de conservation des espèces (Eq. 2.33) est alors remplacée par la forme modifiée :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{u} + \mathbf{V}^c) Y_k) = \nabla \cdot \left(\rho F D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (2.35)$$

avec

$$\mathbf{V}^c = \sum_{k=1}^K F D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \quad (2.36)$$

Il existe plusieurs implémentations du modèle TF :

- Un épaississement constant est appliqué partout. Cette implémentation modifie inutilement le transport diffusif en dehors de zones de réaction.
- épaississement dynamique : un épaississement constant n'est appliqué que sur la flamme grâce à un senseur [63] détectant les fronts réactifs.
- épaississement dynamique local : l'épaississement est déclenché par le senseur de flamme. F est calculé localement en fonction de la taille de la maille Δ_x afin de résoudre optimalement ($\simeq 10$ points dans le front) la structure de flamme : $F = n \frac{\Delta_x}{\delta_L^0}$

2.1.6 Cinétique chimique

Nous allons définir l'expression de termes sources résolues de nature chimique. On se place dans un cadre où K espèces de symbole \mathcal{M}_k réagissent à travers M réactions. On décrit alors la j -ième réaction \mathcal{R}_j par :



²Dans l'analyse de Williams [151], $S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A}$, modélise la réaction par une fonction d'Arrhenius simple de pre-exponentielle A .

où ν'_{kj} et ν''_{kj} correspondent aux coefficients stoechiométriques molaires associés à l'espèce k et à la réaction j . Pour chaque réaction, la conservation de la masse implique :

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{kj} W_k = \sum_{k=1}^K \nu''_{kj} W_k \quad \text{ou bien} \quad \sum_{k=1}^K \nu_{kj} W_k = 0 \quad (2.38)$$

en définissant :

$$\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj} \quad (2.39)$$

On peut alors définir le taux d'avancement massique \mathcal{Q}_j de \mathcal{R}_j :

$$\mathcal{Q}_j = K_{fj} \prod_{k=1}^K [X_k]^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^K [X_k]^{\nu''_{kj}} \quad (2.40)$$

où K_{fj} et K_{rj} sont les taux de réaction respectifs de la réaction directe (\longrightarrow) et inverse (\longleftarrow) de \mathcal{R}_j . La concentration molaire est donnée par :

$$[X_k] = \rho Y_k / W_k \quad (2.41)$$

L'approche usuelle, dite directe, est d'utiliser une loi de type Arrhenius pour modéliser K_{fj} :

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_{a_j}}{RT}\right) \quad (2.42)$$

L'expression du taux de réaction inverse K_{rj} est reliée à K_{fj} par une constante d'équilibre K_{cj} [60] :

$$K_{rj} = \frac{K_{fj}}{K_{cj}} \quad (2.43)$$

avec

$$K_{cj} = K_{pj} \left(\frac{p_a}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^K \nu_{kj}} \quad \text{avec} \quad K_{pj} = \exp\left(\frac{\Delta S_j^a}{R} - \frac{\Delta H_j^a}{RT}\right) \quad (2.44)$$

L'exposant a signifie que les grandeurs sont entendues à la pression standard³ P_a . ΔS_j^a et ΔH_j^a correspondent à la variation d'entropie et d'enthalpie pour passer de l'état réactant à celui de produit pour \mathcal{R}_j et sont donnés par les relations :

$$\frac{\Delta S_j^a}{R} = \sum_{k=1}^K \nu_{kj} \frac{S_k^a}{R} \quad (2.45)$$

$$\frac{\Delta H_j^a}{RT} = \sum_{k=1}^K \nu_{kj} \frac{H_k^a}{RT} \quad (2.46)$$

³pression atmosphérique-101325 Pa

où les enthalpies et entropies des espèces sont généralement évaluées par :

$$H_k^a = \int_0^T C_{p,k}^a dT \quad (2.47)$$

$$S_k^a = \int_0^T \frac{C_{p,k}^a}{T} dT \quad (2.48)$$

H_k^a, S_k^a peuvent être évaluées à l'aide de tables ou d'approximations polynomiales de T .

Connaissant maintenant le taux d'avancement de chaque réaction, il est possible de calculer le taux de réaction massique de chaque espèce en sommant les contributions de chaque réaction à la création ou disparition de l'espèce en question :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (2.49)$$

2.1.7 Contraintes liées à l'équilibre chimique

L'utilisation de schémas cinétiques réduits à 1 ou 2 réactions nous oblige à devoir adapter ces cinétiques afin d'en retirer la précision maximale. Pour cela, on s'autorise, entre autres, à pouvoir utiliser des exposants arbitraires F_{kf} et R_{kj} en lieu et place de ν'_{kj} et ν''_{kj} dans l'expression du taux d'avancement \mathcal{Q}_j qui devient alors :

$$\mathcal{Q}_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{F_{kf}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{R_{kj}} \quad (2.50)$$

Néanmoins, remplacer les coefficients stœchiométriques par des valeurs arbitraires, ne peut être fait sans prêter attention à respecter certaines règles conditionnant l'obtention de l'équilibre chimique. À l'équilibre, $\mathcal{Q}_j = 0$. Ceci doit être vérifié pour les équations 2.40 et 2.50, dont on tire la relation :

$$\prod_{k=1}^K [X]_k^{F_{kf} - R_{kj}} = \prod_{k=1}^K [X]_k^{\nu_{kj}} \quad (2.51)$$

Afin d'assurer l'équilibre on doit alors respecter la condition :

$$F_{kf} - R_{kj} = \nu_{kj} \quad (k = 1..K) \quad (2.52)$$

2.2 Les équations constitutives de la LES

Echelles de la turbulence

Les équations de Navier-Stokes pour les fluides multi-espèces réactifs présentées à la section précédente décrivent complètement l'état du système que l'écoulement

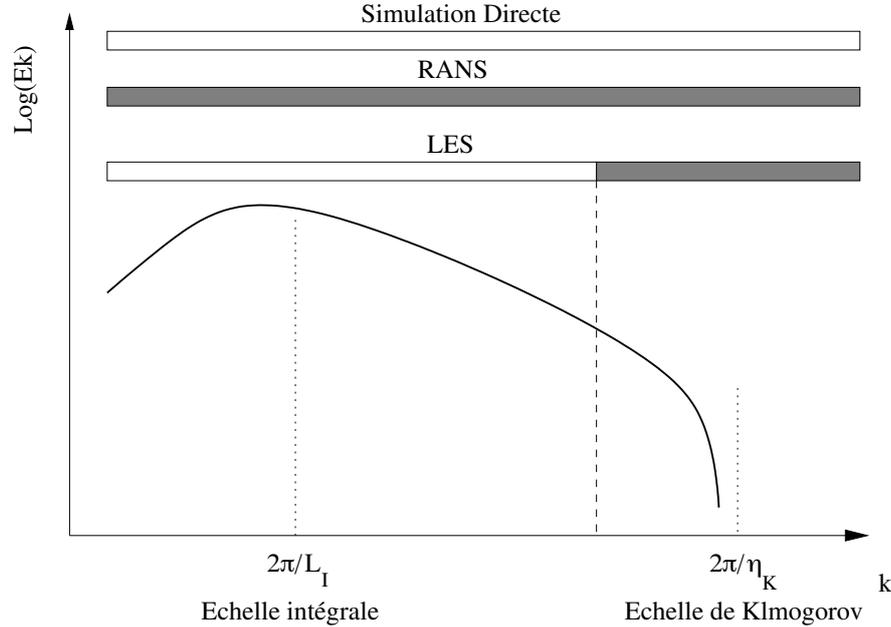


FIG. 2.1 – Spectre d'énergie cinétique turbulente et spectre de résolution des modèles de calcul : Résolu, Modélisé.

soit laminaire ou turbulent. Néanmoins si la résolution en écoulement laminaire ne pose pas de problème particulier, la transition vers les écoulements turbulents fait apparaître une multitude de tourbillons sur un spectre très large. La transition du régime laminaire au turbulent est contrôlée par le nombre de Reynolds de l'écoulement. On donne classiquement la valeur critique de 2000 pour la transition en conduite tubulaire. Cette valeur est toutefois fortement fonction de la configuration et des états de surface des parois puisqu'on arrive à maintenir expérimentalement des écoulements laminaires en conduite jusqu'à des nombres de Reynolds proche de 20000 [114][123]. Dans nos applications, le nombre de Reynolds est de toute manière largement au dessus de ces valeurs, on opère donc avec des écoulements pleinement turbulents.

On peut borner les échelles du spectre d'énergie turbulent par deux longueurs caractéristiques L_I , dite échelle intégrale et η_K dite échelle de Kolmogorov. L'échelle intégrale caractérise les plus grosses structures de l'écoulement qui sont pour les écoulements internes de l'ordre de la taille du système. À cette échelle, le mouvement de ces structures n'est quasiment pas affecté par les effets visqueux puisque le nombre de Reynolds associé $Re_I = \frac{u'_I L_I}{\nu}$ au mouvement turbulent à l'échelle intégrale est de l'ordre de 1000 [105]. L'échelle de Kolmogorov quant à elle donne l'ordre de grandeur des plus petites structures tourbillonnaires existantes. Leur nombre de Reynolds $Re_k = \frac{u'_k \eta_K}{\nu}$ associé est de l'ordre de l'unité, ces tourbillons sont alors dissipés par la viscosité moléculaire. Le spectre

d'énergie cinétique turbulent \mathbf{u}'^2 (Fig. 2.1) rend compte de la fragmentation des grands tourbillons en de plus petits. Ce phénomène appelé cascade de Kolmogorov, comporte un transfert d'énergie des grandes structures, qui contiennent la plus grande partie de l'énergie turbulente, vers les plus petites qui sont elles-mêmes alors dissipées par effet visqueux. L'analyse de Kolmogorov donne une estimation de l'étendue du spectre turbulent :

$$\frac{L_I}{\eta_K} = Re_I^{3/4} \quad (2.53)$$

Cette analyse d'ordre de grandeur, permet de constater que la capacité à résoudre l'écoulement dans un domaine tridimensionnel de la taille de l'échelle intégrale jusqu'aux plus petites échelles nécessite un nombre de points au moins supérieur à $Re_I^{9/4}$. Ceci mène vite à des tailles de maillage supérieures au milliard de points. Bien que ce niveau de précision ait été atteint et même dépassé (Earth Simulator, THI 4096³ [82]), ce genre de calcul est réservé à des cas académiques et relève de l'exercice de style et où le post-traitement des solutions est déjà un défi en soit.

Méthodes de résolution approchée des équations de Navier-Stokes

Les ressources limitées en capacité de calculs, ont amené à développer des approches modifiant les équations de Navier-Stokes (N-S) afin d'en réduire le coût de résolution en particulier sur des configurations industrielles. La première approche développée dans cet esprit correspond aux jeux d'équations RANS (Reynolds Average Navier-Stokes). On applique aux équations de N-S un opérateur de moyenne statistique⁴, éliminant ainsi la dépendance temporelle du problème. L'opérateur de moyenne élimine néanmoins toute l'information sur la turbulence et ce sur l'ensemble du spectre. Les termes restant ouverts répercutent l'influence de la turbulence sur la solution moyenne. Ces termes sont alors modélisés.

Le principal défaut de cette approche est justement de tenter de modéliser les effets de la turbulence sur l'ensemble du spectre. De fait il n'existe pas de modèle de fermeture universel (Baldwin-Lomax, k - ϵ , k - ω , Spalart-Almaras etc.), et chaque domaine d'application (aérodynamique interne, externe) est tenté de développer le ou les modèles ad hoc. Si les plus petites structures de la turbulence offrent un comportement statistique stable et connu, les effets des plus grosses structures responsables d'instabilités hydrodynamiques sont fortement dépendantes du problème et de sa géométrie et donc difficilement modélisables. Pour ces raisons, les méthodes RANS sont mises en défaut dès lors qu'une forte instationnarité intrinsèque à l'écoulement est présente.

Pour pallier ces défauts la simulation de grandes échelles (que l'on nommera par son acronyme anglo-saxon connu de tous : LES, pour Large Eddy Simulation) propose de conserver la résolution instationnaire des équations de N-S. De fait,

⁴Faisant l'hypothèse d'ergodicité, les moyennes temporelles ou d'ensemble sont équivalentes

la LES résout une partie du spectre de la turbulence. L'approche LES découpe le spectre turbulent en deux parties. Les grandes échelles de la turbulence d'un côté, résolues explicitement, et les petites échelles dont les effets sont là, à modéliser. Cette séparation des échelles s'opère en appliquant localement un filtre spatial de moyenne au jeu d'équations de N-S. L'étendue du filtre définit la fréquence de coupure en dessous de laquelle les structures turbulentes sont à modéliser puisque non résolues (Fig. 2.1).

2.2.1 Filtrage LES

La plupart des implementations n'opère pas de filtrage explicite lors du calcul. La résolution du maillage suffit à opérer implicitement ce filtrage puisqu'il est impossible de pouvoir représenter des structures de taille inférieure à $2\Delta_x$. Néanmoins, on doit établir le jeu d'équations de la LES issu du filtrage des équations de N-S. Le filtrage correspond à une moyenne spatiale opérée localement. Pour les écoulements à masse volumique variable, on utilise la moyenne de Favre (notée $\bar{\cdot}$), moyenne pondérée par la masse. Ceci permet d'éviter de modéliser certains termes dû à la variation de ρ dans le volume moyenné, apparaissant à l'issue du filtrage. On décompose alors toute grandeur extensive f , en une partie filtrée \tilde{f} et une partie non résolue, dite de sous-maille f' :

$$f = \tilde{f} + f' \quad (2.54)$$

Pour les grandeurs intensives la moyenne de Favre n'a pas vraiment de sens, on utilise alors la notation de moyenne spatiale \bar{f} pour la grandeur filtrée (ainsi que pour la densité puisque $\bar{\rho} = \bar{\rho}$). Il est classique de supposer la commutation de l'opérateur de filtrage et des dérivées spatiales sur un maillage régulier [145][120]. Cette hypothèse est maintenue ici sur des maillages irréguliers (voire mobiles [87]). L'erreur induite est supposée faible devant d'autres approximations introduites (modèle de turbulence de sous-maille, modèle de combustion turbulente, transport diffusif etc.).

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}} \quad (2.55)$$

Une fois l'opérateur de filtrage appliqué, on obtient le même jeu d'équation pour les grandeurs filtrées identiques à Eq. 2.1 auquel s'ajoute de nouveaux termes non fermés. Le tenseur des flux se voit alors ajouter une contribution de sous-maille \mathbf{F}' , ainsi que pour le vecteur des sources :

$$\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}^I + \mathbf{F}^V + \mathbf{F}' \quad (2.56)$$

$$\bar{\mathbf{s}} = \mathbf{s} + \mathbf{s}' \quad (2.57)$$

Les flux de sous maille s'écrivent :

$$\mathbf{F}' = \begin{pmatrix} -\tau'_{i1} \\ -\tau'_{i2} \\ -\tau'_{i3} \\ -(\tilde{u}\tau'_{i1} + \tilde{v}\tau'_{i2} + \tilde{w}\tau'_{i3}) + \mathbf{q}' \\ \mathbf{J}'_k \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

où sont à modéliser les termes suivants :

- Le tenseur de Reynolds de sous-maille (Sec. 2.3.1) :

$$\tau'_{ij} = -\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (2.59)$$

- Le flux diffusif de sous-maille (Sec. 2.3.2) :

$$\mathbf{J}'_k = \bar{\rho}(\widetilde{\mathbf{u} Y_k} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k) \quad (2.60)$$

- Le flux de chaleur de sous-maille (Sec. 2.3.3) :

$$\mathbf{q}' = \bar{\rho}(\widetilde{\mathbf{u} E} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{E}) \quad (2.61)$$

Nous décrivons par la suite les modélisations de différents flux de sous-maille. La modélisation des termes sources de sous-maille \mathbf{s}' est détaillée dans une section à part entière (Sec. 2.4). En effet, ces termes ne sont présents qu'à cause de la prise en compte des réactions chimiques. Leur traitement est donc uniquement lié au développement de la LES pour les applications de combustion (ou plus largement des écoulements réactifs), à la différence des modélisations utilisées pour les flux qui sont elles classiques en LES.

2.3 Modélisation des flux de sous-maille

L'objectif premier de la modélisation est de pouvoir approximer les termes inconnus à l'aide de grandeurs résolues dans le calcul. Les modèles de sous-maille doivent donc être capable de reproduire les effets de la turbulence non résolue à partir d'information résolue, une gageur en soit.

2.3.1 Modélisation du tenseur de Reynolds de sous-maille

La plupart des modèles de sous maille repose sur l'hypothèse de Boussinesq qui permet de relier le tenseur des contraintes non résolu τ' (Eq. 2.59) proportionnellement au tenseur des taux de déformation résolu \tilde{S} par l'intermédiaire d'une viscosité turbulente μ_t :

$$\tau'_{ij} = 2 \bar{\rho} \nu_t \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \bar{\rho} \nu_t \delta_{ij} \quad (2.62)$$

avec

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.63)$$

Le seul élément inconnu restant la viscosité turbulente que de nombreuses méthodes sont capables de modéliser. Nous ne présentons ici seulement, les deux modèles utilisés dans les calculs.

Le modèle de Smagorinsky

Ce modèle initialement proposé par Smagorinsky en 1963 dans [133] estime la viscosité $\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}$ proportionnelle au carré d'une échelle de longueur Δ_s et une échelle temps obtenue à partir du tenseur de taux de déformation \tilde{S} , ce qui n'est pas sans rappeler l'approche de la longueur de mélange :

$$\nu_t = (C_s \Delta_s)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad (2.64)$$

L'échelle de longueur est estimée dans AVBP par la taille du filtre LES, c'est à dire par la taille caractéristique de la maille (racine cubique du volume de maille). La constante prend en général la valeur de $C_s = 0.18$. Ce modèle à été employé dès les premières LES, et utilisé par la suite dans de nombreuses validations de la LES. C'est le modèle le plus largement implémenté dans les codes LES. Pour cette raison, il est reconnu que :

- Il est souvent trop dissipatif, d'où son incapacité à rendre compte de la transition turbulente.
- Par construction ν_t est importante dans les zones de cisaillement et fort gradient. Par conséquence, le modèle de Smagorinsky ne dégénère pas correctement à la paroi puisqu'il n'y prédit pas la décroissance de la turbulence.
- Il est incapable de rendre compte d'éventuel transfert d'énergie des petites échelles vers les échelles résolues (back-scattering), puisque ν_t reste par construction strictement positive
- La constante C_s n'est pas universelle, et a du être réajustée dans certains cas.

Il a été modifié afin de prendre en compte l'anisotropie des maillages [128]. Une formulation dite dynamique [36], déterminant localement la "constante" C_s . Néanmoins si la formulation de Germano a montré sa supériorité sur des cas de validation académique, Il ne semble pas offrir d'avantage décisif sur des calculs en configuration industrielle où d'autres approximations induisent des erreurs d'ordre supérieur.

Le modèle WALE

Le modèle de WALE [90] a été développé pour les écoulements internes et se doit ainsi d'obtenir un comportement rigoureux à la paroi. WALE utilise le modèle

de Smagorinsky comme base et le modifie de sorte à obtenir une décroissance de ν_t vers la paroi. Pour cela, le taux de déformation est remplacé par une fonction qui détecte les fortes déformations et rotations et pas le cisaillement des particules comme dans le modèle de Smagorinsky :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (2.65)$$

avec

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij}, \quad (2.66)$$

La constante est selon les auteurs relativement invariante, et ils préconisent après calibration sur des calculs de turbulence homogène isotrope :

$$C_w = 0.5 \quad (2.67)$$

2.3.2 Modélisation du flux diffusif de sous-maille

Comme pour les flux diffusifs résolu, on fait l'hypothèse de nombre de Schmidt constants. On suppose par ailleurs qu'ils ont tous unitaires :

$$S_{c,k}^t = S_c^t = 1 \quad \forall k \quad (2.68)$$

On définit alors la diffusivité turbulente des espèces :

$$D^t = \frac{\nu_t}{S_c^t} \quad (2.69)$$

où ν^t est calculé par le modèle de sous-maille des tensions de Reynolds (Sec. 2.3.1)

La contribution de sous-maille au transport des espèces vaut alors :

$$\mathbf{J}'_k = -\bar{\rho} \left(D^t \frac{W_k}{W} \nabla \tilde{X}_k - \tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{V}}^{c'} \right) \quad (2.70)$$

avec pour contribution de sous-maille à la vitesse de correction :

$$\tilde{\mathbf{V}}^{c'} = \sum_{k=1}^K D^t \frac{W_k}{W} \nabla \tilde{X}_k \quad (2.71)$$

2.3.3 Modélisation du flux de chaleur de sous-maille

De la même manière que pour le flux résolu, on suppose en sous-maille, un nombre de Prandtl constant :

$$P_r^t = 0.9 \quad (2.72)$$

Ce qui permet de calculer la conductibilité thermique en sous-maille :

$$\lambda_t = \frac{\mu_t C_p}{P_r^t} \quad (2.73)$$

Le flux thermique de sous-maille prend une forme similaire à la part résolue :

$$\mathbf{q}' = -\lambda_t \nabla \tilde{T} + \sum_{k=1}^N \mathbf{J}'_k \tilde{h}_{s,k} \quad (2.74)$$

2.4 Modèle de combustion turbulente

La prise en compte de front de flamme de prémélange dans un calcul LES pose un premier problème. L'épaisseur du front de flamme à pression atmosphérique⁵ est de l'ordre de $0.1mm$ alors que les capacités informatique actuelles courantes nous autorisent des résolutions de l'ordre du millimètre pour résoudre l'hydrodynamique des configurations industrielles à traiter. On peut estimer à une dizaine de points la discrétisation nécessaire du front avec des schémas centrés (faible dissipation), ce qui mènerait à des tailles de maille du $1/10^e mm$ pour discrétiser avec précision le front de flamme. Cette capacité de résolution n'est pas actuellement à la portée des calculs sur configurations complexes. Pour contourner la difficulté de la discrétisation de la flamme, deux grande catégories de solutions ont été développées :

- On considère le front de flamme comme infiniment fin et l'on met en oeuvre des techniques numériques adaptées pour convecter ce front en accord avec les principes de la combustion. C'est le cas des méthodes de type Equation de G [98] décrites en introduction.
- On épaissit artificiellement la structure de flamme jusqu'à pouvoir la résoudre sur le maillage LES.

C'est cette deuxième approche qui a été choisie dans AVBP avec le modèle de flamme épaissie, décrite en Sec. 2.1.5 La deuxième difficulté majeure dans la modélisation de la combustion turbulente est la prise en compte de l'influence des structures non résolues par la LES sur la flamme. En effet, ces structures ont une contribution essentielle sur la combustion en termes de plissement et de surface de flamme. La modélisation de la combustion en sous-maille prend alors toute son importance. Il est à noter que l'emploi du modèle de flamme épaissie nécessite en fait de modéliser les effets de la turbulence au-delà de l'échelle de la maille (échelle de coupure LES). En effet, l'épaississement du front limite l'interaction avec les tourbillons (Fig. 2.2) jusqu'à une taille caractéristique de l'ordre de $10\Delta_x$. L'épaississement réduisant le plissement, la surface de flamme est alors sous-estimée. Le modèle de combustion de sous-maille doit devoir prendre en compte

⁵cette épaisseur diminue encore avec la pression

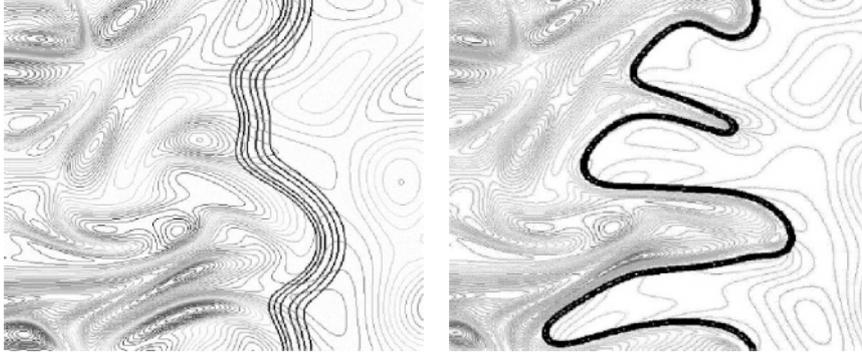


FIG. 2.2 – Simulation directe de l'interaction flamme/turbulence [105]. (—) isothermes, (—) iso-vorticité. Droite : flamme non épaissie. Gauche : flamme épaissie 5 fois.

ce phénomène. Le modèle implémenté dans AVBP repose sur l'estimation d'une fonction dite d'efficacité qui se base sur les grandeurs résolues pour modifier les différents termes influencés par la combustion en sous-maille. Une description complète de la fonction efficacité peut être trouvée dans Colin *et al.* [18]. Plus succinctement ici, le modèle est construit suivant les trois étapes :

- Le facteur de plissement de la flamme Ξ est estimé à partir de la densité de surface de flamme $\bar{\Sigma}$, en supposant un équilibre entre la turbulence et le plissement de sous-maille :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{s_l^0} \langle a_T \rangle_s \quad (2.75)$$

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

- $\langle a_T \rangle_s$ est estimé à partir de la taille du filtre Δ_e et la vitesse turbulente de sous-maille associée u'_{Δ_e} :

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma u'_{\Delta_e} / \Delta_e \quad (2.76)$$

La fonction Γ correspond à l'intégration du taux d'étirement effectif induit par toutes les échelles affectées par l'épaississement, i.e. de l'échelle de Kolmogorov η_K et la taille du filtre Δ_e [79]. Γ s'écrit :

$$\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) = 0.75 \exp \left[- \frac{1.2}{(u'_{\Delta_e}/s_l^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.77)$$

- La Fonction efficacité se définit comme le rapport entre le plissement estimé de la flamme non épaissie et le plissement mesuré de la flamme épaissie :

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}}{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}} \quad (2.78)$$

s_L^0 et δ_l^0 sont respectivement la vitesse et l'épaisseur de la flamme laminaire (non épaissie) et $\delta_l^1 = F\delta_l^0$.

Par construction E varie entre 1 (laminaire) et $E_{max} \simeq F^{2/3}$ (fort plissement du front en sous-maille). En régime de combustion prémélangé la fonction efficacité assure que la vitesse de flamme turbulente soit : $S_T = ES_L^0$. La taille du filtre Δ_e définissant l'échelle des plus grandes structures dont l'effet (sur la flamme) est atténué par l'épaississement est de l'ordre de l'épaisseur de flamme épaissie i.e. $\Delta_e = 10\Delta_x$. En pratique, on choisit donc l'épaississement qui permettra d'obtenir cette résolution⁶. La vitesse turbulente associée à l'échelle du filtre u'_{Δ_e} est estimée à l'aide d'un opérateur basé sur le rotationnel de la vitesse pour en soustraire la composante de dilatation (à divergence non nulle) :

$$u'_{\Delta_e} = 2\Delta_x^3 |\nabla^2(\nabla \times \bar{u})| \quad (2.79)$$

2.5 Description du solveur réactif compressible AVBP

AVBP est un solveur parallèle de type volumes-finis (VF) pour les écoulements tridimensionnels compressibles et réactifs. Sa capacité à pouvoir traiter efficacement des configurations à géométrie complexe tient pour bonne part à la capacité d'utiliser un maillage non-structuré hybride, i.e. pouvant être constitué d'éléments de volume quelconques (tétraèdres, prismes, pyramides ou hexaèdres). Les maillages non-structurés offrent une flexibilité optimale pour discrétiser efficacement les géométries les plus complexes. De plus un gain de temps appréciable est à noter dans la confection du maillage. Là où plusieurs jours sont nécessaires pour mailler en structuré multi-blocs, seulement quelques heures seront nécessaires pour un maillage non-structuré. Cette flexibilité se paye par une efficacité moindre par rapport aux codes structurés. En effet, les codes structurés tirent partie de la structure de données simplifiée par le type de maillage (hexaédrique structuré). À l'inverse la structure de données nécessaire à un solveur non-structuré est plus complexe (indexation indirecte, table de correspondance etc.). En particulier elle mène à des accès-mémoires désordonnés et se prête ainsi moins bien à l'optimisation de l'efficacité de calcul. En particulier les codes non-structurés offrent de performances très médiocres sur les calculateurs vectoriels. Cette architecture de calculateur tenait le haut du pavé en termes de puissance de calcul, il y a encore quelques années (Fujitsu VPP séries, NEC SX-5/6 Earth Simulator). Ils sont dorénavant supplantés par les calculateurs massivement parallèles qui utilisent des processeurs de type scalaires (Compaq-Alpha, IBM-SP, Clusters-linux etc.),

⁶L'implémentation de l'épaississement dynamique local calcule localement l'épaississement nécessaire en fonction de la résolution du maillage.

et la disparition des calculateurs vectoriels est quasi assurée avant les dix ans à venir. C'est justement sur les architectures à processeurs scalaires, que les codes non-structurés donnent le meilleur en termes d'efficacité de calcul.

Si le choix d'un solveur non-structuré n'était pas évident à la naissance d'AVBP ce choix s'avère payant à l'heure actuelle, où le code, arrivé à maturité, permet de tirer parti au maximum de ces architectures actuelles avec lesquelles il est courant de calculer sur plusieurs centaines de processeurs. Le concept de décomposition de domaines affecte à chaque processeur, un sous-domaine de calcul. Un algorithme de partitionnement est dévolu à minimiser la surface de contact entre chaque sous-domaine afin de limiter d'abord le nombre puis la taille des messages entre processeurs. La "scalabilité" exemplaire d'AVBP (eg. accélération parallèle⁷ de 3800/4000 sur Blue Gene/L, 131072 processeurs) montre que la qualité de la structure de données, ainsi que des choix dans les méthodes numériques mais aussi et surtout de la fiabilité et la performance de la librairie MPL gérant le parallélisme du code ([118][117]) sur standard MPI-1. Codé en fortran 77 suivant les standards de codage, AVBP est porté sur la quasi-totalité des architectures parallèles (et sérielle) du marché (SGI-Origin, IBM-SP, Compaq Alpha server, Cray XD1, Macintosh-PowerPC, PC-Linux, PC-Windows).

2.5.1 Méthodes numériques

La discrétisation des équations LES introduit obligatoirement une erreur. Rien ne sert de développer un cadre élaboré et une modélisation fine si la précision des schémas de discrétisation n'est pas à la hauteur. On qualifie la qualité globale d'un schéma par trois critères que sont l'ordre de précision, la dissipation et la dispersion (distorsion des vitesses de convection en fonction des longueurs d'ondes)

La LES en particulier nécessite des schémas très peu dissipatifs. L'utilisation de schémas décentrés permet d'augmenter la marge de stabilité. Néanmoins, ces schémas introduisent systématiquement une viscosité numérique (qui est à l'origine de leur stabilité!) induisant un amortissement artificiel des structures résolues, grevant ainsi la précision du solveur. Ils sont à proscrire dans toute utilisation pour la LES où la dissipation des plus petites échelles résolues doit être contrôlée par la viscosité du modèle de sous-maille (et la viscosité laminaire). Les schémas centrés présentent la qualité de disperser peu, mais sont en général assez dispersifs et conditionnellement stables (CFL). Le contrôle de la stabilité par l'ajout finement contrôlé de viscosité artificielle est parfois nécessaire pour amortir certaines instabilités numériques de type wiggles par exemple. Son utilisation est déclenchée par un senseur qui permet d'agir localement sans dégrader la solution tout entière. L'utilisation de maillage non-structuré limite les schémas volumes-finis au deuxième ordre de précision. AVBP intègre pour cela un schéma

⁷speed up

classique de Lax-Wendroff (second ordre en espace et en temps). En effet il est impossible (ou alors a coût prohibitif) de trouver des seconds noeuds voisins comme on pourrait le faire facilement sur maillage structure $(i + 1, i + 2 \text{ etc.})$ afin d'augmenter l'ordre.

En appliquant un formalisme de type éléments-finis (EF), il est toute fois possible d'accroître la précision jusqu'à l'ordre trois. Le formalisme VF peut être assimilé au formalisme EF avec des fonctions de bases constantes (intégration). Le formalisme éléments fini augmente l'ordre en utilisant des fonctions de bases linéaires. Un schéma de ce type, Taylor-Galerkin [19], est implanté sous le nom de TTGC dans AVBP. Ce schéma présente une précision élevée, avec une dissipation extrêmement faible et une dispersion très limitée (voir l'étude de Moureau [85]). Néanmoins son utilisation se traduit par augmentation du coût de calcul par un facteur deux au minimum. On utilise alors ce schéma uniquement pour les simulations nécessitant une finesse particulière. Le schéma de Lax-Wendroff reste pour nous le schéma de base que l'on utilisera en priorité pour son bon rapport coût/précision. L'avancement en temps est confié à une intégration du type Runge-Kutta à 1 (équivalent au schéma d'Euler), 3 ou 4 étapes. L'intégration temporelle explicite induit une restriction forte au niveau du pas de temps. Le solveur étant compressible, la vitesse de référence pour construire le critère de stabilité de CFL⁸ n'est pas la vitesse convective u mais la vitesse des ondes acoustiques, à savoir $u + c$. En conséquence, si l'on veut pouvoir résoudre (pour le meilleur et pour le pire) l'acoustique instationnaire, l'approche explicite est quasi obligatoire. Elle grève certes les performances générales. En outre, l'avancement explicite permet de conserver une grande précision et surtout de permettre l'implémentation des différents modèles de façon naturelle, directe. En effet, l'implicitation nécessite la réécriture des équations discrétisées, et demande alors de bonnes connaissances en méthodes numériques, en particulier pour les termes sources de la combustion.

L'implémentation de la méthode de volumes-finis (VF) utilise la formulation "cell-vertex". Dans cette formulation les grandeurs conservatives sont calculées aux noeuds du maillage. Dans la formulation concurrente dite "cell-centered", le vecteur d'état est calculé au centre de la cellule (volume de contrôle). En considérant la formulation conservative des équations de Navier-Stokes (non-réactive) :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot F = \mathbf{0} \quad (2.80)$$

où \mathbf{w} est le vecteur d'état contenant les variables conservative et F le tenseur de flux. L'équation est intégrée sur le volume de la cellule Ω_j . On obtient alors le résidu à la cellule (la somme de flux sur les bords $\partial\Omega_j$ de la cellule) :

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{\partial\Omega_j} \int_{\partial\Omega_j} F \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.81)$$

⁸Courant-Friedrichs-Levy

On définit le volume nodal pour pouvoir ensuite normaliser le résidu au noeud. Le volume de chaque cellule est divisé par le nombre de point nn_j qui la constitue. On somme ensuite toutes les parts de volume adjacent au noeud k en question :

$$V_k = \sum_{j|k \in \Omega_j} \frac{V_{\Omega_j}}{nn_j} \quad (2.82)$$

Le résidu au noeud k apparaît alors comme la somme pondérée des résidus aux cellules contenant le point k :

$$\mathbf{R}(\mathbf{w}) = \frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} \frac{V_{\Omega_j}}{nn_j} \mathbf{R}_{\Omega_j} \quad (2.83)$$

L'avancement en temps peut être alors effectué explicitement (de type Euler ici) :

$$\mathbf{w}^{n+1} = \mathbf{w}^n - \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{w}^n) \quad (2.84)$$

La stabilité de l'intégration tient à la condition de Courant qui interdit qu'une information (de type acoustique dans le cas présent) ne travers plus d'une maille de longueur Δ_x .

$$\Delta t \leq \frac{CFL \Delta_x}{|u + c|} \quad (2.85)$$

La limite de stabilité est atteinte lorsque le nombre de CFL atteint l'unité. Ceci dérive d'une analyse monodimensionnelle, ce nombre est en pratique fixé a une valeur inférieure ($\simeq 0.7$). Il est à noter que la précision de l'intégration temporelle peut être augmentée en utilisant une intégration Runge-Kutta à trois ou quatre étapes [111].

Opérateurs de viscosité artificielle

Le solveur AVBP est doté de deux opérateurs de viscosité artificielle (VA) du second et quatrième ordre. Leurs caractéristiques respectives se résument à :

- L'action de la viscosité du second ordre est similaire à la viscosité moléculaire. Elle entraîne une dissipation qui permet par exemple de lisser les gradients trop raides. Mais son action est contrôlée par un senseur qui ne déclenche son ajout que si un problème est détecté. Cet opérateur assure donc la stabilité du calcul ponctuellement, uniquement là où cela est nécessaire.
- L'opérateur du quatrième ordre agit comme un bi-laplacien. Il permet de stabiliser les zones touchées par des instabilités numériques (wiggles) de courte longueur d'ondes ($2\Delta_x, 4\Delta_x$).

Les senseurs utilisés pour la viscosité sont de deux types. Le senseur de Jameson [50] se déclenche en testant les anomalies sur la pression. Il se déclenche assez rapidement ajoutant une viscosité sur l'équation de l'énergie, des espèces mais

aussi et surtout sur la quantité de mouvement. De fait, il induit une dissipation non négligeable sur les plus petites échelles résolues. On l'utilise en général en phase de convergence pour garantir la robustesse.

Le modèle de VA de Colin introduit un senseur plus sélectif. La VA est appliquée comme précédemment. Néanmoins la viscosité du quatrième ordre n'est jamais appliquée sur la quantité de mouvement évitant la dissipation des plus petites structures cohérentes. C'est ce modèle de VA qui est adopté pour la LES.

2.5.2 Conditions aux limites dans AVBP

Le choix d'avoir en AVBP un solveur compressible induit l'obligation (sans hypothèses supplémentaires de type approximation bas-Mach) de résoudre le champ acoustique instationnaire. C'est-à-dire le bruit généré par l'écoulement auquel s'ajoute, dans le cas réactif, celui de la combustion. Le bruit aérodynamique est généré par exemple par les jets turbulents, les couches limites turbulentes, en particulier décollées, les structures tourbillonnaires etc. Le bruit généré par la combustion provient globalement du déplacement du front de flamme turbulente qui par dilatation génère des ondes acoustiques sur un spectre large. On peut identifier ces sources dans l'équation d'onde, pour la pression acoustique dans les écoulements réactifs, dérivée dans [105] :

$$\nabla \cdot (c_0^2 \nabla p_1) - \frac{\partial^2}{\partial t^2} p_1 = -\gamma p_0 \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} - (\gamma - 1) \frac{\partial \dot{\omega}_T}{\partial t} \quad (2.86)$$

Le premier terme du membre de droite représente la source de bruit turbulent d'origine aérodynamique. Le second terme, représente lui le bruit provenant de la combustion. Il fait d'ailleurs intervenir la variation locale de taux de dégagement de chaleur. Dans les chambres de combustion, le très haut niveau de turbulence tant au niveau aérodynamique que de la combustion mène à des niveaux sonores intenses. L'énergie acoustique produite est pour partie dissipée par la viscosité, et pour le reste évacué par les entrées et sortie du système de combustion. La déformation des parois, ou leur perforation peut aussi dissiper une partie, néanmoins très faible de l'énergie acoustique. Dans les calculs, les murs sont considérés comme absolument rigides, la stabilité des calculs est alors dépendante essentiellement de la capacité des conditions limites à évacuer l'énergie acoustique. Comme déjà mentionné en Sec. 2.5.1, la présence d'ondes numérique de type wiggles (quasi invisibles) pose problème en particulier lorsqu'elles rencontrent une condition limite ordinaire (valeur ou flux imposé). Ces ondes numériques se réfléchissent alors en ondes acoustiques et interagissent avec l'écoulement [105][66]. On peut noter des exemples de phénomènes de couplage instable entre les entrées et sorties sur des cas d'advection pure 1D ([147]). L'établissement de condition limites couramment appelée non-réfléchissantes (ce qui n'est pas toujours précisément le cas, comme on le voit en Sec. 6). De nombreux auteurs ont participé à leur développement [33][119][141][39][89]. Le fon-

dement de ces méthodes repose sur la décomposition en ondes de la partie hyperbolique des équations de N-S, c'est à dire les équations d'Euler. Pour cela, la théorie des ondes caractéristiques est pleinement exploitée.

Conditions limites caractéristiques

AVBP utilise l'implémentation de la méthode NSCBC [102] étendue à la formulation multi-espèces [6]. On se reportera à [15] pour connaître les détails complets de l'implémentation dans AVBP. On se bornera ici à rappeler les relations fondamentales de la méthode. Pour simplifier les écritures on se place toujours dans un repère local à la condition limite. On y définit localement une normale (pointant vers l'intérieur du domaine), et deux vecteurs tangents orthonormaux pour compléter la base. La vitesse est alors décomposée par $\mathbf{u} = (u_n, u_{t1}, u_{t2})^T$. On écrit à la limite les équations de N-S multi-espèces sous la forme :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{d} = \mathbf{S} - \mathbf{T} \quad (2.87)$$

où \mathbf{V} est le vecteur de grandeurs primitives (pour K espèces) :

$$\mathbf{V} = (u_n, u_{t1}, u_{t2}, p, \rho_1, \dots, \rho_K)^T$$

Les termes \mathbf{d} et \mathbf{T} regroupent respectivement les contributions normales et tangentielles. \mathbf{S} regroupent toutes les autres contributions éventuelles telles que les effets visqueux, réactifs. Le vecteur \mathbf{d} s'écrit, avec N la matrice jacobienne de système :

$$\mathbf{d} = N \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial n} \quad \text{avec} \quad N = \begin{pmatrix} u_n & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & u_n & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & u_n & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \rho c^2 & 0 & 0 & u_n & 0 & \dots & 0 \\ \rho_1 & 0 & 0 & 0 & u_n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_K & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & u_n \end{pmatrix} \quad (2.88)$$

Le principe de la décomposition en onde repose sur la diagonalisation de la jacobienne des termes normaux. On peut ainsi écrire une équation de convection pour les ondes d'amplitude A qui sont en fait les vecteurs propres de N . Les valeurs propres λ associés sont les vitesses de convection des différentes ondes :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \lambda \frac{\partial A}{\partial \vec{n}} = S_A - T_A \quad (2.89)$$

où $S_A - T_A$ est la somme de tous les termes non-hyperboliques. L'amplitude des

4 + K ondes s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} \partial A_+ \\ \partial A_- \\ \partial A_{t1} \\ \partial A_{t2} \\ \partial A_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial u_n + \frac{1}{\rho c} \partial P \\ \partial u_n - \frac{1}{\rho c} \partial P \\ \partial u_{t1} \\ \partial u_{t2} \\ -\frac{Y_k}{c^2} \partial P + \partial \rho_k \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

et les vitesses de convection associées sont :

$$\begin{pmatrix} \lambda_+ \\ \lambda_- \\ \lambda_{t1} \\ \lambda_{t2} \\ \lambda_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n + c \\ u_n - c \\ u_n \\ u_n \\ u_n \end{pmatrix} \quad (2.91)$$

La variation d'amplitude est par définition :

$$\mathcal{L} = \lambda \frac{\partial A}{\partial n} = (\vec{x} \cdot \vec{n}) \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.92)$$

On exprime alors le terme normal en fonction des variations d'amplitudes \mathcal{L} :

$$\begin{pmatrix} d_{u_n} \\ d_{u_{t1}} \\ d_{u_{t2}} \\ d_P \\ d_{\rho_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) \\ \mathcal{L}_{t1} \\ \mathcal{L}_{t2} \\ \frac{\rho c}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) \\ \frac{\rho_k}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_k \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mathcal{L}_+ = (u_n + c) \left(\frac{\partial u_n}{\partial n} + \frac{1}{\rho c} \frac{\partial P}{\partial n} \right) \\ \mathcal{L}_- = (u_n - c) \left(\frac{\partial u_n}{\partial n} + \frac{1}{\rho c} \frac{\partial P}{\partial n} \right) \\ \mathcal{L}_{t1} = u_n \frac{\partial u_{t1}}{\partial n} \\ \mathcal{L}_{t2} = u_n \frac{\partial u_{t2}}{\partial n} \\ \mathcal{L}_k = u_n \left[\frac{\partial \rho_k}{\partial n} - \frac{Y_k}{c^2} \frac{\partial P}{\partial n} \right] \end{cases} \quad (2.93)$$

Les ondes acoustiques \mathcal{L}_+ et \mathcal{L}_- sont convectées respectivement à la vitesse $u_n + c$ et $u_n - c$. Les autres ondes se propagent à la vitesse convective de l'écoulement u_n . \mathcal{L}_{t1} et \mathcal{L}_{t2} sont les ondes de vorticit . Les K derni res ondes, convectent les perturbations sur les esp ces, c'est- -dire une onde entropiques. L'onde entropique \mathcal{L}_S n'est alors pas utilis e explicitement puisqu'elle se reconstruit   partir des ondes sur les esp ces :

$$\mathcal{L}_S = \sum_{k=1}^N \mathcal{L}_k = u_n \left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial P}{\partial n} + \frac{\partial \rho}{\partial n} \right) \quad (2.94)$$

On a maintenant identifi  les ondes, et on peut les calculer explicitement avec Eq. 2.93. Il para t logique que les ondes sortante qui portent l'information de l'int rieur vers l'ext rieur soient laiss es telles quelles (calcul es par le solveur). C'est par contre par l'interm diaire des ondes entrantes que l'on va faire entrer l'information voulue. On ne peut pas calculer les ondes entrantes avec Eq. 2.93,

premièrement parce que c'est conceptuellement inexact et deuxièmement parce que le calcul des gradients "downwind" est inconditionnellement instable. On devra alors être capable de formuler une expression des ondes entrantes en fonction de l'objectif de la condition limite (i.e. des variables à imposer). Il est par contre assez peu pratique d'imposer directement les ondes. On risque par méconnaissance de rendre le problème mal pose. Les études théoriques [137][92] permettent de définir clairement le nombre et le type de variable primitives à imposer suivant le type de condition limite (entrée, sortie). Il est ensuite nécessaire d'obtenir des expressions reliant la variation temporelle de variable primitive aux différentes ondes. C'est ce que proposent les relations LODI⁹ multi-espèces [102] en réévaluant le système Eq. 2.87 sans termes visqueux au voisinage des limites du domaine :

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\rho c}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) = 0 \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) = 0 \quad (2.96)$$

$$\frac{\partial u_{t1}}{\partial t} + \mathcal{L}_{t1} = 0 \quad (2.97)$$

$$\frac{\partial u_{t2}}{\partial t} + \mathcal{L}_{t2} = 0 \quad (2.98)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\rho_k}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_k = 0 \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) + \mathcal{L}_S = 0 \quad (2.100)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{1}{\rho}(\mathcal{L}_k - Y_k \mathcal{L}_S) = 0 \quad (2.101)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{1}{\rho}(r \mathcal{L}_S + \sum r_k \mathcal{L}_k) = 0 \quad (2.102)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\beta T}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) - \frac{T}{\rho r} \sum r_k \mathcal{L}_k = 0 \quad (2.103)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\beta T}{2c}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) - \frac{T}{\rho} \mathcal{L}_S = 0 \quad (2.104)$$

$$\frac{\partial \rho u_n}{\partial t} + \mathcal{L}_+(\frac{\rho}{2}(\gamma M_n + 1)) + \mathcal{L}_-(\frac{\rho}{2}(\gamma M_n - 1)) + \frac{\rho c M_n}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (2.105)$$

$$\frac{\partial \rho u_n}{\partial t} + \mathcal{L}_+(\frac{\rho}{2}(M_n + 1)) + \mathcal{L}_-(\frac{\rho}{2}(M_n - 1)) + c M_n \mathcal{L}_S = 0 \quad (2.106)$$

où $M_n = u_n/c$ est le nombre de Mach normal et $\beta = \gamma - 1$. On peut éventuellement écrire des relations équivalentes pour l'enthalpie, la quantité de mouvement en combinant les expressions précédentes.

Prenons l'exemple d'une sortie sur laquelle la seule variable primitive à imposer est la pression. Sur ce type de condition, la seule onde entrante est l'onde

⁹Local One Dimensional Inviscid

acoustique remontant l'écoulement \mathcal{L}_- . Si l'on souhaite obtenir une condition de sortie parfaitement non-réfléchissante, on se doit d'imposer $\mathcal{L}_- = 0$. Ce qui permet d'exprimer la pression à imposer en sortie :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\rho c}{2}\mathcal{L}_+ \quad (2.107)$$

Néanmoins ce genre de conditions n'est pas très robuste car une dérive de la pression est pratiquement inévitable. Afin de palier à ce phénomène, on se sert de l'onde entrante pour introduire un terme de rappel proportionnel à la dérive : $\mathcal{L}_- = K_p(p^t - p)$, où p^t est la consigne de pression à tenir. Dans ces conditions, la condition n'est plus que partiellement non réfléchissante. L'impédance effective de cette condition relaxante est discutée dans la Sec. 6 car son rôle dans la compréhension de l'apparition d'instabilités thermo-acoustique est essentiel. À l'extrême on peut rendre la condition de sortie totalement réfléchissante en y imposant un noeud de pression i.e. $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$. La relation 2.95 nous indique alors que l'on doit avoir l'onde entrante \mathcal{L}_- telle que (on y a ajouté le terme de rappel anti-dérive) :

$$\mathcal{L}_- = -\mathcal{L}_+ + \frac{\rho c}{2}(p^t - p) \quad (2.108)$$

L'onde sortante \mathcal{L}_+ étant calculée par Eq. 2.93 Le même principe est appliqué pour construire les conditions limites d'entrée (relaxante, réfléchissante)

Chapitre 3

Optimisation de cinétiques chimiques par algorithmes génétiques

3.1 Problématique et motivations

La pratique de la simulation en combustion de configurations industrielles nous conduit à traiter de l'oxydation de nombreux hydrocarbures purs tels que méthane, propane, heptane ou mélanges comme le kérosène et gaz naturel. Tant la multiplicité des carburants que des conditions opérationnelles nous conduit à devoir prêter attention à la modélisation de ces réactions chimiques. 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 (**MFL**) doit être en mesure de reproduire les principales grandeurs globales qui caractérisent pour partie, 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 δ_{th} .
- La composition des gaz brûlés à l'équilibre Y_k^{eq} .

3.1.1 Choix de la cinétique chimique réduite

Alors que la réalité des réactions d'oxydation des carburants implique plusieurs centaines voire plusieurs milliers de réactions élémentaires pour les carburants les plus lourds, l'utilisation habituelle de MFL réduit le nombre de réactions de 1 à 2¹. En effet, on se limite volontairement à quelques réactions, non pas

¹jusqu'à 4 réactions en 3D [143]

tant à cause du coup de calcul qui augmente avec le nombre de réactions (et donc d'espèces) que des problèmes de stabilité numérique qui interviennent lors de l'intégration des équations de transport des espèces. Ces remarques sont souvent avancées pour justifier l'emploi de méthodes nécessitant moins d'effort de calcul en partie décrites en 3.1.1. Ces critiques partent du principe que même en utilisant les méthodes de réduction systématique [99][148][135] de dimensionnalité moderne, le coût ainsi que la raideur numérique des équations couplées rend réductible l'approche directe. Ces méthodes sont capables de réduire les cinétiques à une dizaine de réactions (voire un peu moins), ce qui du point de vue d'un cinéticien est peu, mais beaucoup trop du notre. Prenant bonne note de ces remarques, on devra porter attention au fait que l'ajout de nouvelles espèces dans le MFL a deux principaux effets du point de vue de la performance de calcul. Pour chaque nouvelle espèce, une équation de transport supplémentaire est à résoudre, et dans une moindre mesure deux taux de réaction à calculer. La résolution de structure de flamme, devenue plus complexe par l'introduction d'espèces intermédiaires, peut nécessiter une résolution spatiale supérieure afin de capturer des gradients d'espèces raides. Il est bien évident que l'utilisation de réactions globales qui n'ont pour certaines aucune existence réelle n'est adaptée que dans le voisinage d'un point de fonctionnement choisi.

Méthodes alternatives

Il existe néanmoins d'autres méthodes permettant de calculer les termes sources sur les espèces et l'énergie. Il s'agit, entre autres, de toute une gamme de méthodes qui ne résolvent pas explicitement le transport des espèces ni de l'énergie. 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 diffusion² et une variable d'avancement c pour les flammes prémélangées. Les modèles qui veulent prendre en compte la combustion partiellement prémélangée utilisent les deux. Les bibliothèques $Y_k(z, c)$, $\dot{\omega}_k(z, c)$ et $T(z, c)$ sont construites le plus souvent sur des structures de flamme laminaire (diffusion ou prémélange). Le principal avantage de ces méthodes réside dans la précision dont les bibliothèques de flammelettes peuvent bénéficier si elles sont construites à partir de cinétiques complexes. Elles recourent alors à des procédures de réduction de dimensionnalité de la bijection de type ILDM (Intrinsic Low Dimensional Manifold) [72][152][108].

Cette technique est basée sur l'analyse des temps caractéristiques chimiques. Un anneau (une hypersurface) de faible dimension peut être obtenue, généralement pour des conditions opératoires données (ϕ , P , T), en calculant les vecteurs et valeurs propres du système chimique. Après avoir calculé l'anneau, on peut le paramétrer à l'aide d'un nombre restreint de coordonnées, i.e. opérer une pro-

²paramétré par le taux de dissipation scalaire ξ suivant les hypothèses simplificatrices

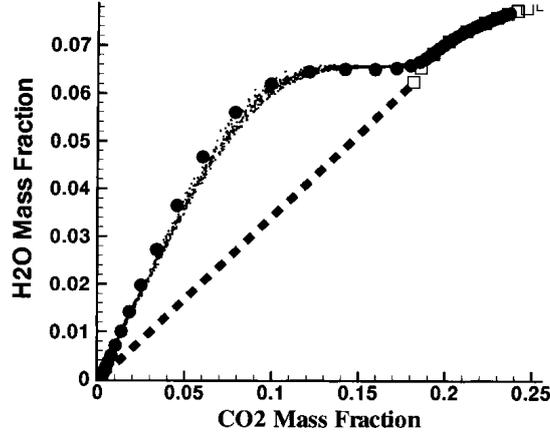


FIG. 3.1 – Projection d’une flamme prémélangée turbulente (DNS) CO/H_2 /air en chimie complexe dans le sous-espace (Y_{CO_2}, Y_{H_2O}) . \square : état d’équilibre, \bullet : Trajectoire Flamme laminaire 1D dans les mêmes conditions, \blacksquare : approximation linéaire de la zone froide. Source : [38]

jection dans un sous-espace de dimension inférieure. Les coordonnées du sous-espace sont en général à choisir arbitrairement parmi les fractions massiques de produits de combustion (Fig. 3.1). Ce nombre peut être encore réduit mais pose des restrictions au niveau de la validité de l’approche. La procédure est très précise pour les zones chaudes de la flamme ou proches de l’équilibre. Par contre la zone de préchauffage est souvent mal modélisée car elle nécessite une dimensionnalité assez importante pour être décrite correctement. Les temps caractéristiques courts associés à cette zone sont par définition négligés dans l’approche ILDM. Cette zone est donc souvent approximée linéairement dans l’espace des phases (Fig. 3.1), induisant par exemple une mauvaise estimation de la vitesse de flamme. L’approche FPI (Flame Prolongation of Ildm) [38] propose une modification de l’ILDM afin de pallier ces défauts. FPI conserve l’anneau monodimensionnel ILDM décrivant l’état d’équilibre associé à un mélange donné, puis le complète par un anneau bidimensionnel correspondant à la trajectoire d’une flamme de prémélange stationnaire dans l’espace des phases. Dans FPI, les entrées de la table sont donc réduites à deux variables i.e. z ou/et c , s’apparente donc à un ILDM de dimension deux. La table FPI est construite à l’aide de calcul de flamme laminaire 1D prémélangée. L’approche n’est donc pleinement valide que pour les régimes de combustion prémélangée ou partiellement prémélangée. C’est d’ailleurs cette hypothèse sur la structure de flamme qui permet une telle réduction de dimensionnalité. FPI suppose que toute structure de flamme de prémélange peut être cartographiée dans le sous espace (z, c) .

Si l’on s’attache à noter les défauts inhérents à ces méthodes, on peut noter en premier lieu, que l’implémentation des accès aux tables peut nécessiter des techniques logicielles spéciales afin de limiter l’impact des requêtes en termes de

performance. Des outils de prétraitement sont nécessaires afin de générer la table. Alternativement, la table peut être construite au fur et à mesure du calcul. Le gain provient alors de la réutilisation des informations stockées lors des requêtes précédentes [109]. Mais leur limitation principale tient dans les hypothèses posées pour définir z en particulier, puisque cela devient impossible dès lors que le carburant et oxydant sont injectés par plus de deux entrées, à des températures différentes, ce qui est très limitant pour des configurations industrielles que nous avons à traiter. En particulier, le fait d'utiliser des lois du type $Y_k(z, c)$ fait qu'en pratique, l'ensemble des espèces chimiques ne dépend plus que de deux paramètres, z et c . Il est clair que la validité de telle méthodes reste limitée à des cas où la topologie de la flamme est connue et correspond aux hypothèses de construction des lois $Y_k(z, c)$. Traiter dans le même calcul, un allumage, une propagation, ou une extinction, peut alors devenir délicat. Enfin, la résolution du transport de z et c ne dispense pas des problèmes numériques de propagation de front raides sur maillages lâches, ni du traitement de la raideur des termes sources de combustion.

Le choix fait dans AVBP de calculer de manière explicite les taux de réactions et le taux de dégagement de chaleur avec des lois d'Arrhenius, est motivé par la volonté de conserver une certaine simplicité, mais plus encore un maximum d'universalité, afin de pouvoir traiter des applications les plus complexes. Cette capacité à pouvoir traiter simultanément des phénomènes tels que l'allumage, extinction globale ou locale ou encore l'interaction flamme paroi a un certain coût qu'il faut savoir payer. Dans la pratique, un bon compromis limitera notre choix à des schémas de 1 à 2 étapes, voir 3 à 4 pour des cas spécifiques avec peu de restrictions.

3.1.2 La nécessité d'ajuster la cinétique chimique

Les limitations intrinsèques des cinétiques réduites

L'utilisation de cinétiques à une étape a longtemps été dans AVBP l'unique modèle utilisé. Premièrement pour des raisons de coût de calcul, et deuxièmement par l'absence d'outil apte à construire des schémas à 2 voir 3 étapes. La principale limitation des schémas mono étape est la surestimation de la température adiabatique de combustion T_{ad} lorsque l'on s'approche de la stoechiométrie et au-delà, à la fois de T_{ad} et de la vitesse de flamme (Fig. 3.24). L'absence de prise en compte des réactions de dissociation à haute température en est la principale cause. La possibilité qu'offre une deuxième réaction de prendre en compte une dissociation a été testée positivement. On peut noter aussi que la vitesse laminaire de flamme n'est prédite correctement que sur une plage de richesses pauvres (Fig. 3.22). L'adoption, par exemple de cinétique à deux étapes, ne balaye pas tous ces défauts, mais permet d'améliorer sensiblement les performances des schémas (Fig. 3.24) en particulier pour la combustion partiellement prémélangée pauvre,

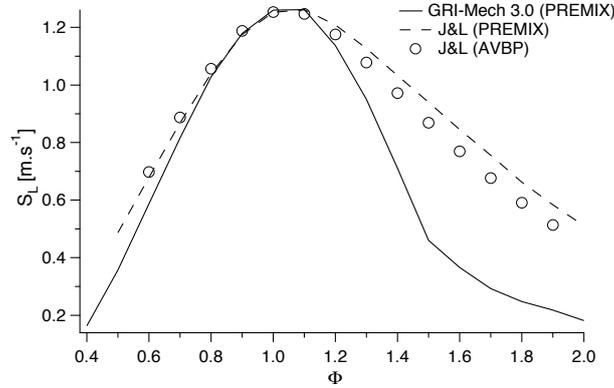


FIG. 3.2 – Comparaison des vitesses de flamme obtenues avec le schéma 4 étapes de Jones & Lindstedt et GRI-Mech 3.0. $P = 2bar$, $T = 650K$. Source : [143].

où la variation de richesse due au mélange imparfait doit être prise en compte. On échoue toujours à voir la courbe $S_L(\phi)$ décroître sur la portion riche. À notre connaissance, les seuls schémas réduits, mettant en oeuvre plus de deux étapes, et qui reproduisent correctement $S_L(\phi)$ tant pour les mélanges pauvres que riches est la série de schémas quatre étapes destinée aux alcanes légers de Jones et Lindstedt (J&L) [52] et par Peters *et al.* pour le méthane [99]. La série de schémas de J&L met intelligemment en oeuvre deux réactions pour l'oxydation partielle de l'alcane. Chacune de ces deux réactions ayant un poids prépondérant dans l'une des branches, soit pauvre soit riche. Ces schémas sont produits à l'aide d'une méthode de réduction systématique très poussée. Ces méthodes ne sont pas triviales et nécessitent un savoir faire évident en cinétique chimique. Le grand atout de ces schémas alcanes est de reproduire la courbe en cloche $S_L(\phi)$ des cinétiques complexes. La bonne précision obtenue (avec le jeu de paramètres issus de la réduction) pour des mélanges proches de la stœchiométrie se dégrade assez vite à mesure que l'on s'éloigne de ces conditions (Fig. 3.2) (voir aussi [1]), à tel point que nos schémas une étape obtiennent de meilleurs résultats sur les flammes très pauvres (Fig. 3.24).

Conditions de validité

Nous allons nous contenter de rester dans le cadre des flammes prémélangées ou partiellement prémélangées pauvres, quasi-isobares. Ces conditions correspondent à notre but premier, être capable de fournir au modèle TFLES une flamme de prémélange valide sur une plage de confiance donnée. On entend par valide, d'obtenir épaisseur et vitesse des flammes laminares en accord avec l'expérience ou de mécanismes réactionnels complexes. La plage de confiance comprend l'ensemble des conditions thermochimiques des gaz frais pour lesquelles on estime correct, l'accord entre les caractéristiques du MFL et celles du mécanisme

de référence. L'ensemble de ces conditions occupe un volume connexe de l'espace (P, T, Y_k^0) . L'ensemble de la méthode reste limitée à des cas où l'on dispose d'un schéma cinétique complet ou de mesures fiables. Dans le cas contraire, on se heurte à un problème différent que seules les études cinétiques peuvent résoudre. La paramétrisation du MFL est indispensable pour le rendre valide aux conditions du calcul souhaité. Cette paramétrisation est une procédure assez rébarbative, et consommatrice de temps humain si elle est résolue par une méthode de type essai-erreur. Nous allons donc proposer la mise en oeuvre d'une procédure algorithmique d'ajustement des coefficients du MFL.

3.1.3 Les mécanismes cinétiques complexes

Les schémas réactionnels complexes modernes exploitent la structure hiérarchique des réactions, composé de chaînes réactionnelles universelles. Les mécanismes des chaînes réactionnelles CO , H_2 et oxydation C_1 - C_2 étant maintenant bien connus, cela permet d'accéder au mécanisme réactionnel d'hydrocarbure plus lourd. En effet, il suffit alors de déterminer le processus de décomposition de l'hydrocarbure jusqu'au composé organique de base dont les chaînes sont connues. Les schémas réactionnels complexes comme pour le GRI-mech de Berkeley [134], la cinétique méthane de l'université de Leeds [49] ou le schéma propane de Peters[99] qui nous serviront de références, ont nécessité aussi une procédure d'optimisation pour plusieurs raisons :

- Ils peuvent être eux-mêmes issus de schémas plus complets, et sont partiellement réduits.
- Les mécanismes cinétiques sont sujets de recherche et régulièrement amendés de nouvelles chaînes réactionnelles.
- Les constantes de réactions élémentaires sont souvent difficiles à déterminer tant de façon théorique qu'expérimentale.

Ces schémas réactionnels voient leurs constantes comme l'énergie d'activation, préexponentielle, voire efficacité d'un troisième corps, ajustées afin de coller au plus près de résultats expérimentaux. Ceux-ci se voient évalués dans des configurations de flammes de prémélangées, de diffusion ou de réacteurs parfaitement ou partiellement prémélangés. Des grandeurs telles que vitesses de flamme, composition de gaz brûlés en polluants, structure de flamme, et temps d'auto-allumage sont des exemples de cibles. La détermination de ces constantes est souvent sujette à controverse dans la communauté de la cinétique chimique [53].

D'un point de vue purement "utilisateur" de ces mécanismes, il est parfois difficile de trancher quant au choix d'un schéma lorsque deux schémas pourtant différents [134][49], donnent une précision comparable. Pour notre part, l'utilisation de ces mécanismes se réduira au calcul 1D de flammes laminaires de prémélange. En premier lieu, parce que le coût de calcul de configurations plus complexes (bien que restant élémentaires) est trop important, et la précision cinétique bien au-delà de ce qui est requis dans nos simulations.

3.2 Automatisation de la procédure d'ajustement

Nous avons indiqué en 3.1.2 la nécessité d'ajuster les paramètres et la définition même des schémas cinétiques réduits utilisés habituellement dans nos simulations. Cette procédure d'ajustement peut être longue, fastidieuse et hasardeuse si elle est opérée de façon manuelle avec une méthode essai-erreur. Pour cela un code permettant d'effectuer cette procédure de façon automatique a été mis au point. Ce code est nommé EPORCK pour *Evolutionary Procedure for the Optimisation of Reduced Chemical Kinetics*. On peut d'ores et déjà citer les approches similaires de Polike *et al.*[106] et Harris *et al.*[44].

3.2.1 Définition du problème

L'objectif est de définir le cadre permettant d'ajuster les paramètres du schéma cinétique automatiquement. Le schéma cinétique est caractérisé par les réactions qui le composent, et par le jeu de paramètres qui permet de définir les taux d'avancement de chaque réaction (Eq. 2.50). Nous ferons les hypothèses suivantes :

- Le nombre de réactants est de deux (oxydant / réducteur), le nombre de produits quelconque
- Les réactions peuvent être réversibles.
- Une espèce réactante ne peut être un produit dans la même réaction.
- Les exposants des concentrations dans l'expression du taux d'avancement peuvent être fixés arbitrairement.

TAB. 3.1 – Modèle de réaction simplifié

$\mathcal{R}_j : \nu'_1 \mathcal{M}_1 + \nu'_2 \mathcal{M}_2 \rightleftharpoons \nu''_3 \mathcal{M}_3 [+ \nu''_4 \mathcal{M}_4 \dots]$			
	ν'_k	ν''_k	$\nu_k = \nu''_k - \nu'_k$
Réactants			
\mathcal{M}_1	ν'_1	0	$-\nu'_1$
\mathcal{M}_2	ν'_2	0	$-\nu'_2$
Produits			
\mathcal{M}_3	0	ν''_3	ν''_3
$[\mathcal{M}_4]$	0	ν''_4	ν''_4

Sous ces hypothèses, nous pouvons déduire alors l'ensemble des paramètres ajustables (Tab. 3.2). L'utilisation d'exposants arbitraires F_{kf} pour la réaction directe (\longrightarrow) dans une réaction d'équilibre, détermine directement les valeurs des exposants R_{kj} de la réaction inverse par la relation Eq. 2.52 définie dans 2.1.7.

TAB. 3.2 – Paramétrisation et degrés de liberté des schémas cinétiques ; \circ : paramètre libre ; \bullet : paramètre lié

$R_j : \nu'_{1j}\mathcal{M}_{1j} + \nu'_{2j}\mathcal{M}_{2j} \rightleftharpoons \nu''_{3j}\mathcal{M}_{3j} [+ \nu''_{4j}\mathcal{M}_{4j} + \dots + \nu''_{N_pj}\mathcal{M}_{N_pj}]$		
Paramètre	libre/lié	valeur
A_j	\circ	$P_{1+(j-1)*N_p}$
β_j	\circ	$P_{2+(j-1)*N_p}$
E_{aj}	\circ	$P_{3+(j-1)*N_p}$
F_{1j}	\circ	$P_{4+(j-1)*N_p}$
F_{2j}	\circ	$P_{5+(j-1)*N_p}$
F_{3j}	fixé	0
F_{4j}	fixé	0
\vdots	\vdots	\vdots
F_{N_pj}	fixé	0
R_{1j}	\bullet	$F_{1j} - \nu_{1j}$
R_{2j}	\bullet	$F_{2j} - \nu_{2j}$
R_{3j}	\circ	$P_{6+(j-1)*N_p}$
R_{4j}	\circ	$P_{7+(j-1)*N_p}$
\vdots	\vdots	\vdots
R_{N_pj}	\circ	$P_{N_p+(j-1)*N_p}$

En utilisant la paramétrisation décrite dans Tab. 3.2 pour chaque réaction, on peut définir entièrement le schéma cinétique réduit. Si on note \mathbf{P}_j le vecteur de taille N_p contenant le jeu de paramètres indépendants définissant la réaction \mathcal{R}_j , on forme alors le vecteur paramétrant le schéma comme la concaténation des \mathbf{P}_j :

$$\mathbf{P} = [\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \dots, \mathbf{P}_j, \dots, \mathbf{P}_M] \quad (3.1)$$

Il nous reste alors à évaluer le schéma ainsi défini pour pouvoir évaluer ses performances . Il faut pour cela définir un critère caractérisant l'adéquation du schéma aux attentes. Ce que l'on attend du schéma réduit est que ses caractéristiques $\mathbf{C}(\mathbf{P})$, évaluées par un calcul de flamme laminaire stationnaire, soient le plus proche possible des valeurs de référence \mathbf{C}^{ref} . Les grandeurs de référence \mathbf{C}^{ref} sont déterminées sur la même configuration, mais à l'aide d'une cinétique complexe validée ([134][49][99]). On peut alors proposer comme critère de sélection, une norme de l'erreur $\mathbf{J}(\mathbf{C}, \mathbf{C}^{ref})$ ($\mathbf{J} : \mathbb{R}^{N_p * M} \mapsto \mathbb{R}^{N_c}$) entre les réponses C_k et les réponses de référence C_k^{ref} . La solution au problème *trouver \mathbf{P} tel que le schéma réduit ait les caractéristiques \mathbf{C} voulues (i.e aussi proches que possible de \mathbf{C}^{ref})* se réduit à trouver le minimum de la fonctionnelle J ($J : \mathbb{R}^{N_c} \mapsto \mathbb{R}$) définie par :

$$J(\mathbf{P}) = \|\mathbf{J}(\mathbf{P})\|_* \quad (3.2)$$

où la norme $\|\cdot\|_*$ comme la fonction erreur (J) sont à définir.

3.2.2 Définition de la fonctionnelle J

En s'inspirant des travaux de Polifke *et al.* [106], nous définissons l'erreur E comme la dispersion de la réponse \mathbf{C} par rapport à la consigne \mathbf{C}_{ref} sur une échelle logarithmique :

$$E = \left| \ln \left| \frac{C_k}{C_k^{ref}} \right| \right| \quad (3.3)$$

On souhaite néanmoins pouvoir mesurer cette même erreur sur plusieurs points de fonctionnement du schéma. Typiquement, on cherchera à l'évaluer sur des flammes laminares à plusieurs richesses. On se réserve aussi la possibilité de pondérer arbitrairement l'influence de chaque point de fonctionnement à l'aide de poids \mathbf{W}^ϕ :

$$J_k = \sum_{i=1}^{N_\phi} W_i^\phi \left| \ln \left| \frac{C_k}{C_k^{ref}} \right| \right| \quad (3.4)$$

Notre optimisation est multi-objectifs puisque l'on souhaite faire correspondre \mathbf{C} avec \mathbf{C}_{ref} . Une technique commune pour réduire notre problème au cas mono-objectif est de construire J comme une combinaison linéaire des composantes du vecteur objectif \mathbf{J} , on obtient la fonctionnelle scalaire J :

$$J = \sum_{k=1}^{N_c} W_k^c J_k \quad (3.5)$$

De la même façon que pour la définition de \mathbf{J} on pondère l'influence des composantes de \mathbf{J} dans J via le vecteur de poids \mathbf{W}^c . On se reportera à 3.3.6 pour plus de détails à propos de l'optimisation multi-objectifs.

3.2.3 Choix du minimiseur

Comme nous venons de le voir, notre problème d'optimisation des paramètres se réduit à un problème de minimisation de fonctionnelle. Il est dès lors utile de choisir une technique de minimisation adaptée à notre problème. Le premier choix qui s'impose est de déterminer parmi les familles de minimiseurs, laquelle est la plus adaptée à notre problème. Une liste non exhaustive des méthodes disponibles donne :

TAB. 3.3 – Capacités intrinsèques des méthodes d’optimisation.

Type de Méthode	Capacité d’exploitation des meilleures solutions	Capacité d’exploration
Méthodes de descente	Excellente	Convergence locale
Méthodes Stochastiques Pures	Aucune	Excellente
Méthodes Génétiques	Bonne	Bonne

- Méthodes directes de descente de type gradient ou simplex [88] (**MDD**).
- Méthodes stochastiques pures. [154][78]
- Méthodes de type algorithme génétique[41](**MAG**).

Les MDD cherchent à évaluer la direction de la plus forte pente que J offre localement. Les MDD sont particulièrement efficaces pour déterminer un minimum local. La détermination d’un minimum global nécessite d’hybrider la MDD avec une méthode exploratrice afin d’opérer des descentes multiples (Fig. 3.3). On initialise plusieurs descentes à partir de points choisis dans l’espace de recherche. Ces points de départ peuvent être choisis aléatoirement, régulièrement ou par des techniques de criblage optimal. On espère ainsi que statistiquement le minimum trouvé sera global dans l’espace de recherche considéré. Les MDD de type gradient, tentent d’exploiter de façon optimale l’information contenue dans la jacobienne de J pour déterminer les directions menant au minimum local. Les MDD de type gradient doivent en outre, pour garantir leur performance, s’assurer d’une estimation précise de la jacobienne de la fonctionnelle J . De plus l’inversion de la jacobienne est un problème en soi. Le mauvais conditionnement chronique des problèmes de grande taille doit être traité de façon adéquat pour se prémunir de difficultés numériques sérieuses. Les méthodes simplex [88], plus rustiques, opèrent en triangulant, tel un maillage tétraédrique³, l’espace de recherche dans la direction de plus forte pente, mais sans requérir explicitement l’évaluation de gradients. Ces méthodes, simples à implémenter, s’essouffent très vite à mesure que la taille du problème augmente. On peut aussi noter que les MDD sont conçues pour minimiser des fonctionnelles dont certaines propriétés mathématiques sont présumées, comme la continuité et/ou dérivabilité. Ceci peut fortement réduire leur champ d’application. Leur propension à privilégier la recherche d’un optimal par rapport à l’exploration de l’espace de recherche réduit à néant leur propension à traiter des problèmes où la fonctionnelle est soit bruitée, discontinue, chaotique, a fortiori les trois à la fois. On peut donc douter de leur efficacité dans notre cas où J est susceptible de prendre des formes complexes et des dimensionnalités moyennement élevées ($o(10)$). Dans notre cas, la connexité

³l’élément simplex est un segment en 1D, un triangle en 2D, un tétraèdre en 3D etc.

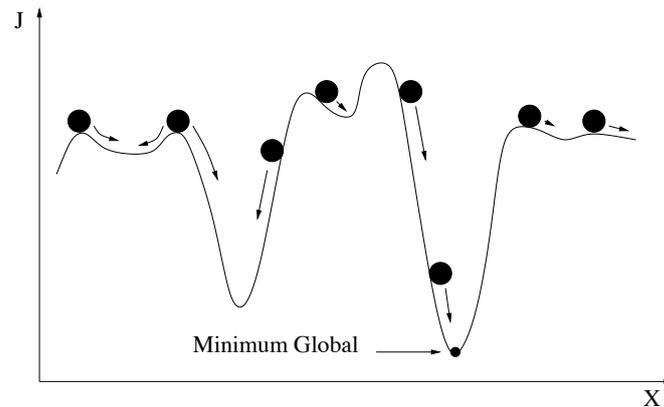


FIG. 3.3 – Technique de descentes multiples

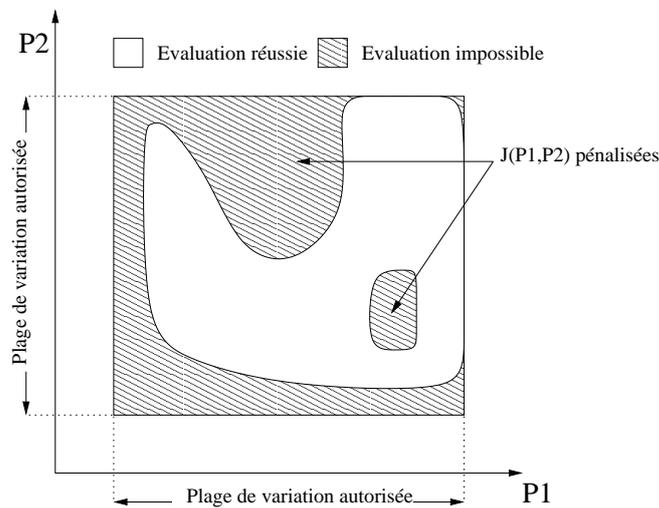


FIG. 3.4 – Méthode de pénalité appliquée aux solutions non réalisables-espace de paramètres

de J n'est pas du tout assurée. En effet, on ne peut garantir notre capacité à évaluer J en tout point du domaine, car la convergence du code d'évaluation n'est jamais assurée. Dans le cas de l'utilisation d'un AG, ce problème est facilement traité en appliquant une pénalité, aux solutions non convergées (Fig. 3.4).

Afin de pouvoir minimiser J , le choix d'un minimiseur de type génétique s'est imposé pour les raisons suivantes. Les MAG sont particulièrement robustes face à des fonctionnelles bruitées et trouées⁴. On est très vite séduit par la relative facilité de mise en oeuvre. Leur utilisation ne nécessite que la capacité à évaluer la fonctionnelle. Leur principal défaut face aux MDD provient du grand nombre d'évaluations de J nécessaires même pour des fonctionnelles simples. Dans les cas,

⁴i.e. évaluation impossible

où le coup de calcul d'une évaluation n'est pas un problème en soi l'utilisation des MAG prend tout son intérêt. Leur tendance naturelle à équilibrer la part de recherche exploratoire du domaine et la part de recherche de l'optimal localisé, en fait des outils puissants pour traiter la minimisation de fonctionnelles aux propriétés mathématiques et formes, mal, voire inconnues. En ce sens on parle de robustesse des MAG. Un exemple réel de fonctionnelle à minimiser est présenté à la Fig. 3.5. Pour cet exemple on a limité volontairement le nombre de paramètres à un, et l'on a grisé le domaine apparu comme réalisable. On peut faire plusieurs remarques :

- La fonction n'est pas définie sur l'ensemble du domaine du paramètre ([0.5; 1.2] ici).
- la fonction n'est pas connexe, elle possède des "trous", i.e. le calcul n'ayant pu converger l'évaluation est impossible. (Fig. 3.5b)
- La fonction est bruitée et possède de nombreux minima locaux.

Il faut prendre en compte que la représentation de la fonction à la Fig. 3.5 n'est que partielle car elle est construite à l'aide de l'historique des évaluations lors d'une minimisation. L'approximation est clairement visible pour $p > 1.1$ car l'AG ne s'est pas attardé dans l'exploration de cette zone à fort coût J . Par contre on discerne très bien (Fig. 3.5a) la vallée en forme de V qui mène au minimum. Celle-ci est néanmoins régulièrement coupée par des pics de fort coût. Ceci provient de problème de convergence du programme évaluateur qui même pour des individus proches peut avoir plusieurs niveaux de convergence (Fig. 3.5c). Les événements du type non-convergence ou convergence partielle, sont dus soit à une non-faisabilité physique, soit numérique, mais font partie intégrante du problème ou plutôt de sa réalité pratique : Quelle méthode est à même de minimiser des fonctions du type rencontré en Fig. 3.5 ? Nous allons montrer qu'un AG, grâce à sa robustesse, possède toutes les qualités requises.

Notre choix d'utiliser un AG comme optimiseur de paramètre a été précédé par des expériences similaires. On peut citer une revue de ces expériences d'El-liot *et al.*[32]. Les mêmes auteurs ont mis en oeuvre un AG pour optimiser les paramètres de systèmes de dimension assez importante[44]. Ils valident leur approche sur la capacité de leur outil à retrouver les coefficients d'un schéma de combustion hydrogène à 19 étapes, soit 57 paramètres à optimiser. Les objectifs à atteindre sont obtenus à partir de calcul sur un modèle de réacteur parfaitement prémélangé (PSR [40]). L'AG doit minimiser l'erreur relative quadratique entre les concentrations d'espèces en sortie de réacteur. Ils proposent ensuite d'étendre la procédure aux schémas pour hydrocarbures, et donc à des problèmes de dimensionnalité encore supérieure. On peut citer aussi la contribution particulièrement intéressante de Polifke *et al.*[106]. Ces travaux se rapprochent fortement de ceux présentés ici, car la procédure d'optimisation est dédiée aux schémas cinétiques de bas ordre (1 à 3 étapes). Leur approche se distingue principalement par le choix des objectifs, qui contrairement aux précédentes approches ne concerne pas des grandeurs globales telles que vitesse de flamme laminaire ou concentrations

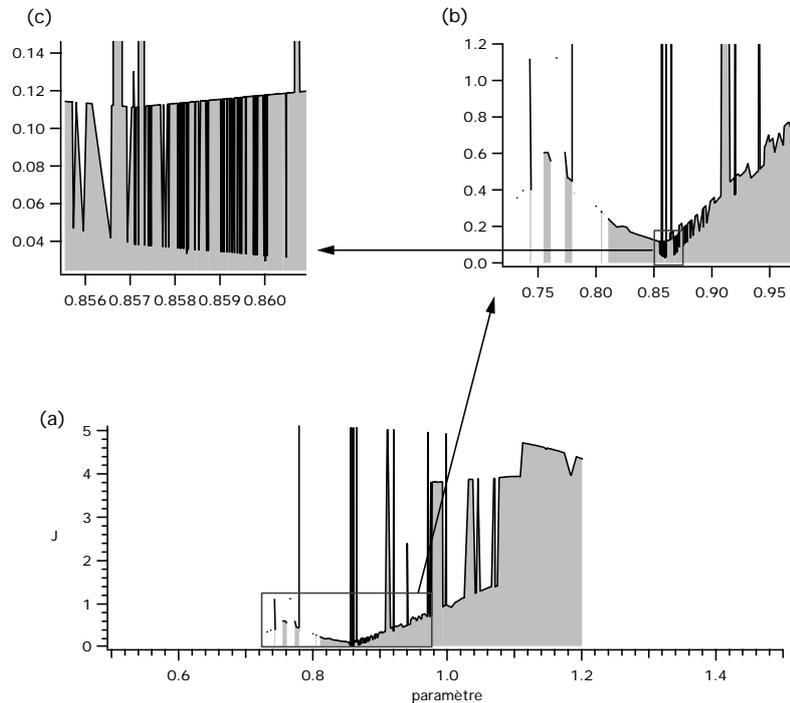


FIG. 3.5 – Exemple réel de Fonctionnelle J à minimiser.

d'espèces mais directement les profils de taux de dégagement de chaleur ($\dot{\omega}_T(T)$) et de production nette d'espèces ($\dot{\omega}(T)$) obtenus sur le modèle de flamme laminaire. Le choix des espèces à considérer est montré comme essentiel, et une procédure de sélection des taux de production (d'espèces) dit principaux ad hoc est proposée.

3.3 Revue des principes relatifs aux algorithmes génétiques

Du caractère non-déterministe intrinsèque des algorithmes génétiques ou évolutifs ainsi que du manque de preuve mathématique démontrant leur convergence, découle une méfiance de certains scientifiques face à ces méthodes. Une méfiance qui est souvent due à une méconnaissance de leur fonctionnement ainsi qu'à l'utilisation de l'adjectif *génétique*. On peut alors les définir comme des algorithmes stochastiques dont les méthodes de recherches modélisent des phénomènes naturels comme l'hérédité, la sélection naturelle, lutte pour la reproduction etc. Pour cela ils empruntent une bonne partie de leur vocabulaire à la génétique. Même si les idées principales qui fondent la classe des AG ne sont pas récentes, on attribue à Holland[46] (dès le début des années 1960) puis à De Jong [26] les premiers travaux numériques et théoriques de référence les concernant. Leurs

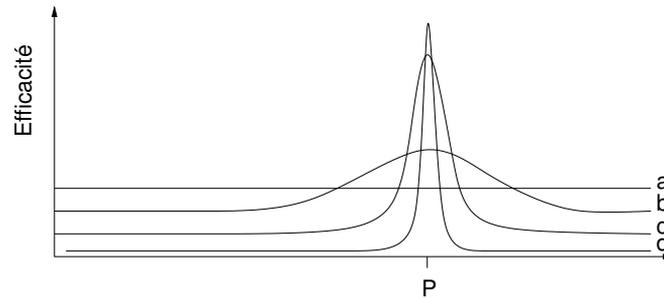


FIG. 3.6 – Efficacité des algorithmes en fonction de leur spectre d’application. a : AG standard, b : Algorithme évolutionnaire à large spectre, c : Algorithme évolutionnaire spécialisé, d : Algorithme Classique

travaux utilisaient une structure désormais classique, avec codage binaire des paramètres (3.3.3), mutation et croisement binaire (3.3.5), population fixe. Par la suite de nombreuses variantes furent dérivées de ces algorithmes, et certains auteurs tinrent à les distinguer. La communauté traitant des systèmes adaptatifs a pour habitude de nommer algorithmes génétiques, les algorithmes originaux de De Jong et Holland. Les méthodes utilisant plusieurs populations ou une population de taille variable, codage réel des paramètres ou qui utilisent des opérateurs évolués sont qualifiées d’algorithmes évolutionnaires. Cette distinction provient de la nécessité d’adapter le problème à l’AG alors que les algorithmes évolutionnaires se doivent de s’adapter au problème. Pour notre part nous ne ferons pas cette distinction sémantique, mais nous parlerons d’AG standard lorsque nous nous référerons aux algorithmes de De Jong et Holland. Les AG sont habituellement associés à la résolution de problèmes d’optimisation aussi variés que[41] :

- Problèmes combinatoires de type planification et classification.
- Problèmes de contrôle adaptatif.
- Théorie du jeu.
- Design optimal.
- Optimisation de paramètres.[80]

Leur principale qualité est leur forte robustesse offrant ainsi un large spectre de problèmes auxquels ils peuvent s’appliquer. Leur apparente universalité se paye par une efficacité parfois médiocre par rapport à des méthodes plus spécialisées mais au spectre plus restreint (Fig. 3.6). Dès lors que le coût d’évaluation d’un individu, i.e. d’une solution potentielle est relativement peu élevé, on peut penser à utiliser un AG pour un problème d’optimisation. Le nombre d’évaluations nécessaires varie avec la taille du problème, mais on peut l’estimer à quelques milliers pour un cas moyen avec une dizaine de paramètres à optimiser.

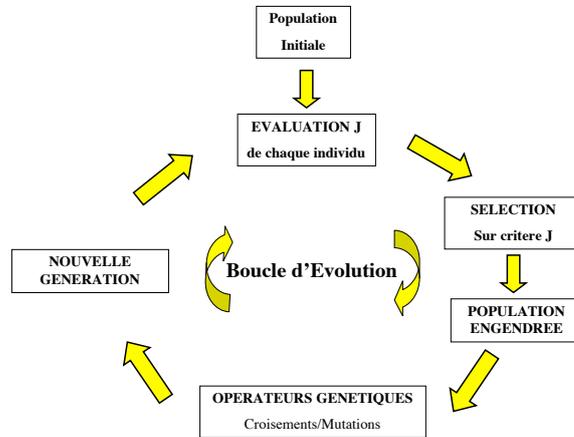


FIG. 3.7 – Schéma de principe de l'algorithme génétique standard.

3.3.1 Structure élémentaire d'un algorithme génétique

Il est considéré qu'un AG doit contenir les composants ou fonctionnalités suivantes :

- Représentation génétique des solutions potentielles au problème, i.e. la définition du codage chromosomique.
- Une manière de créer une population initiale de solutions potentielles.
- Une fonction d'évaluation qui joue le rôle d'environnement et permet de jauger les solutions potentielles entre elles.
- Un opérateur de sélection.
- Des opérateurs génétiques qui altèrent la composition des générations successives.

Le premier point portant sur la représentation est discuté en 3.3.3. Les schémas courants de sélection sont exposés en 3.3.4. La définition des opérateurs élémentaires de croisement et mutation binaire est disponible en 3.3.5, tandis qu'on pourra se référer à 3.4.5 pour les opérateurs utilisés dans cette étude.

3.3.2 L'Algorithme Génétique Standard (AGS)

Afin de mettre au clair les idées à propos des AG, nous décrivons l'AG standard de Holland [46] dont le schéma de principe est présenté par Fig. 3.7. On considère une population de N_{pop} individus dont les chromosomes binaires \mathbf{x}_i sont initialisés aléatoirement bit par bit. La première étape consiste à évaluer la population courante. L'étape suivante, nécessite un opérateur de sélection.

Sélection On utilise une sélection proportionnelle à la performance. C'est à dire une roulette dont la taille du secteur angulaire est fonction de la performance de l'individu (Fig. 3.8). La roulette est donc construite de la manière suivante :

- On calcule la performance moyenne de la population

$$F = \sum_{i=1}^{N_{pop}} Perf(\mathbf{x}_i)$$

- On calcule la probabilité de sélection p_i de chaque chromosome \mathbf{x}_i ($i = 1..N_{pop}$) :

$$p_i = Perf(\mathbf{x}_i)/F$$

- On calcule la probabilité cumulée q_i de chaque chromosome \mathbf{x}_i ($i = 1..N_{pop}$) (l'ordre de classement est quelconque) :

$$q_i = \sum_{j=1}^i p_j$$

On va lancer la roulette N_{pop} fois pour sélectionner à chaque fois un individu :

- r est généré aléatoirement dans l'intervalle réel $[0; 1]$.
- si $r < q_1$ on sélectionne \mathbf{x}_1 sinon on sélectionne le i -ème chromosome \mathbf{x}_i tel que : $q_{i-1} < r \leq q_i$.

De cette manière, on va bien évidemment sélectionner plusieurs fois les individus les plus performants en accord avec le théorème des schémas (3.3.3) : les individus, dont la performance est au-dessus de la moyenne, sont plus souvent répliqués dans la nouvelle population. On crée ainsi, une population intermédiaire de parents potentiels.

Croisement binaire On applique ensuite l'opérateur de recombinaison, le croisement binaire décrit en 3.3.5 à certains individus de la population sélectionnée précédemment. Pour cela, on va choisir aléatoirement $p_c \cdot N_{pop}$ individus. p_c est la probabilité de croisement et est un des paramètres clef du modèle. On apparie aléatoirement les individus choisis pour les croiser. Chaque paire de parents est remplacée par la paire engendrée dans la population.

Mutation binaire Enfin, l'opérateur de mutation binaire (3.3.5) est appliqué avec une probabilité p_m . On détermine le nombre total de bits à faire muter dans la population par $p_m \cdot N_{bit} \cdot N_{pop}$. Chaque bit a une probabilité égale de muter. Pour chaque bit de chaque chromosome, on détermine par un pile ou face si le bit doit muter, et ceci tant que le nombre total de bit à muter n'est pas atteint. Cette opération n'est pas biaisée à condition que l'ordre de classement des individus soit quelconque.

La nouvelle population est à nouveau évaluée pour boucler sur un nouveau cycle. Ce cycle est répété un nombre donné de fois ou bien arrêté sur un critère de convergence.

3.3.3 Représentation : Binaire ou flottante ?

Pour les problèmes de minimisation de fonctionnelle la représentation des individus ou solutions potentielles est assez directe. On va construire un chromosome dont les gènes coderont la valeur réelle de chaque paramètre. La longueur des gènes dépendra de la précision voulue. Si on considère un paramètre réel $x \in [x_{min}; x_{max}]$, le nombre de bits N_{bit} nécessaires à sa représentation est fonction de la précision δ_x requise :

$$\frac{x_{max} - x_{min}}{\delta_x} \leq 2^{N_{bit}} \quad (3.6)$$

La conversion du vecteur binaire ${}_2\mathbf{x}$ en une valeur réelle se décompose en deux étapes :

- Conversion de ${}_2\mathbf{x}$ en un entier en base 10 :

$${}_{10}x = \sum_{i=0}^{N_{bit}} {}_2x_i \cdot 2^i \quad (3.7)$$

- Remplacement dans l'intervalle :

$$x = x_{min} + {}_{10}x \cdot \frac{x_{max} - x_{min}}{2^{N_{bit}} - 1} \quad (3.8)$$

Plusieurs paramètres seront représentés par leur code binaire respectif et concaténés dans un vecteur d'état, i.e. un chromosome binaire.

Efficacité des AG en codage binaire

Les fondements théoriques des AG reposent principalement sur la représentation binaire des solutions, et de la notion de *schéma* [46][41]. Un schéma est la notation associée à un motif (binaire en l'occurrence). On utilise habituellement le symbole $*$ pour indiquer qu'un bit peut prendre n'importe quelle valeur. Un schéma représente donc l'ensemble des solutions dont chaque bit fixe du chromosome binaire correspond à ceux du schéma. Par exemple $(1*0*1)$ représente l'ensemble des solutions $\{(11011), (11001), (10001), (10011)\}$. À l'extrême $(*****)$ représente l'ensemble des solutions. Si un schéma présente l bits libre ($*$), il représente alors 2^l solutions. Le dénombrement des schémas présents dans une population est fonction de sa composition. On peut néanmoins borner un intervalle. Le nombre de schémas contenus dans un chromosome binaire est 2^l puisque chaque bit peut prendre sa valeur ou $*$. Pour une population N_{pop} on aura donc un maximum de

$N_{pop} \cdot 2^l$ schémas⁵. Néanmoins une estimation plus fine de cette borne supérieure peut être établie [41]. Cette estimation montre qu'avec une population N_{pop} on brasse N_{pop}^3 schémas, ce que Holland a nommé, le *parallélisme implicite* des AG.

Pour caractériser les schémas, on définit les propriétés suivantes :

- l'ordre $o(S)$ du schéma S par le nombre de bits fixes, e.g :
 $S = (001 **11*)$, $o(S) = 5$
- La longueur $\delta_2(S)$ du schéma S par le nombre de bits qui séparent le premier du dernier bit fixe, e.g :
 $S = (001 **11*)$, $\delta_2(S) = 7$

La performance d'un schéma est évaluée comme étant la moyenne des performances des solutions définies par le schéma. On peut montrer[41][81] pour le AG binaire standard[46] le théorème des schémas :

Les schémas courts, d'ordre bas et dont la performance⁶ est supérieure à la performance moyenne de la population courante, seront répliqués de manière exponentielle dans les générations suivantes. En corollaire, l'hypothèse suivante est souvent émise : les AG recherchent la performance à travers la juxtaposition (via les recombinaisons par croisements) de schémas courts, performants et d'ordre peu élevé appelés blocs de construction ou blocs élémentaires. On voit bien que si cette hypothèse est vérifiée, le problème du codage est crucial pour la performance de l'algorithme, et que ce codage doit satisfaire l'idée des blocs courts. Pour illustrer ce propos, on considère deux schémas performants $S_1 = (111****)$ $S_2 = (*****11)$. Supposons que leur combinaison $S_3 = (111**11)$ soit moins performante que $S_4 = (000**00)$. Si on pose que l'optimum est $S_0 = (1111111)$, alors l'AG aura des difficultés à converger vers S_0 puisqu'il va sélectionner prioritairement des solutions du type (00011100) . Ce phénomène est appelé *déceptivité*[41] et traduit l'inadéquation du codage au problème. Certains blocs prometteurs trompent l'AG et peuvent le mener à des solutions sub-optimales. Ce phénomène observé dans les expériences numériques, trouve son pendant dans la notion d'*epistatis* en génétique, où un gène est épistatique si sa présence supprime l'effet d'un autre gène. En d'autre terme, un problème est *déceptif* s'il existe une forte interaction entre les gènes codés. La conséquence en est souvent une convergence dite prématurée, i.e. vers un optimum local. La convergence prématurée est un problème commun aux méthodes d'optimisation en général. Dans le cas des AG, cela se traduit le plus souvent par une perte trop rapide de la diversité génétique⁷ de la population de solutions. Ceci peut avoir plusieurs origines :

- Problème déceptif.
- Une population trop faible en nombre.
- Une pression sélective trop forte.
- Taux de mutation trop bas.

⁵soit bien plus que de solutions potentielles

⁶moyenne des performances des solutions définies par le schéma

⁷On pourrait parler de consanguinité.

- L'apparition de "super individus", fortement supérieurs à la moyenne associé à une sélection proportionnelle.

Dans tous les cas on peut relier cette convergence prématurée à une mauvaise gestion de l'équilibre entre exploitation-exploration dans l'implémentation choisie.

La représentation binaire possède quelques inconvénients. En premier lieu, le codage du problème modifie profondément le problème lui-même et oblige l'AG à opérer dans un espace différent de celui du problème d'origine et peut ainsi en modifier les propriétés fondamentales. En second lieu, pour un nombre de bits de codage donné, la précision sera fonction du volume de l'espace des paramètres. Autrement dit, tout changement de la valeur des bornes d'un paramètre modifie la précision avec laquelle l'optimal sera déterminé. Une haute précision associée à de nombreux paramètres induit des chromosomes binaires de grandes tailles, pour lesquels la convergence peut être assez lente. À l'opposé, la représentation réelle des paramètres se veut conceptuellement plus proche du problème. Avec le codage binaire, chaque position de bit correspond à un gène dont l'allèle peut être 0 ou 1. Avec la représentation réelle, il n'y a pas à proprement parler de codage puisque chaque paramètre prend sa valeur réelle. Elle permet aussi le développement d'opérateurs génétiques dynamiques. Ces opérateurs permettent entre autres de traiter l'éventuelle déceptivité en maintenant une diversité optimale. De l'aveu même de Goldberg[41] :

L'utilisation du codage réel est controversée dans l'histoire de la génétique artificielle, et des schémas de recherche évolutionnaires. Leur utilisation croissante est toutefois surprenante pour les chercheurs familiers avec la théorie fondamentale des AG, Une analyse simple semble montrer que la sélection des schémas par brassage est obtenue avec des alphabets de basse cardinalité⁸, et semble être en contradiction directe avec de nombreuses expériences, où l'utilisation du codage réel donne d'excellents résultats.

L'objectif principal derrière l'utilisation du codage réel et d'opérateurs sophistiqués est de faire évoluer les AG dans le même espace que les problèmes à traiter. Ceci mène à développer des opérateurs plus spécifiques en utilisant les caractéristiques de l'espace réel. Par exemple on peut noter la propriété que deux points proches dans l'espace de représentation (ou codage) sont proches dans l'espace du problème⁹ (vice-versa). On ne retrouve pas cette propriété dans le codage binaire standard. Changez un bit d'un gène binaire et vous modifiez totalement sa valeur. Il existe néanmoins des méthodes de codage binaire qui respectent cette propriété. On peut citer le codage messy [42] ou encore le codage Gray[150]. Sa propriété essentielle est de ne faire différer que d'un seul bit la représentation de deux paramètres dont les valeurs sont consécutives dans l'espace réel discrétisé.

⁸l'alphabet binaire a la plus basse cardinalité : 2

⁹car les représentations sont identiques

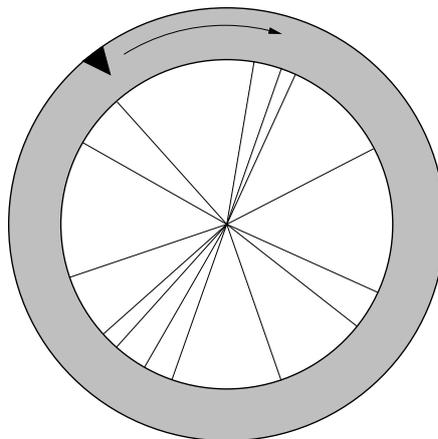


FIG. 3.8 – Sélection proportionnelle ou roulette pondérée. On attribue un angle de secteur à chaque individu proportionnellement à sa performance.

3.3.4 Mécanismes de sélection

La diversité des populations et la pression sélective sont assez fortement reliées. Une augmentation de la pression sélective diminue la diversité et vice-versa. En d'autres termes, une forte pression sélective participe à la convergence prématurée puisqu'elle tend à concentrer la recherche sur les seuls meilleurs individus d'une population encore jeune. A contrario, une pression sélective trop faible rend la recherche optimale inefficace. Il est donc important de gérer correctement les mécanismes de sélection, pour obtenir un équilibre entre sélection et diversité. Nous présentons ici une liste partielle des principaux opérateurs de sélection couramment utilisés.

L'opérateur de sélection proportionnelle utilisé pour l'AGS (3.3.2), aussi appelé *sélection stochastique avec remplacement*¹⁰, assigne une probabilité de sélection proportionnelle à la performance de l'individu. Un individu deux fois plus performant qu'un autre recevra statistiquement deux fois plus de copies dans la nouvelle population. Ce schéma est encore appelé sélection par roulette pondérée en analogie avec le jeu de casino (Fig. 3.8). Mais sélectionner les individus de cette manière pose deux problèmes inhérents. Si la population contient une solution particulièrement performante au regard du reste de la population, alors ce *super-individu* occupera la majeure partie de la surface de la roulette. Ce faisant il va être répliqué majoritairement et faire chuter fortement la diversité génétique et faire converger l'AG prématurément vers un optimal, a priori local. À l'opposé, si la population est trop uniforme, la roulette s'apparente alors à un tirage au sort aléatoire. L'effet de sélection escompté n'est alors pas réalisé. Ceci se produit lorsque les individus sont proches de l'optimum et que leurs performances sont donc voisines. La population a tendance à errer. Pour palier à ce désagrément,

¹⁰i.e. l'individu sélectionné est potentiellement rééligible

De Jong[26] applique une loi d'échelle à la fonction d'évaluation, afin d'augmenter (ou réduire en présence de super-individus) le contraste dans l'évaluation des individus. Une dernière caractéristique de cet opérateur est son taux d'erreur stochastique élevé. Dans certains cas (e.g. population faible en nombre) la différence entre le nombre prévu de répliques d'un individu et le résultat de la sélection est grande. On peut compenser cet effet en vérifiant au court du tirage que le nombre de répliques d'un individu ne dépasse pas (trop) la valeur probable. [26] On peut donner comme exemple, la *sélection entière déterministe avec sélection stochastique du reste*, qui est très populaire et a été implémentée dans de nombreux AG. Pour cet opérateur, on réplique de manière déterministe l'individu \mathbf{x}_i autant de fois N_i que prévu :

$$N_i = \lfloor p_i^s \cdot N_{pop} \rfloor \quad (3.9)$$

Puis une sélection stochastique proportionnelle à la partie fractionnaire du nombre de répliques prévues ($p_i^s \cdot N_{pop} - N_i$) est opérée.

L'opérateur de sélection par rang, s'apparente au schéma de sélection proportionnelle, mais il introduit une manière efficace de se passer de loi d'échelle car elle est implicitement intégrée dans la notion de rang [3]. La probabilité de sélection est proportionnelle au rang qu'occupe l'individu dans la population. On classe par exemple la population du moins bon (\mathbf{x}_1) élément au meilleur ($\mathbf{x}_{N_{pop}}$). La probabilité de sélection de l'individu de rang k est :

$$p_k^s = \frac{k}{N_{pop}} \quad (3.10)$$

On peut définir d'autre variante où la probabilité de sélection est une fonction non linéaire du rang qu'occupe l'individu dans la population. Ces fonctions permettent d'ajuster la pression sélective en fonction d'un paramètre.

Pour les opérateurs de type tournoi [42], il s'agit de choisir aléatoirement p individus et de déterminer ensuite le meilleur¹¹ dans ce p -tournoi. L'individu sorti gagnant du tournoi est copié dans la génération suivante. On réitère ensuite le tournoi N_{pop} fois. Suivant les variantes, les individus sélectionnés pour le tournoi courant sont remplacés immédiatement dans la population ou seulement après un certain nombre de tournois afin de limiter l'erreur stochastique de l'opérateur. On peut instinctivement saisir qu'en augmentant la taille q des tournois, on augmente aussi la pression sélective. Les tailles de tournoi se situent en général entre 2 et 10. De nombreuses implémentations mettent en oeuvre des tournois binaires ($q = 2$) [44]. La sélection par tournoi binaire est une approximation stochastique de la sélection par classement [42] et de ce fait offre l'avantage d'être invariante face à une translation ou loi d'échelle appliquées à la fonctionnelle. Dans les cas où cette approximation est soumise à une erreur trop importante, on utilise le remplacement

¹¹de façon déterministe ou probabiliste.

différé des individus choisis pour le tournoi. Ce faisant, on interdit aux individus ayant récemment tournoyé (et perdu) d'être temporairement sélectionnés.

L'opérateur de sélection de type tournoi-Boltzman, opère des tournois binaires où le gagnant est déterminé de façon probabiliste. La probabilité qu'un individu i gagne face à un individu j est donnée dans le cas d'une minimisation par :

$$p_{i>j} = 1/(1 + \exp(J_i - J_j/T)), \quad (3.11)$$

T est un paramètre analogue à la température dans la distribution de Boltzman. T suit une loi de décroissance (prédéterminée) au long du calcul. C'est pour cela que l'on apparente cet opérateur au principe du recuit simulé. Au début du calcul, la valeur élevée de T donne une probabilité presque égale aux deux individus d'être sélectionnés quelle que soit leur performance respective. À mesure du temps, T diminue et l'écart entre de probabilité entre deux individus est accentué. La pression sélective, très faible en début de calcul permet de conserver une diversité d'individus et permet une prospection efficace des solutions potentielles. Le renforcement de la pression sélective en fin de calcul a pour effet de stabiliser la population dans la meilleure zone jusque-là explorée.

D'une certaine manière, cet opérateur applique une loi d'échelle dynamique augmentant ainsi la pression sélective à mesure que les générations se suivent.

3.3.5 Opérateurs génétiques

Durant la phase d'altération des individus, on a recours à deux grands types d'opérateurs : mutation et croisement. Nous présentons ici la mutation et croisement binaire qui constituent les deux opérateurs de base. De nombreuses variantes de ces opérateurs existent pour le codage réel et sont décrites en 3.4.4. Comme on va le voir, les opérateurs binaires sont très simples à implémenter. Leur utilisation est due au codage binaire initialement et exclusivement utilisé pour les AG. L'opérateur de mutation binaire est très simple. Après avoir choisi aléatoirement un bit du chromosome, on change la valeur du bit. Dans l'exemple suivant, un chromosome \mathbf{x} de 16 bits, le cinquième bit doit muter :

$$\mathbf{x} = (1100110111110000) \xrightarrow{\text{mutation}} \mathbf{x}' = (1100010111110000)$$

L'opérateur de croisement binaire met en oeuvre deux chromosomes \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 pour engendrer deux produits \mathbf{x}'_1 et \mathbf{x}'_2 . Un bit est choisi aléatoirement et définit ainsi la position du croisement. Si on reprend notre exemple précédent avec des chromosomes de 16bit et un locus donné au cinquième bit, on a :

$$\left(\begin{array}{l} \mathbf{x}_1 = (11001|10111110000) \\ \mathbf{x}_2 = (10101|01010101010) \end{array} \right) \xrightarrow{\text{croisement}} \left(\begin{array}{l} \mathbf{x}'_1 = (11001|01010101010) \\ \mathbf{x}'_2 = (10101|10111110000) \end{array} \right)$$

3.3.6 Les AG et l'optimisation multi-objectifs

La plupart des processus de conception introduisent de multiples mesures de la performance ou objectifs pour le système. Le concepteur souhaite bien évidemment que chacun des objectifs soit optimum, mais ces objectifs mesurent différents aspects de la performance générale du système, et peuvent être en conflit. La conception d'un turboréacteur est par exemple soumise à des objectifs de minimisation tels que : devis de poids, consommation spécifique, bruit, pollution, coûts de développement, de production, de maintenance etc. Si on parvient à améliorer simultanément l'ensemble des objectifs, il est évident que le système est plus performant que précédemment. Il est néanmoins courant que les objectifs entrent en conflit et qu'il soit impossible d'améliorer un objectif sans en dégrader un ou plusieurs autres. L'idée que différents compromis entre objectifs permettent d'atteindre un optimal nous approche du concept de *pareto optimalité* développé à la section suivante. On décrira ensuite brièvement les approches multi-objectifs évolutionnaires (MOE). Il n'est pas aisé de présenter un panorama des méthodes MOE tant les types de méthodes employées sont divers. On reprendra la classification établie par Fonseca & Fleming [35] qui distingue les approches dites pareto et non-pareto.

- Approches Pareto (3.3.6) : La population est classée et sélectionnée en faisant un usage direct de la notion de pareto dominance décrite en 3.3.6. Leur objectif est de déterminer l'ensemble des solutions optimales au sens pareto. Avec cette approche, on recherche toutes les solutions possibles puis une décision est nécessaire pour sélectionner la solution retenue.
- Approches Non-Pareto :
 - Méthodes d'agrégation (3.3.6) : Les fonctions objectifs sont combinées dans une fonction objectif scalaire. On notera que cette approche n'est pas une approche MOE proprement dite puisque le minimiser peut être de type quelconque. Avec cette approche, on décide en premier lieu de l'objectif (en estimant les poids relatifs entre les objectifs) puis on opère la recherche de l'optimal sur ces bases.
 - Méthodes Génétiques non-pareto (3.3.6) : Ces méthodes utilisent plusieurs groupes de populations évoluant en coopération, chacune dédiée à optimiser un objectif.

Pareto Optimalité

Il convient de distinguer les solutions potentielles d'une optimisation multi-objectifs en deux classes : les solutions *dominées* et *non-dominées* ou *pareto optimales*. Une solution \mathbf{x} est dominée s'il existe une solution réalisable \mathbf{y} qui est meilleure dans toutes les directions. Pour une minimisation du coût J , on a :

$$J_i(\mathbf{x}) \geq J_i(\mathbf{y}) \quad \forall 1 \leq i \leq N_{pop} \quad \text{et} \quad \exists i \quad / \quad J_i(\mathbf{x}) > J_i(\mathbf{y}) \quad (3.12)$$

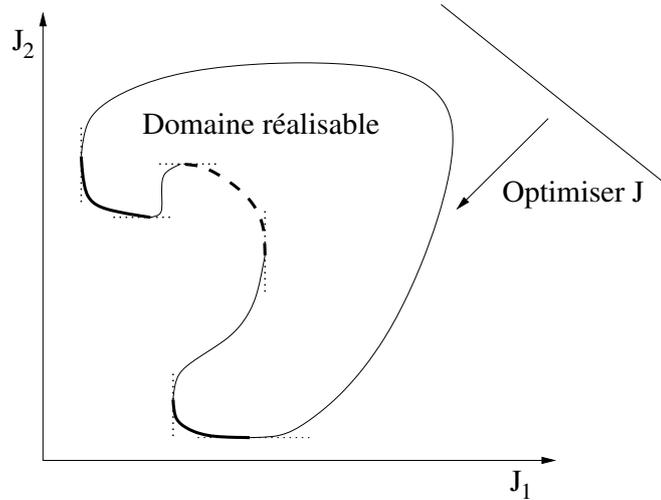


FIG. 3.9 – Illustration des solutions pareto optimales J à deux composantes avec. — : frontière pareto optimale convexe, - - - - frontière pareto optimale concave.

On appelle pareto optimale une solution qui n'est dominée par aucune autre. Cela signifie que toute amélioration d'une solution pareto optimale sur un ou plusieurs objectifs (mais pas tous) se traduit par une dégradation pour au moins un objectif (Fig. 3.9). Les solutions pareto optimales (**SPO**) sont toujours un meilleur compromis que toute autre solution dominée. La recherche de l'ensemble des SPO n'est pas un but en soi pour l'optimisation multi-objectifs, puisque, au final, il s'agit de choisir une solution de compromis acceptable. Dans ce choix interviennent des critères qui n'ont pas été intégrés dans la fonction coût parce que difficilement commensurables ou trop subjectifs. En ce sens, toutes les SPO ne constituent pas des compromis acceptables.

Approches Pareto

Le concept de pareto dominance est utilisé pour classer la population de sorte que tous les individus non-dominés se voient affectés un coût J identique. Ce classement sert pour établir ensuite la sélection. Ceci a une implication fondamentale dans la topologie du front pareto optimal (**FPO**). En effet, les approches pareto (**AP**) opèrent dans un espace des objectifs constamment renormés tels que le FPO soit défini comme l'hyperplan de coût J minimum. Comme on le voit, l'AP ne fournit pas une solution mais un ensemble de solutions équivalentes au sens pareto, qu'il conviendra au décideur de discriminer. Une implémentation courante[34] est d'assigner comme coût à un individu, le nombre d'individus par qui il est dominé. Ainsi tous les individus non dominés sont tous de rang 0, tandis que les individus dominés sont pénalisés en fonction de leur dominance relative. On peut toujours reconstruire le FPO dans l'espace des objectifs et contrôler sa topologie (jusqu'en 3D du moins). Si, avec une méthode d'agrégation, les iso- J

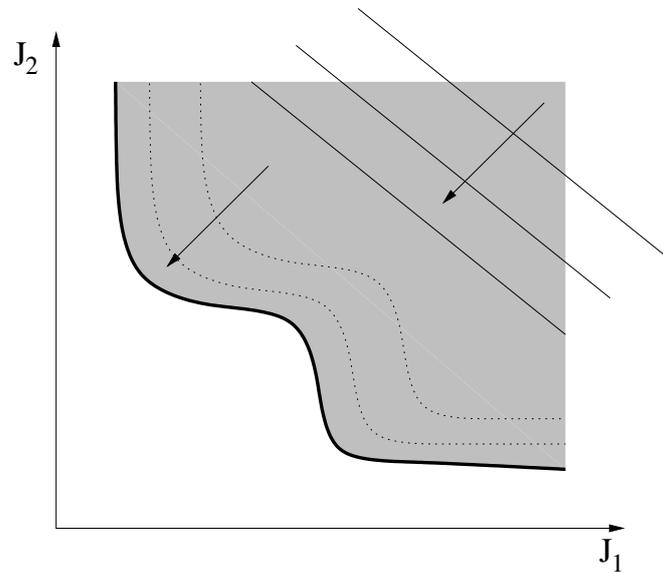


FIG. 3.10 – Illustration des approches par agrégation et pareto. **—** : frontière pareto optimale, hyper surfaces iso-j par approche pareto. — hyperplans iso-J par agrégation

sont des hyperplans, les AP ont par définition un front défini dynamiquement et dont la forme dépend de la population. Les individus faisant partie du FPO ont tous une performance équivalente. Par cette propriété intrinsèque, les AP sont insensibles, contrairement aux autres méthodes, à la topologie du FPO.

Méthodes génétiques Non-Pareto

La première application de cette approche est connue sous le nom de VEGA (Vector Evaluated Genetic Algorithm) [122], qui est la première tentative d'approche évolutionnaire explicitement dédiée à promouvoir la génération de solutions non-dominées. Les tests mis en oeuvre dans cette étude sont devenus des cas de référence pour tester les performances des modèles ultérieurs. Cet AG met en oeuvre autant de populations que d'objectifs. Chaque population, en charge d'un objectif, voit ses individus évalués sur ce seul objectif. La sélection des parents se base sur un schéma proportionnel (3.3.4). Les individus sont engendrés par mutations et croisements avec appariement aléatoire. Les individus non dominés sont marqués, mais cette information n'est pas utilisée par VEGA. Un phénomène de spéciation, c'est-à-dire l'apparition de plusieurs groupes de population privilégiant une partie de l'espace des objectifs est constatée sur les FPO concaves (Fig. 3.11). Ce phénomène est commun aussi aux méthodes d'agrégation, car le processus de sélection de VEGA équivaut à minimiser une combinaison linéaire d'objectifs, mais avec des poids variants de génération en génération. En effet, chaque objectif est pondéré par l'inverse de la performance moyenne (en termes

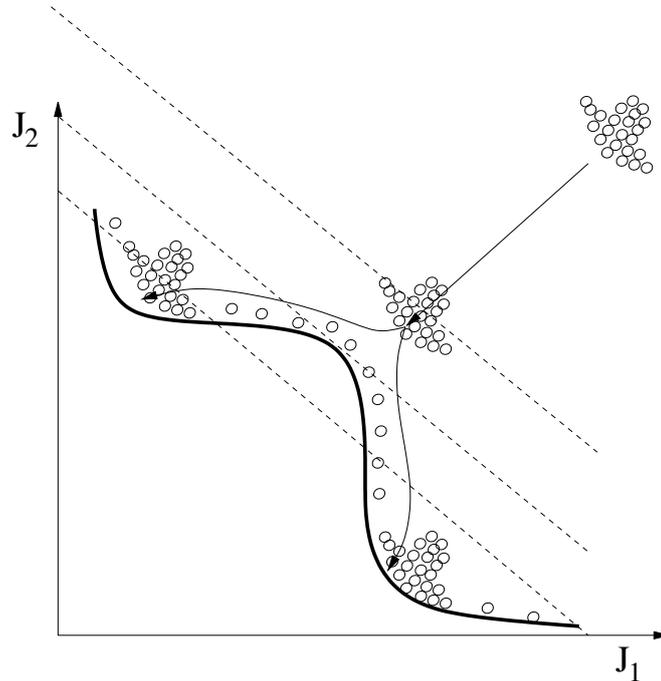


FIG. 3.11 – Illustration du phénomène de spéciation (symbolisée par le groupe de \circ) et de nichage (symbolisé par la distribution uniforme sur le FPO) d’une population **—** : frontière pareto optimal

de l’objectif considéré) de la sous-population. Si des améliorations sont observées pour certains objectifs, alors la sélection favoriserait les individus performants sur les autres objectifs. En opérant ainsi VEGA adapte la sélection de façon à conserver de la diversité, et éviter qu’un des objectifs faciles à atteindre n’entraîne la population globale dans une région limitée. Le phénomène de spéciation, étant préjudiciable à l’efficacité de l’algorithme, les améliorations visant à l’éliminer mènent à utiliser une sélection basée sur un classement par rang des individus. Le classement par rang sur chaque objectif des individus évite les problèmes d’échelle ou de normalisation associée aux méthodes d’agrégation.

Méthode d’agrégation

L’objectif des méthodes d’agrégation est de ”scalairiser” le vecteur objectif. Pour cela définir une application $A : \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $A : \mathbf{J} \mapsto J$. A peut être linéaire ou non. Dans le cas linéaire, la topologie (concave/convexe) du FPO est inchangée, quelle que soit la combinaison linéaire choisie. À l’inverse une application non linéaire peut modifier la topologie du FPO. Avec par exemple $A : \mathbf{J} \mapsto \sum_{i=1}^{N_c} J_i^\alpha$, on tend à transformer un FPO convexe en concave pour $0 < \alpha < 1$, et inversement pour $\alpha > 1$ [35]. S’il est relativement aisé de vérifier la topologie du FPO pour une optimisation bi ou tri objectifs a posteriori, cela

devient non trivial au-delà. En général on tend à vouloir rendre le FPO convexe :

Si on choisit A comme une combinaison linéaire de poids fixe, la méthode donnera un résultat différent en fonction de la topologie du FPO. Si le FPO est convexe (Fig. 3.12b), la solution optimale (A ou B) est fonction des coefficients de la combinaison A . Chaque jeu de coefficient donnera alors une solution du FPO. Par contre si, le FPO est concave (Fig. 3.12a), on obtiendra une solution marginale du FPO, soit A soit B. La solution retenue dans notre implémentation, est la technique classique où l'on réduit la dimensionnalité de la fonctionnelle J par une combinaison linéaire de ses composantes :

$$J = \sum_{i=1}^{N_c} W_i^c J_i \quad (3.13)$$

Le choix de cette méthode est principalement motivé par le fait qu'elle ne nécessite que l'utilisation d'un minimiseur mono-objectif. Sa principale caractéristique est de donner comme optimum une des solutions de la frontière pareto optimale (Fig. 3.9). Elle n'est pas particulièrement efficace pour déterminer l'ensemble des solutions pareto. Si l'on désire néanmoins déterminer le FPO avec cette approche, il faut pour cela effectuer plusieurs calculs en changeant la valeur des poids W^c . La valeur des poids ainsi que la forme de la frontière (concave/convexe) dirigera préférentiellement l'AG dans certaines régions déceptrité de la frontière (Fig. 3.12), ne permettant pas ainsi de déterminer la frontière pareto complètement. En faisant varier dynamiquement la pondération au cours du calcul, on peut néanmoins obtenir une bonne estimation du FPO [51]. En effet, on peut illustrer le principe en considérant la population comme un groupe de billes soumis à un champ de gravité perpendiculaire aux hyperplans iso- J , i.e. (donc de direction $-\nabla J$). Dans le cas d'un FPO purement concave (Fig. 3.12a), si $W_1^c > W_2^c$, la population convergera vers le point marginal B. Si on intervertit soudainement les poids W_1^c et W_2^c , la direction de la gravité change brutalement. La population va alors migrer de A vers B par le chemin le plus court et donc parcourir le FPO. Dans le cas purement convexe, la même opération peut conduire à une estimation biaisée du FPO. En effet, la migration de A vers B par le chemin le plus court, peut se faire sans parcourir le FPO. Néanmoins, en faisant varier graduellement les poids, la population va migrer vers des solutions intermédiaires du FPO entre A et B. On détermine une estimation du FPO en recherchant les solutions non dominées à chaque génération.

L'efficacité de la détermination du FPO se réduisant assez nettement avec l'augmentation du nombre d'objectifs, l'agrégation n'est que marginalement utilisée pour la détermination des solutions pareto. Son principal défaut en fait un avantage pour le décideur : la solution optimale étant unique, il n'a pas à choisir entre les solutions pareto optimales.

On a effectué une vérification de la topologie du FPO sur un cas réel. Nous avons effectué une optimisation à deux objectifs J_1 et J_2 . J_1 est une évaluation de

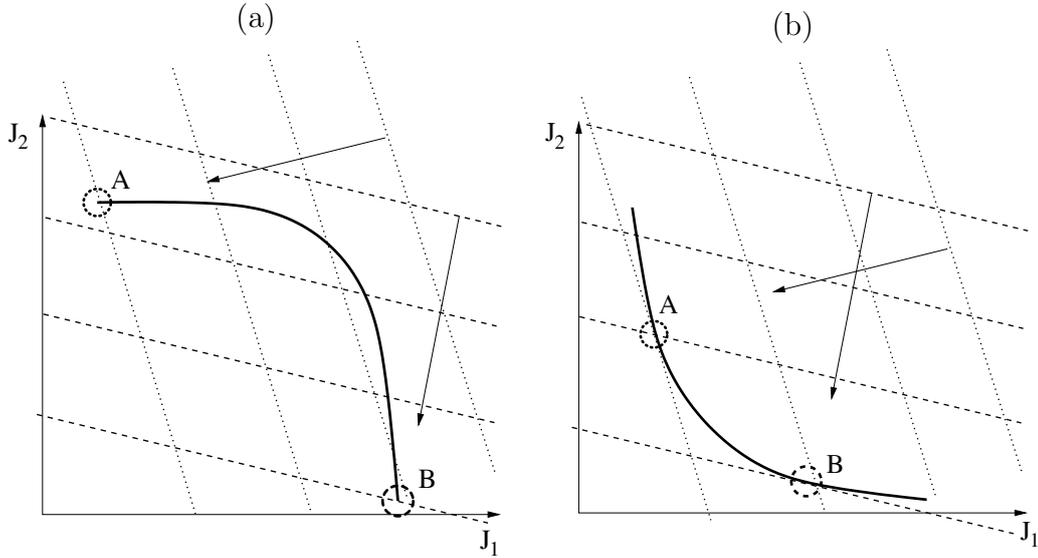


FIG. 3.12 – Influence de la pondération et de la topologie du FPO sur la solution optimale $Min(J = W_1^c J_1 + W_2^c J_2)$: Iso-J avec $W_1^c < W_2^c$; ---- : Iso-J avec $W_1^c > W_2^c$; (a) FPO concave (b) FPO convexe

la précision du schéma une étape à prédire la bonne vitesse de flamme laminaire S_L , tandis que J_2 évalue l'accord entre l'épaisseur de la flamme avec chimie une étape et celle obtenue avec le mécanisme cinétique de référence. Les deux composantes J_1 et J_2 définissent la fonction coût J à minimiser tel que : $J = W_1^c J_1 + W_2^c J_2$. La détermination des poids W_1^c et W_2^c est libre. La figure 3.13 montre les résultats de ce test où, on reporte chaque individu dans l'espace des objectifs. La taille du marqueur est inversement proportionnelle à J , ce qui permet de situer l'optimum dans ce plan. On y a tracé quelques hyperplans iso-J qui ici sont des droites d'équation :

$$J_2 = -\frac{W_1^c}{W_2^c} J_1 + \frac{J}{W_2^c} \quad (3.14)$$

On observe bien que la solution optimale dépend de la pondération. On peut constater fort logiquement qu'en augmentant le poids sur J_2 (Fig. 3.13b), la solution déterminée voit son coût sur l'épaisseur thermique se réduire aux dépens de la prédiction de S_L . Les données des calculs nous permettent d'avoir une vue relativement précise du FPO qui semble ici convexe (Fig. 3.14).

3.4 Description de l'outil d'optimisation

Initialement, l'idée de mettre au point EPORCK à été motivée par le côté rébarbatif de l'exercice manuel de l'optimisation des coefficients des schémas

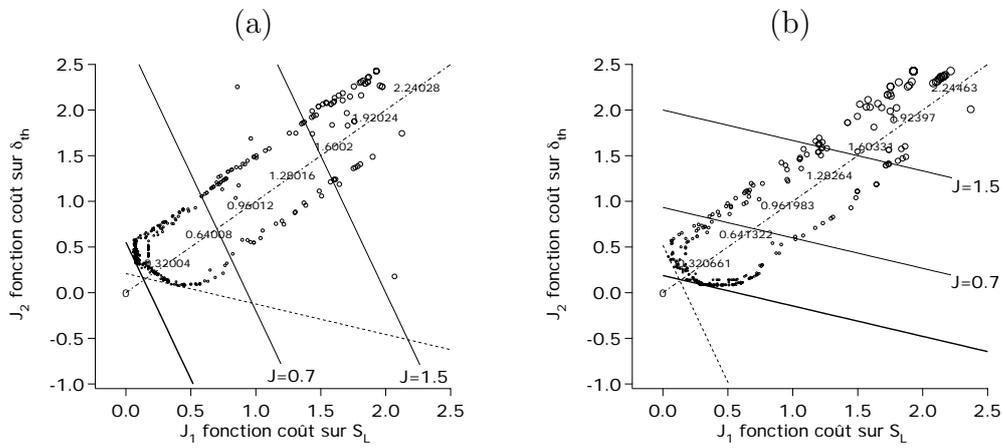


FIG. 3.13 – Influence de la pondération sur la solution optimale $Min(J = W_1^c J_1 + W_2^c J_2)$. (a) $W_1^c = 0.75$, $W_2^c = 0.25$; (b) $W_1^c = 0.25$, $W_2^c = 0.75$; — iso- $J=Min(J)$, : Iso- $J=Min(J = W_2^c J_1 + W_1^c J_2)$

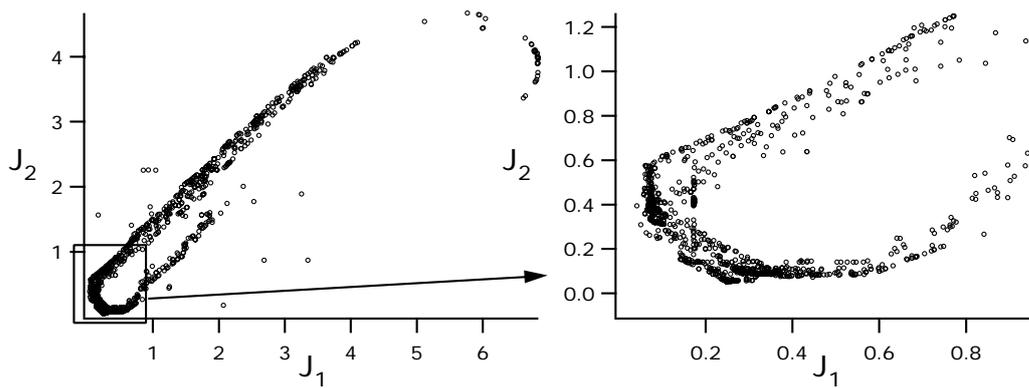


FIG. 3.14 – Ensemble des solutions évaluées, représentées dans l'espace des objectifs.

réduits. Après avoir posé le problème de manière formelle (3.2.1) il est apparu que les blocs fonctionnels nécessaires étaient :

- Un minimiseur robuste
- Un code de calcul de flamme laminaire stationnaire

3.4.1 Structure algorithmique

La robustesse des minimiseurs génétiques ainsi que leur rapide prise en main ont été des qualités prépondérantes dans le choix du minimiseur. Le code génétique, GENOCOP (GENetic algorithm for NUMerical OPTimization for CONstrained PROblems) décrit en 3.4.3 constitue le noyau de l'application, car, il gère le processus évolutionnaire nécessairement itératif. La mise au point d'EPORCK s'est concentrée sur l'interfaçage et intégration des différents blocs fonctionnels, ainsi que sur la définition de la fonctionnelle à minimiser (3.2.2). La figure 3.15 expose la structure générale d'EPORCK. Pour chaque bloc fonctionnel, on peut faire les commentaires suivants :

Initialisation GENOCOP permet de générer une population aléatoire, nous y avons ajouté la possibilité de pouvoir repartir d'une population de clones (d'un schéma donné) ou d'une population de schémas distincts. Ceci afin de pouvoir réutiliser l'information provenant d'un calcul précédent.

Edition fichiers d'entrée Chemkin à l'exception du fichier décrivant le schéma courant, tous les autres sont statiques et pour la plupart générés automatiquement en début de calcul.

Exécution Premix Le lancement du programme évaluateur se fait par l'intermédiaire d'un appel système pour exécuter un script. Cette solution n'est pas la plus performante car elle nécessite un accès disque au lancement du script. Dans les faits, cela procure un élément de souplesse car on peut modifier par exemple le niveau de verbosité du code évaluateur lors de l'exécution. Du point de vue performance, le lancement par script n'est pas spécialement pénalisant. Par exemple, les informations produites par CHEMKIN en sortie standard sont beaucoup plus pénalisantes si elle sont stockées dans un fichier que si elles sont redirigées vers l'unité logique nulle (/dev/null mode par défaut).

Evaluation du schéma L'évaluation se décompose en deux phases. Un post-traitement intégré au code extrait les informations qui nous sont utiles de la solution PREMIX. On vérifie ensuite, si la solution est convergée, puis on évalue le coût J (3.2.2) relatif au schéma considéré.

Genocop Le noyau génétique récupère les évaluations de la population pour appliquer la sélection et les opérateurs génétiques. Une nouvelle génération à évaluer, voit le jour. À chaque génération, GENOCOP conserve en mémoire le chromosome du meilleur individu.

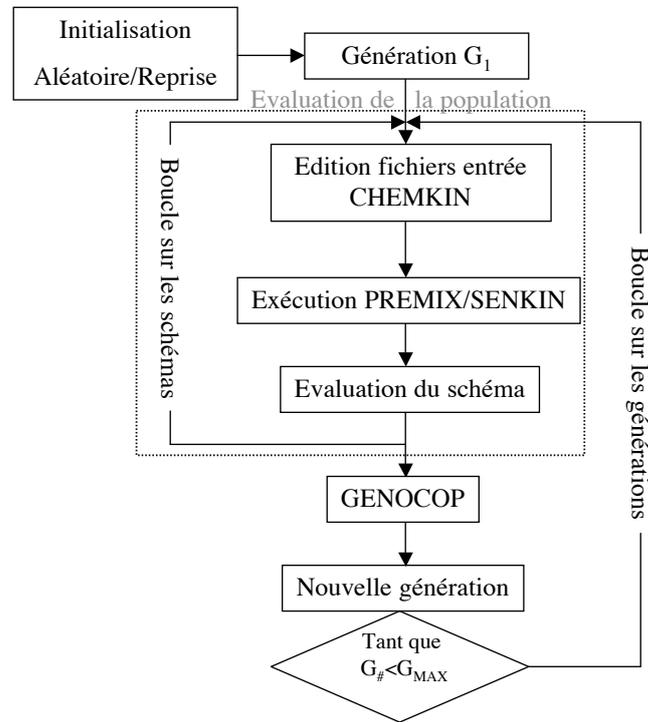


FIG. 3.15 – Schéma synoptique de EPORCK

Condition d'arrêt Le processus évolue sur un nombre de générations déterminé à l'avance.

3.4.2 Evaluation

Pour notre problème, l'évaluation est confiée à la suite logicielle CHEMKIN [55]. Les évaluations sont effectuées en calculant des flammes laminaires avec PREMIX [54]. PREMIX résout un problème de flamme laminaire adiabatique stationnaire monodimensionnelle en transport complexe. Les informations et données à fournir à PREMIX sont :

- Les conditions de pression, température et composition chimique des gaz frais sont spécifiées par l'utilisateur. Dans la plupart des cas, le schéma est évalué pour plusieurs mélanges alors que les conditions de pression et température restent fixes.
- Les paramètres numériques de résolution.
- L'étendue du domaine de calcul ainsi que la position de la flamme.
- Un profil de température initiale.
- La définition du schéma cinétique.
- Les bases de données thermodynamiques et de transport.

Hormis la définition du schéma cinétique, toutes ces données d'entrée sont statiques et n'ont donc pas à varier au cours du calcul. Un module de post traitement a été développé et intégré à EPORCK afin d'extraire les grandeurs qui serviront à évaluer la performance du schéma. À ce jour, ce module extrait des solutions PREMIX :

- La vitesse de flamme laminaire S_L qui correspond dans ce modèle stationnaire à la vitesse des gaz frais.
- La température adiabatique de fin de combustion estimée comme étant la température mesurée à la sortie du domaine
- l'épaisseur thermique de flamme δ_{th} est calculée avec le profil de température :

$$\delta_{th} = \frac{T_{out} - T_{in}}{\max\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} \quad (3.15)$$

- Les fractions massiques Y_k^{eq} , $k = 1..N_{spec}$ des N_{spec} espèces mesurées en sortie de domaine où elles sont sensées être à l'équilibre chimique.

Ce même module existe en tant que programme à part entière afin d'extraire ces grandeurs des solutions de référence calculées avec une cinétique complexe validée autant que faire ce peut. On peut noter aussi qu'une version marginale d'EPORCK utilise SENKIN [71] pour optimiser les schémas en auto-allumage et a permis d'ajuster un schéma 1 étape pour l'auto-allumage du gaz naturel [144].

3.4.3 Le noyau génétique GENOCOP

GENOCOP est un AG de la classe programmation évolutionnaire, qui utilise le codage réel des paramètres. Il est spécialisé dans l'optimisation des paramètres. Il fonctionne néanmoins correctement sur les problèmes combinatoires. La principale différence des algorithmes évolutionnaires avec l'AGS est que blocs Opérateurs Génétiques et Sélection de la Fig. 3.7 permutent (Fig. 3.16). Le nombre et la nature des opérateurs génétiques sont aussi différents.

3.4.4 Les Opérateurs génétiques disponibles

Les Opérateurs de croisement sont des opérations binaires tandis que les mutations sont des opérations unaires. On présente ici la liste des opérateurs disponibles avec GENOCOP ainsi que leurs caractéristiques principales.

- **Mutation Uniforme Simple (MutUS) :**

L'opérateur sélectionne aléatoirement un gène et le fait muter avec une distribution de probabilité uniforme (DPU). Cet Opérateur joue un rôle important au début du processus d'évolution car les individus sont autorisés à se mouvoir dans l'espace de recherche. Cet opérateur est essentiel lorsque la population initiale est composée de clones puisque qu'il introduit

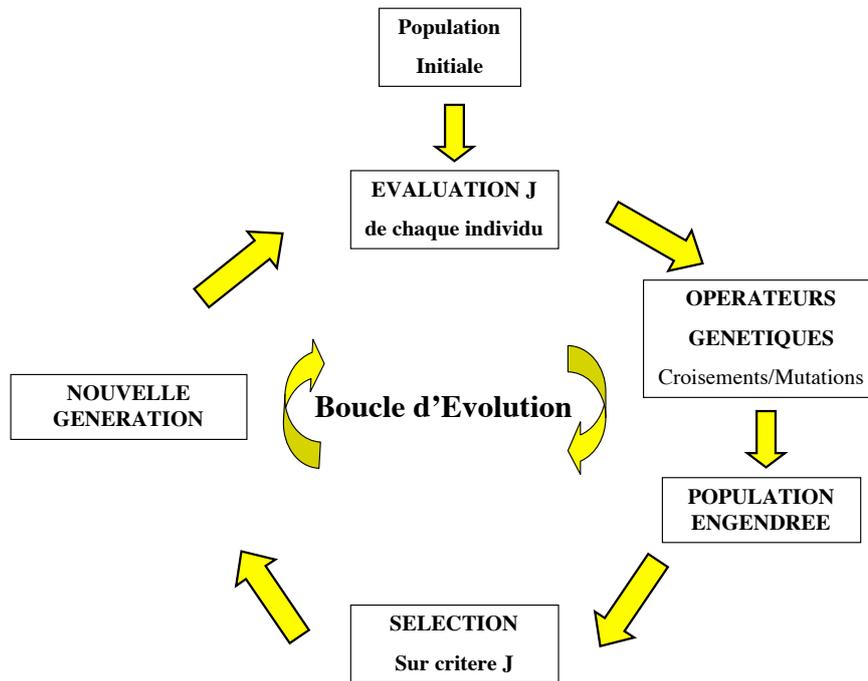


FIG. 3.16 – Schéma de principe des algorithmes évolutionnaires.

une diversité génétique absente au départ. Tout au long du calcul, les mutations uniformes n'ont de cesse que d'explorer l'espace de recherche donc de maintenir un minimum de diversité.

– **Mutation de Bord (MutB) :**

L'opérateur sélectionne aléatoirement un gène et le fait muter aléatoirement à la valeur d'une des bornes du domaine de variation autorisé. Cet opérateur est utile au début du processus pour détecter une éventuelle limitation de l'optimisation par un domaine de variation trop restreint. Si l'optimum voit une de ses allèles avoir la valeur d'une borne alors on peut supposer qu'un domaine étendu puisse donner un meilleur résultat.

– **Mutation Non-Uniforme Simple (MutNUS) :**

L'opérateur sélectionne aléatoirement un gène $g \in [g_{min}; g_{max}]$ et le fait muter aléatoirement vers g' avec une distribution de probabilité non-uniforme (DPNU) définie par :

$$g' = \begin{cases} g + \Delta(t, g_{max} - g) \\ g - \Delta(t, g_{min} - g) \end{cases} \quad \text{ou (avec probabilité égale)} \quad (3.16)$$

La fonction $\Delta(t, y)$ retourne une valeur comprise dans l'intervalle $[0, y]$ tel que la probabilité que $\Delta(t, y)$ soit proche de 0 augmente à mesure que le temps t (ou nombre cumulé de générations) augmente. Cette propriété

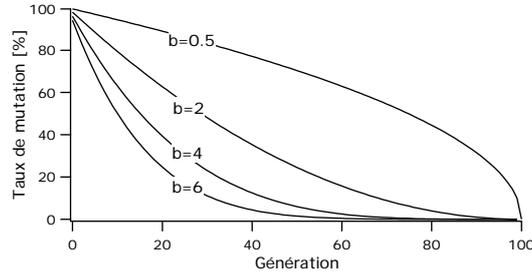


FIG. 3.17 – Influence du paramètre b sur le taux de mutation des opérateurs non-uniformes.

permet au MutNUS d'explorer l'espace de recherche uniformément au début de l'optimisation puis, en limitant la dispersion des mutations au court du temps, d'explorer plus localement la région la plus prometteuse. La fonction Δ est définie par :

$$\Delta(t, y) = y.r. \left(1 - \frac{t}{T}\right)^b \quad (3.17)$$

où r est un réel choisi aléatoirement ($r \in [0; 1]$), T est le nombre de générations prévues. Le paramètre b détermine le degré de non-uniformité (Fig. 3.17).

- **Mutation Non-Uniforme Complète (MutNUC)** : Cet opérateur a le même comportement que MutNUS. La mutation est opérée sur le chromosome entier, i.e. pour chaque gène.
- **Croisement Arithmétique Simple (CrAS)** : Cet opérateur de recombinaison est l'adaptation au codage réel du croisement binaire (3.3.5). Son action est prépondérante dans le succès de la méthode. Deux parents sont sélectionnés (3.4.5). L'opérateur sélectionne aléatoirement un gène dont la valeur est respectivement g_1 pour le parent \mathbf{x}_1 et g_2 pour le parent \mathbf{x}_2 . Les deux individus engendrés \mathbf{x}'_1 et \mathbf{x}'_2 ont un génôme inchangé excepté pour le gène croisé :

$$\begin{aligned} g'_1 &= r g_1 + (1 - r) g_2 \\ g'_2 &= r g_2 + (1 - r) g_1 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Où $r \in [0, 1]$ est un réel aléatoire.

- **Croisement Arithmétique Complet (CrAC)** : Cet opérateur a le même comportement CrAS. La mutation est opérée sur le chromosome entier, i.e. pour chaque gène.
- **Croisement Heuristique (CrH)** : Cet opérateur est assez singulier pour les raisons suivantes :
 - Il utilise la valeur de la fonction objective pour déterminer une direction de recherche.
 - il n'engendre qu'un individu \mathbf{x}' et peut même n'en produire aucun.

- Contrairement aux autres opérateurs, sa définition n’assure pas que les gènes de l’individu engendré se trouvent dans les bornes fixées.

Son comportement suit les règles :

- On détermine le meilleur des deux parents. Ici on suppose que \mathbf{x}_2 est meilleur que \mathbf{x}_1 .

- $\mathbf{x}' = r(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) + \mathbf{x}_2$ Où $r \in [0, 1]$ est un réel aléatoire.

Si après un certain nombre de tirages de r , l’individu engendré n’est toujours pas faisable¹², alors aucun individu n’est engendré.

Sa principale action est de tenter de déterminer des directions privilégiées dans l’espace de recherche.

3.4.5 Schéma de sélection

Dans GENOCOP, on sépare la population en deux groupe. D’un côté les ”parents” qui seront remplacés par leur progéniture et de l’autre les individus survivants tel quel. La sélection s’opère en 4 étapes :

1. On sélectionne N_{pa} individus ”parents”
2. On sélectionne $N_{surv} = N_{pop} - N_{pa}$ individus, qui survivent et font donc partie de la prochaine génération.
3. On applique les opérateurs génétiques sur les N_{pa} parents, engendrant le même nombre d’individus N_{pa} .
4. Les individus engendrés viennent compléter la nouvelle génération.

Le nombre N_{pa} est déterminé par l’utilisateur qui choisit respectivement pour chaque opérateur génétique, le nombre d’individus qui à chaque génération le subira. L’opérateur de *sélection stochastique universelle* [3] (**SSU**) implémenté est une amélioration de la *sélection entière déterministe avec sélection stochastique du reste* présentée en 3.3.4. La SSU sert à la fois pour déterminer les parents et les individus reconduits intacts dans la nouvelle population. La SSU met en oeuvre une roulette pondérée (3.3.4) qui, au lieu d’être lancée N_{pa} fois, dispose de N_{pa} curseurs régulièrement répartis (Fig. 3.18) , et sélectionne en un seul lancé le nombre souhaité d’individus. De plus, lors de la sélection des parents, chaque curseur se voit attribué un opérateur. Ceci permet, d’assigner les opérateurs génétiques aux parents (Fig. 3.18). On aura noté que l’opérateur SSU opère une sélection d’individus qui ne sont pas nécessairement distincts. Ceci donne une bonne chance aux meilleurs individus de figurer à la fois dans le groupe de parents et dans le groupe de survivants.

¹²au moins un de ses gènes est en dehors du domaine de variation autorisé.

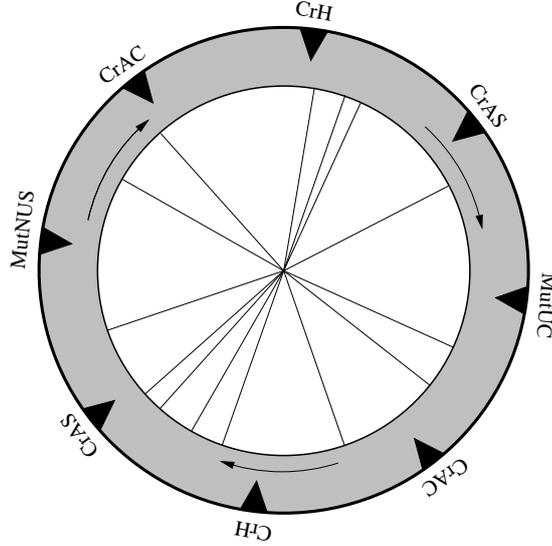


FIG. 3.18 – Sélection stochastique universelle et assignement des opérateurs génétiques aux individus sélectionnés dans GENOCOP. La mnémonique des opérateurs est définie en 3.4.4.

3.5 Mise en oeuvre et applications

3.5.1 Choix des grandeurs objectives

Une approche pragmatique nous a amené à sélectionner les objectifs tels que.

- S_L , la vitesse de flamme laminaire, car c’est la caractéristique la plus influente sur la dynamique et la stabilisation des flammes de prémélange.
- T_{ad} la température adiabatique de fin de combustion.
- δ_{th} , une estimation de l’épaisseur de flamme.
- Y_k^{eq} la fraction massique à l’équilibre dans les gaz brûlés de l’espèce k .

À part S_L , les objectifs sur les autres grandeurs cherchent principalement à discriminer les solutions valides et non valides. Il est inutile en théorie de vouloir accorder la température adiabatique de fin de combustion T_{ad} d’un schéma réduit avec celle prédite par la cinétique complexe. En effet, celle-ci n’est en première approximation, qu’une fonction des espèces déclarées et donc indépendante des paramètres du schéma. Le programme EQUIL de la suite CHEMKIN [56] permet de déterminer les températures d’équilibre d’un mélange initial donné. En pratique, cela permet d’écarter les solutions convergées numériquement, mais physiquement non valides. Ces solutions présentent une structure de flamme trop étendue pour être contenue dans le domaine de calcul et n’atteignent pas la température d’équilibre en sortie de domaine. En pratique, on utilisera la température prédite par EQUIL pour le jeu d’espèces du schéma réduit, et non pas celle du schéma de référence. Si l’objectif sur T_{ad} permet de discriminer les solutions de flamme “trop

étalée”, ceci n’empêche pas de s’orienter vers des solutions dont l’épaisseur est trop faible. Ceci mène en pratique à augmenter la raideur numérique des termes sources chimiques, en plus de réclamer soit une résolution, soit un épaissement plus élevé (Sec. 2.1.5). Dans tous les cas, ces solutions sont aussi à éviter. On a pour cela ajouté aux objectifs une estimation de l’épaisseur thermique de la flamme δ_{th} . On peut objecter que l’utilisation d’objectif sur S_L et δ_{th} est redondante puisque pour les chimies simples on obtient la loi d’échelle reliant la vitesse de flamme et une épaisseur de flamme à la diffusion thermique [104] :

$$\delta S_L = D_{th}^1 \quad (3.19)$$

L’épaisseur diffusive δ est estimée ici par δ_{th} . Néanmoins cette redondance permet encore d’éliminer des solutions non valides.

Pour les schémas multi-étapes, il est nécessaire de la même façon de s’assurer que la composition d’équilibre est bien atteinte dans les gaz brûlés en sortie de domaine. Pour cela on utilise pour objectif la composition du mélange en sortie de domaine. Il convient, afin d’éviter de parasiter la fonction coût, de ne pas utiliser l’ensemble des objectifs sur espèces. En effet, le schéma complexe de référence, inclut des mécanismes dont certains ne pourront être reproduits par un schéma global. On peut penser au craquage des carburants hydrocarbures en régime riche. De ce fait, le carburant en excès disparaît, alors que ceci est impossible avec un schéma global. Nos schémas à deux étapes qui sont constitués d’une première réaction d’oxydation partielle de l’hydrocarbure en eau et CO , et d’une seconde réaction d’équilibre entre l’oxydation du CO et la dissociation du CO_2 . En pratique on utilise le plus souvent la composition en CO et CO_2 car ces deux espèces interviennent directement dans l’équilibre de la seconde réaction qui habituellement est : $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons CO_2$. Le CO est particulièrement intéressant puisqu’il est produit de la première réaction et réactant de la seconde. Ceci permettant de contrôler le couplage entre les deux réactions.

La mise en oeuvre de l’optimisation d’un schéma se déroule selon les étapes suivantes :

1. Définition du schéma i.e. espèces mises en jeu, et des réactions. La paramétrisation, doit aussi être établie. Il est toujours possible de fixer certains paramètres à des valeurs données pour par exemple faire évoluer un schéma déjà existant et dont on veut conserver certaines caractéristiques. Dans ce cas, un minimum d’expertise est requis de la part de l’utilisateur.
2. Une fois le jeu de paramètres défini, il est nécessaire de définir les domaines de variation de chaque paramètre. Les domaines de variations étant supposés continus, on les définit à l’aide d’une borne supérieure et inférieure. Il peut être difficile de fixer ces bornes, on n’hésitera pas pour un premier calcul à les spécifier assez larges. On réduira leur étendue ultérieurement (étape 6) si nécessaire.

3. Les solutions seront évaluées à partir de calcul de flamme laminaire stationnaire. Il faut alors définir les points de fonctionnement. On doit alors définir pour chaque point de fonctionnement :

- La composition en espèces des gaz frais.
- La température des gaz frais.
- La pression.

On aura au préalable pris soin de générer une base de données de référence pour les objectifs à l'aide d'un schéma de référence aux points de fonctionnements choisis précédemment. On évitera de multiplier les points de fonctionnements, car ceci augmente fortement le coût calcul de l'évaluation et allonge d'autant plus le temps de restitution.

4. Définition des paramètres d'exécution :

- Sélection des objectifs. Les objectifs sur S_L et T_{ad} seront systématiquement choisis. Pour contraindre la structure de flamme, on pourra éventuellement sélectionner le critère sur δ_{th} . Les objectifs sur Y_k^{eq} sont réservés aux schémas multi étapes.
- Définition des poids \mathbf{W}^c affectés aux objectifs. Pour un premier calcul, il est courant de privilégier l'objectif S_L et d'imposer une pondération uniforme sur le reste des objectifs.
- Définition des poids \mathbf{W}^ϕ affectés aux points de fonctionnement. Il est recommandé d'utiliser une pondération uniforme.
- On active tous les opérateurs génétiques, en particulier la mutation de bord car elle permet de détecter rapidement si les bornes des domaines de variations sont limitantes ou non.
- Définition de la taille de la population et du nombre de générations à calculer : Pour fixer les idées une population de 20 ou 30 individus sont des valeurs communes. En règle générale on veillera à définir une taille de la population d'autant plus grande que le nombre de paramètres à optimiser est grand. Il est conseillé de choisir un nombre de générations compris entre 70 et 150. Il faut réaliser que le coût calcul est proportionnel au produit de la taille de la population, du nombre de générations et du nombre de points de fonctionnement évalués. Un calcul moyen opère donc de l'ordre de 9000 calculs de flamme ($30 * 3 * 100$) menant à un temps de restitution de 1 à 2 heures¹³.

5. Lancement du calcul EPORCK

6. Analyse du résultat avec évaluation du schéma sur une gamme complète de conditions opératoires. Puis en fonction des résultats obtenus, on modifie les différentes pondérations en conséquence. On peut modifier les bornes des domaines de variation lorsqu'un paramètre converge visiblement sur une frontière de sa plage de variation. Ces ajustements ne sont pas toujours

¹³Processeur MIPS R12000

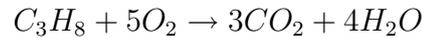
possibles lorsqu'ils sont en contradiction avec des contraintes numériques imposées.

- On itère les procédures 5-6 jusqu'à obtention du résultat. Une moyenne de 2 à 4 cycles est à prévoir.

3.5.2 Exemple d'application : schéma propane une étape : C3H8-1S-CM1

L'exemple d'optimisation présenté ici à été choisi parce qu'il offre l'avantage d'avoir été optimisé en une seule passe. Ceci permet d'illustrer de façon pratique et concise une optimisation de schéma.

On se propose d'optimiser sur la plage pauvre [0.5; 1] centrée sur $\phi = 0.8$ un schéma global de propane :



On décide de paramétrer le taux d'avancement de la réaction avec 4 degrés de liberté :

$$Q_1 = 10^{P_1} \exp\left(-\frac{P_2}{RT}\right) [X]_{C_3H_8}^{P_3} [X]_{O_2}^{P_4} \quad (3.20)$$

TAB. 3.4 – Paramétrisation du schéma C3H8-1SCM1 (unités CGS)

Paramètre	Fonction	Plage de variation	Optimum
P_1	Préexponentielle	[8; 11]	10.5174
P_2	Energie d'activation	[17000; 35000]	31126
P_3	Exposant arbitraire	[0.5; 1.2]	0.8560
P_4	Exposant arbitraire	[0.5; 1.5]	0.5032

TAB. 3.5 – Paramètres de l'optimisation de C3H8-1SCM1

$P = 1bar$ $T_1 = 300K$	\mathbf{W}^c	$\phi_1 = 0.6$	$\phi_2 = 0.8$	$\phi_3 = 1.0$
\mathbf{W}^ϕ		$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
S_L	$\frac{10}{13}$	0.1579m/s	0.3426m/s	0.4772m/s
T_{ad}	$\frac{3}{13}$	1715K	2037K	2205K

On a volontairement appliqué une loi d'échelle logarithmique décimale sur la paramétrisation de la préexponentielle afin d'obtenir une convergence plus

rapide. Même si en théorie nulle normalisation de l'espace des phases n'est requise, la pratique montre qu'une trop grande dispersion des ordres de grandeur entre paramètres ralentit la convergence. Il a été remarqué, que cette distorsion des échelles dégrade la précision avec laquelle l'optimum est déterminé. Dans le même esprit, on peut appliquer une loi d'échelle linéaire à l'énergie d'activation : $E_a = 1000 * P_2$, ce qui ramènerait la plage de variation de P_2 à [17; 35] (Tab. 3.4). Cette loi d'échelle est maintenant systématiquement appliquée. Les domaines de

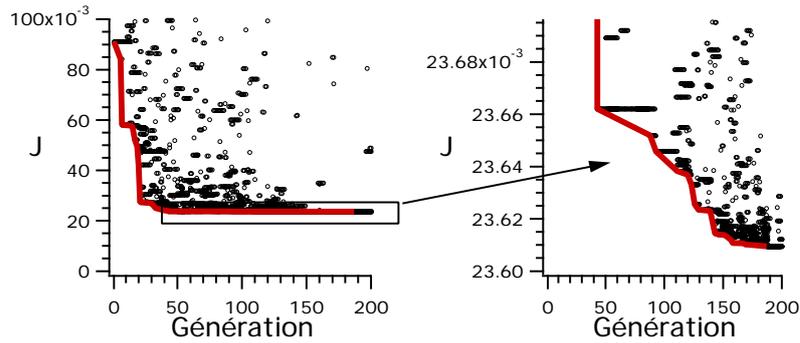


FIG. 3.19 – Convergence globale : \circ évaluations , — Minimum de J

variation imposés sont spécifiés dans Tab. 3.4. Les objectifs sélectionnés sont la vitesse de flamme et la température des gaz brûlés. La table 3.5 regroupe les paramètres numériques relatifs à la définition de la fonctionnelle J (Eq. 3.13) à minimiser. On peut observer la convergence des paramètres sur leurs graphes respectifs de la figure 3.20. On peut y observer une phase purement exploratoire (Génération 1 à 20), où la plage de variation de chaque paramètre est prospectée assez uniformément. On peut y détecter l'établissement de lignées telles que $P_1 \simeq 10.5$, $P_1 \simeq 10.0$ où $P_1 \simeq 9.5$ (Fig. 3.20 a et b). Cette phase d'exploration est suivie d'une phase de transition (génération 20 à 70) où l'exploration est peu à peu délaissée au profit de la recombinaison des meilleures solutions afin de souligner une direction assez nette. On y voit là l'effet des opérateurs de mutation non-uniformes (Sec. 3.4.4), dont l'amplitude de mutation diminue à mesure que la population vieillit. On en discerne d'ailleurs assez bien l'enveloppe. La fin du processus d'optimisation se contente d'affiner l'ajustement des paramètres. On remarquera le cas particulier du paramètre P_4 (Fig. (3.20 g et h) dont l'optimum se trouve visiblement au-delà de sa borne inférieure. Cependant nous avons placé cette limite inférieure pour garantir la stabilité et la robustesse du schéma dans les calculs en configuration complexe. La courbe de convergence présentant le minimum de J au fil des générations (Fig. 3.19) nous montre une convergence rapide dès la phase d'exploration pure. À partir de la cinquantième génération, EPORCK ne semble plus pouvoir donner d'amélioration. En fait, on réalise sur l'agrandissement, que la phase d'optimisation fine se situe à un ordre inférieur. On observe que la valeur minimum de J n'est pas obtenue à la dernière génération mais à

la 187^{ème}. Ceci nous conforte dans le sentiment d'être très proche du minimum global de J , car aucune amélioration ne semble possible dans un voisinage proche.

L'évaluation du schéma C3H8-1SCM1 par une série de calculs PREMIX sur une gamme étendue de richesses permet de constater que l'accord sur S_L avec les valeurs cibles est très satisfaisant (Fig. 3.24 a, b et c). On maintient un niveau d'erreur inférieure à 10% sur une plage allant de $\phi = 0.6$ à $\phi = 1.2$.

3.5.3 Résumé et caractéristiques des schémas produits.

La nomenclature de schémas est construite suivant les règles suivantes : "nom du carburant" - "nombre de réactions" S "initiales du créateur" "numéro identifiant". Par exemple le schéma *JP10-1SMB1* correspond à un schéma une étape pour le kérosène type JP-10 créé par Mathieu Boileau. La table 3.5.3 dresse la liste de la plupart des schémas qui ont été soit directement générés avec EPORCK ou dérivés d'un schéma généré avec EPORCK. Les performances des principaux schémas sont exposées par carburant : méthane, propane et JP-10.

TAB. 3.6: Récapitulatif des cinétiques globales générées directement ou indirectement à l'aide de EPORCK.

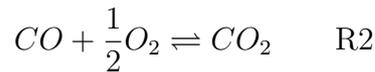
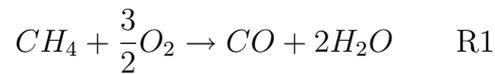
Nom	Conditions	Configuration	Projet
<i>CH₄-2SCM2</i> Généré par : EPORCK V1.3	1bar/300K	Brûleur LPP	PRECCINSTA [116]
	1bar/736K	Brûleur double injection vrillée ITS Univ. Karlsruhe	SIEMENS [130] [131]
	1bar/375K	Brûleur double injection vrillée ITS Univ. Twente	SIEMENS [37]
<i>CH₄-2SPS1</i> Extrapolé de : <i>CH₄-2SCM2</i>	5bar/660K	Brûleur injection de carburant étagée ALSTOM ev7	FUELCHIEF [125]
<i>CH₄-2SAS1</i>	1.5bar/300K	Brûleur à injection vrillée SIEMENS	DESIRE
<i>CH₄-2SGS1</i> Extrapolé de : <i>CH₄-2SCM2</i>	2bar/300K	Brûleur triple sections SIEMENS NGF	SIEMENS
<i>C₃H₈-1SCM1</i> Généré par : EPORCK V1.6	1bar/300K	Brûleur expérimental à injection étagée ECPmod EM2C	FUELCHIEF [76]
			[77]
<i>JP10-1SMB1</i> Généré par :	1bar/525K	Chambre M88 diphase	SNECMA

TAB. 3.6: Récapitulatif des cinétiques globales générées directement ou indirectement à l'aide de EPORCK.

Nom	Conditions	Configuration	Projet
EPORCK V1.8			
<i>JP10-1SMB2</i> Généré par : EPORCK V1.8	4.5bar/573K	Chambre DEM21 Démonstrateur	SNECMA [94]
<i>C₃H₈-2SCM2</i> Généré par : EPORCK V1.9	1bar/300K	Brûleur expérimental à injection étagée ECPmod EM2C	FUELCHIEF
<i>CH₄-1SCM4</i> Généré par : EPORCK PSR	15bar/1250K auto allumage	Combustion séquentielle	ALSTOM [144]
<i>CH₄-1SCM5</i> Généré par : EPORCK 1.4	1bar/630K	Combustion prémélangée	ALSTOM
<i>CH₄-2SCM6</i> Généré par : EPORCK 1.4	1bar/630K	Combustion prémélangée	ALSTOM
<i>CH₄-1SCM7</i> Généré par : EPORCK 1.4	20bar/750K	Combustion prémélangée	ALSTOM
<i>CH₄-2SCM8</i> Généré par : EPORCK 1.4	20bar/750K	Combustion prémélangée	ALSTOM

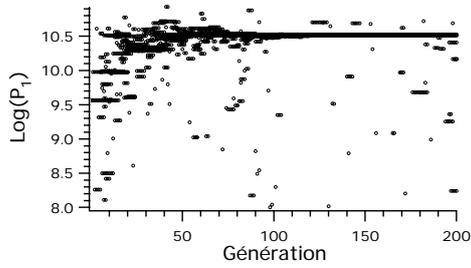
Schéma méthane : *CH₄-2SCM2*, à $P = 1\text{bar}$ pour prémélange air/méthane

Ce schéma utilise deux réactions dont une réversible :

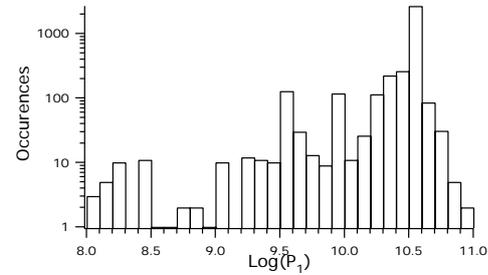


On obtient un bon accord sur S_L pour les régimes pauvres jusqu'à la stoechiométrie, avec une erreur inférieure à 10% (Fig. 3.22a). Grâce à la réaction *R2*, on obtient la prédiction d'un polluant *CO* (Fig. 3.22d) sur une gamme de richesse pauvre assez étendue, en conservant la bonne tendance sur la branche riche jusqu'à $\phi = 1.4$. On obtient aussi une meilleure estimation de la température adiabatique de fin de combustion T_{ad} . En effet, la réaction de dissociation du CO_2

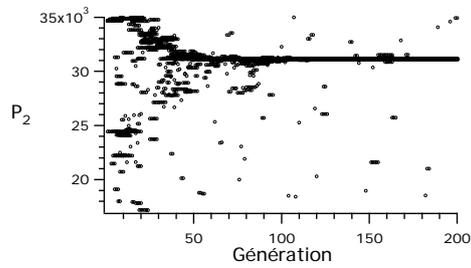
(a) Préexponentielle



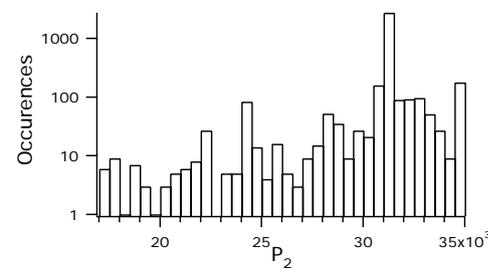
(b)



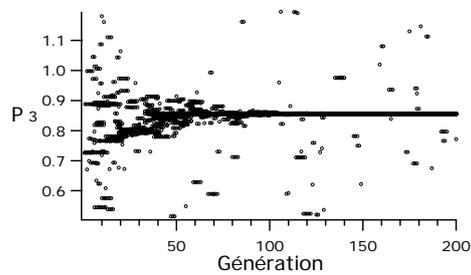
(c) Energie d'activation



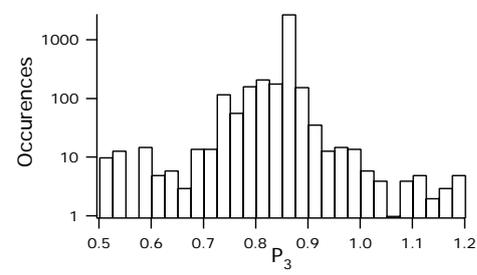
(d)



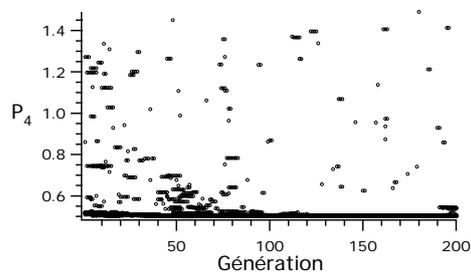
(e) Exposant C_3H_8



(f)



(g) Exposant O_2



(h)

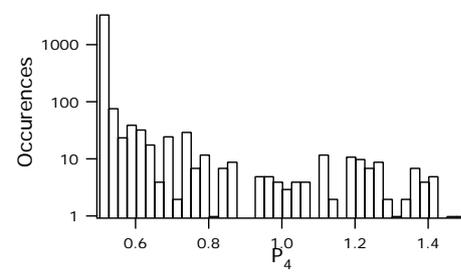


FIG. 3.20 – Schéma C3H8-1SCM1 : Convergence et histogrammes des paramètres.

est endothermiques (Fig. 3.21), et permet donc par rapport à une chimie mono étape, d'obtenir une meilleure prédiction de T_{ad} , en particulier au voisinage de la stœchiométrie (Fig. 3.22b).

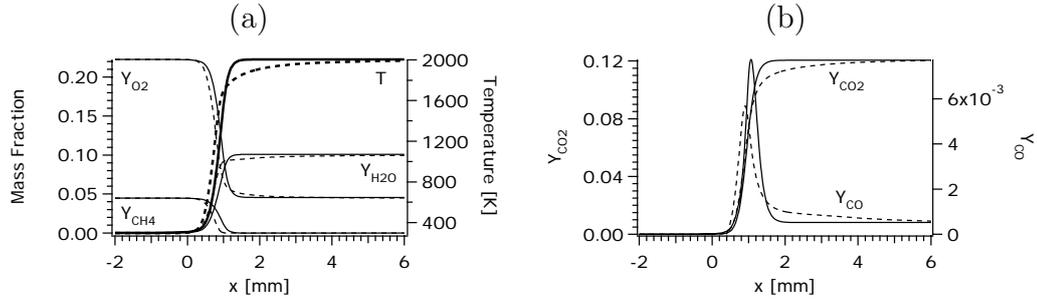


FIG. 3.21 – Comparaison des profils d'espèces et température à $\phi = 0.8$, $T_1 = 300K$, $P = 1bar$: — CH_4 -2SCM2, ---- GRI-Mech 3.0.

Ce schéma, bien qu'initialement optimisé à une température gaz frais de 300K (Fig. 3.22), reste valide pour des températures de gaz frais bien plus élevées (673K Fig. 3.23).

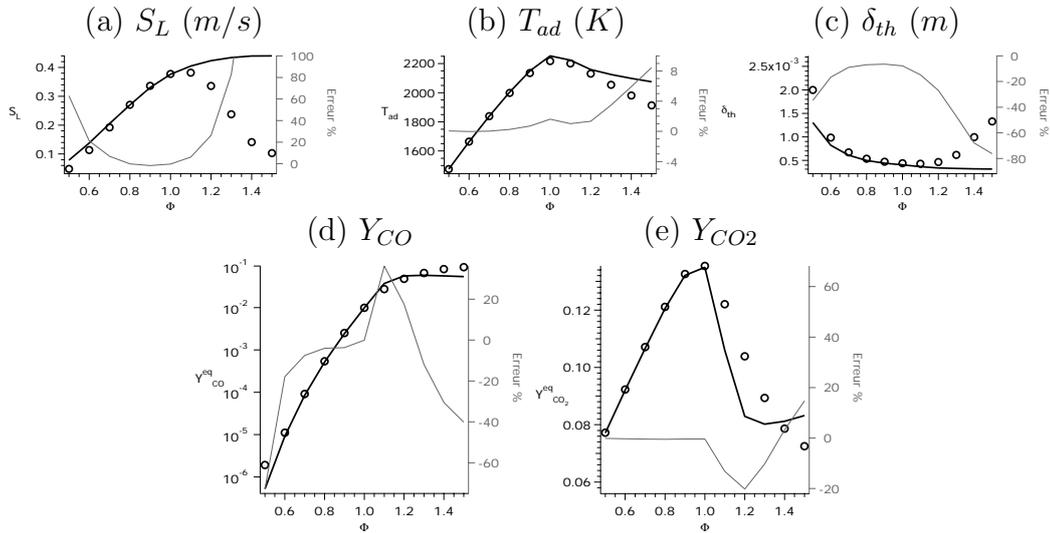


FIG. 3.22 – Schémas méthane, $T_1 = 300K$, $P = 1bar$: — CH_4 -2SCM2, ○ GRI-Mech 3.0, — Erreur relative.

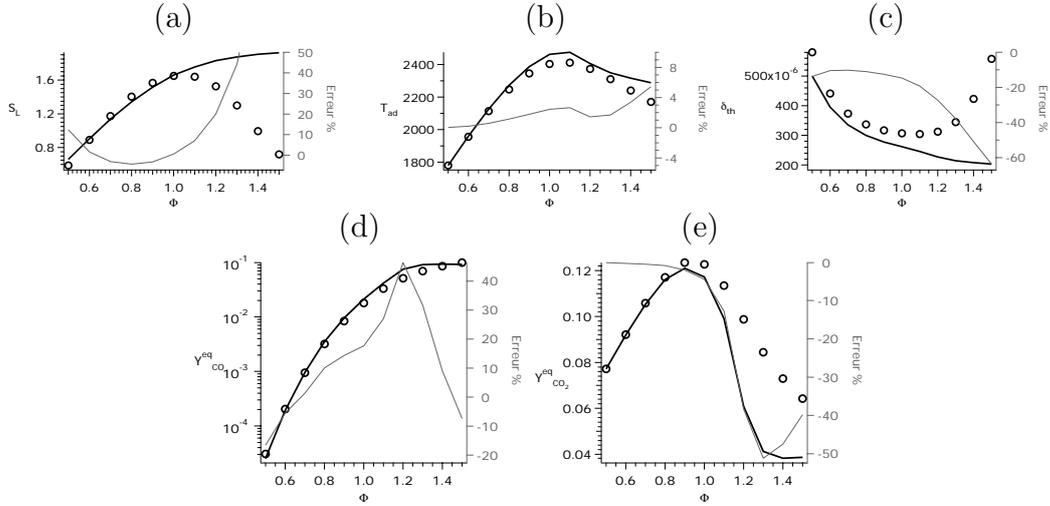
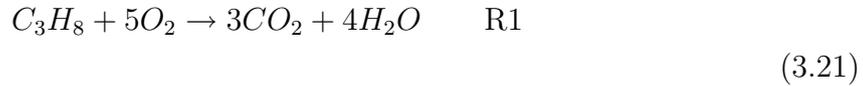


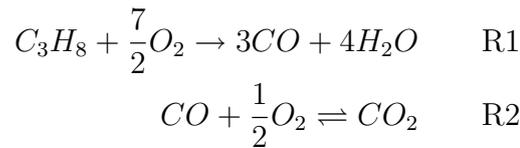
FIG. 3.23 – Schémas méthane, $T_1 = 670K$, $P = 1bar$: — CH_4 -2SCM2, \circ GRI-Mech 3.0, — Erreur relative.

Schémas propane : C_3H_8 -2SCM2 et C_3H_8 -1SCM1, à $P = 1bar$ pour prémélange air/propane

Nous présentons ici les deux schémas en condition standard pour le propane. Le schéma global C_3H_8 -1SCM1 est défini par :



Le schéma deux étapes propane C_3H_8 -2SCM2 est l'équivalent de CH_4 -2SCM2 :



On note des performances quasi identiques en terme d'accord sur S_L (Fig. 3.24 a). On obtient évidemment pour C_3H_8 -2SCM2 une meilleure estimation de T_{ad} , que pour C_3H_8 -1SCM1 dont l'erreur sur T_{ad} augmente significativement à partir de $\phi = 0.8$. On accède aussi à la prédiction d'émission CO avec une précision comparable à celle obtenue avec son homologue pour le méthane.

Schéma Kérosène : JP10-1SMB1 à $P = 4.4bar$ pour prémélange air/JP-10

Le JP-10 est un hydrocarbure liquide dans les conditions normales de température et de pression. C'est un kérosène de haute qualité. Pour simplifier la modélisation

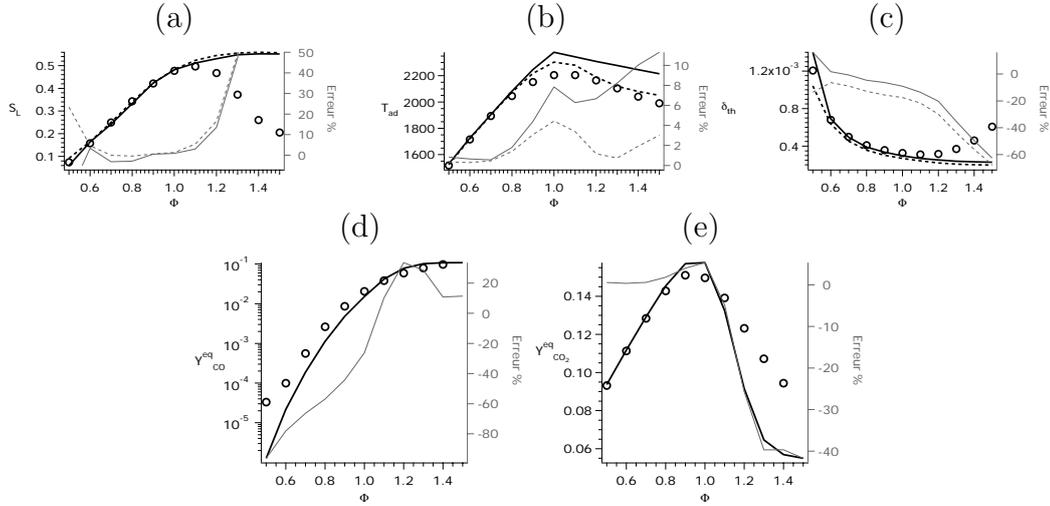


FIG. 3.24 – Schémas propane, $T_1 = 300K$, $P = 1bar$: — C_3H_8 -1SCM1, - - - C_3H_8 -2SCM2, \circ Peters[99], — Erreur relative.

de ce carburant, on suppose qu'il est composé essentiellement de tricyclodécane qui a pour formule : $C_{10}H_{16}$.

La réaction globale de combustion du JP-10 a pour équation bilan :



Les conditions de combustion prévues permettent sa vaporisation, avec une température de gaz frais de $525K$ et une pression de $4.4bar$. On dispose d'un schéma de référence [67] à 174 réactions et 36 espèces validé expérimentalement sur une large plage de richesse et des pressions allant de 1 à $8bar$. Les figures 3.25 a, b et c montrent que là encore, on réussit à obtenir une précision équivalente à celle obtenue pour des carburant plus simple comme le méthane.

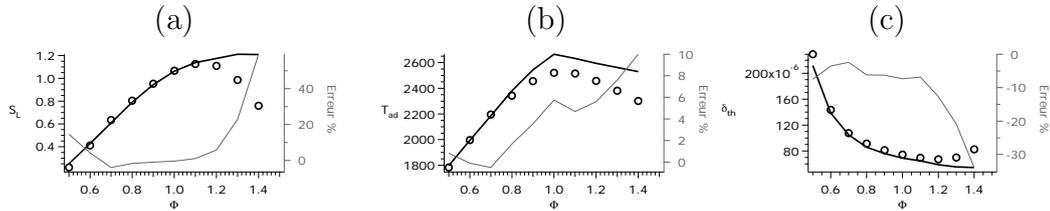


FIG. 3.25 – Schémas JP-10, $T_1 = 525K$, $P = 1bar$: — JP-10-1SMB1, \circ JP-10 San Diego[67], — Erreur relative.

3.5.4 Conclusion et perspectives de développement

EPORCK, dédié à l'optimisation des paramètres des schémas cinétiques réduits été mis au point. L'objectif est d'utiliser des schémas globaux reproduisant les

prévisions de schémas cinétiques complets dans des simulations de combustion turbulente en géométrie complexe. Le modèle de flamme turbulente nécessite une bonne estimation des caractéristiques de la combustion laminaire. EPORCK a pour fonction de déterminer le jeu de paramètres qui permettent à un schéma réduit de reproduire les caractéristiques globales d'une flamme de prémélange. Ces objectifs caractéristiques sont fixés à partir de calcul de flamme laminaire 1D stationnaire par un schéma cinétique complexe servant de référence. EPORCK met en oeuvre un moteur d'optimisation génétique qui rend l'outil robuste et performant. L'automatisation de l'optimisation des chimies réduites avec EPORCK a permis :

- Un gain sensible sur la précision des schémas générés par rapport à une optimisation purement heuristique.
- L'accès aux cinétiques à deux étapes, permettant une amélioration sensible de la prédiction de la température de gaz brûlés. Cette prédiction est particulièrement importante pour la précision des modèles d'émission NO_x, ou de rayonnement [124].
- Réduire considérablement le temps humain nécessaire à l'optimisation des schémas.
- Créer une base de schémas cinétiques multi carburant valides pour les conditions standard.
- Capacité à créer rapidement des schémas adaptés aux points de fonctionnement (haute pression, haute température) de configurations industrielles à calculer.

La version actuelle la plus avancée (EPORCK V1.9) est disponible avec un manuel [75] détaillant l'architecture générale ainsi que la mise en oeuvre d'une optimisation. Après de nombreux tests, une distribution avec une paramétrisation par défaut est proposée afin de diminuer le temps nécessaire à la prise en main de l'outil. Les fichiers d'entrée utilisent une présentation par mot-clefs des données et paramètres à spécifier, là encore afin d'améliorer l'ergonomie générale de l'outil. On peut noter aussi l'existence de versions spéciales. Elles sont spécifiques à certaine configuration ou études particulières et utilisent un code évaluateur différent de PREMIX. On peut citer une version dédiée à l'auto-allumage (EPORCK SENKIN) pour la combustion séquentielle[144] ou réchauffe, ou encore une version spécialement modifiée pour la combustion dans un moteur à piston[140], afin de prendre en compte correctement l'influence des variations importantes des conditions de température et pression lors du cycle de combustion.

Les perspectives de développement sont multiples. En premier lieu le code est facilement parallélisable. En effet, les évaluations des individus de la population courante peuvent se faire indépendamment. On peut alors distribuer l'exécution des évaluations, réduisant notablement le temps de restitution. On peut s'attendre à une accélération parallèle¹⁴ quasi linéaire. En effet, le coût de

¹⁴speed up

l'évaluation est prépondérant, et le coût de chaque évaluation constant. Le coût de la parallélisation se situant essentiellement dans la synchronisation des groupes d'évaluation.

Les versions développées utilisent une licence PREMIX V3.6 mono poste pour l'évaluation des solutions. Dans ce contexte, la parallélisation de l'évaluation implique soit de souscrire une licence multi postes, soit plus raisonnablement de changer pour un code d'évaluation libre de droits, au code source disponible. Ceci nécessite de revoir le couplage entre le code génétique et le code évacuateur.

La multiplicité des configurations nécessite parfois de modifier la version courante, pour s'adapter aux besoins spécifiques. Il serait intéressant de pouvoir capitaliser ces développements annexes pour les intégrer à la version courante.

La capacité mutli-objectifs d'EPORCK devrait être mieux exploitée. En effet, un simple triage des solutions à chaque génération permettrait de déterminer l'ensemble des solutions non dominées (Sec. 3.3.6) à chaque génération. Ceci permettrait de s'affranchir d'une pondération \mathbf{W}^c éventuellement mal ajustée. En effet en connaissant à la fin du calcul, un ensemble de solutions non-dominées, on dispose de solutions potentiellement satisfaisantes. Cette fonction peut éviter un cycle d'optimisation supplémentaire.

Chapitre 4

Présentation du brûleur ECPmod et moyens expérimentaux

4.1 Contexte de l'étude

Les travaux menés dans cette étude ont pour objectif d'améliorer la capacité de prédiction des outils de simulation numériques, et la compréhension des phénomènes intervenant dans le fonctionnement des turbines à gaz. Avec le durcissement régulier des normes environnementales lors de ces vingt dernières années, des efforts importants ont été entrepris par les constructeurs pour améliorer les performances de leurs produits. Ces efforts se sont portés principalement sur les technologies permettant de développer de nouvelles chambres de combustion satisfaisant aux niveaux d'émissions prescrits. Les normes s'imposent différemment suivant les domaines d'activité incluant un processus de combustion. Leur sévérité tient compte de la part de pollution du secteur dans la quantité globale de polluants émis. Elles tiennent aussi compte des contraintes technologiques. On voit donc les turbines légères (hélicoptères) dont la conception n'est que faiblement contrainte par le respect de normes environnementales, et des turbines terrestres (**TT**) de production électrique, fortement pressées d'améliorer leur performance sur ce point. Ces normes imposent une limitation des émissions d'oxydes d'azote (NO_x) mais portent aussi sur le monoxyde de carbone (CO) et les hydrocarbures imbrûlés (HI) et oxyde de soufre (SO_2). Le cas des chambres de combustion de TT est assez singulier puisque les normes antipollution ont conduit à l'introduction de technologies nouvelles pour les satisfaire. Nous nous concentrons sur les technologies développées pour les turbines terrestres. En effet, les contraintes portant sur les turbines mobiles (turboréacteurs et turbopropulseurs principalement) sont particulières. On conçoit aisément que poids et encombrement ne soient pas des contraintes premières pour les TT. Par contre des contraintes comme les coûts de maintenance et fiabilité, sont pour les deux secteurs d'application un élément influençant fortement le dessin et l'intégration des chambres.

TAB. 4.1 – Emissions maximales acceptées pour les TT (>50MW) en $mg/Nm^3@15\%O_2$. Source : Directive Européenne 2001/80/CE.

	Gaz		Liquide
SO_2	35		5
NO_x	Gaz Naturel 50 (75 si $\eta_{th} > 75\%$)	Autre Gaz 120	120

On peut noter que les normes environnementales s'appliquant aux TT sont particulièrement sévères. (Tab. 4.1) Ceci a amené les constructeurs de TT, tout en conservant leur gamme existante, à modifier en profondeur les chambres de combustion. Dans un premier temps, ils ont tenté de conserver les modes de combustion existant, et d'y ajouter une injection d'eau ou de vapeur afin de limiter la température de flamme. Cette technologie est efficace car elle permet d'abaisser les émissions NO_x de l'ordre de 50%. Ainsi faisant, on a pu respecter les normes, au prix, il est vrai d'un certain nombre de concessions, car cette technique a de nombreux défauts. Il faut disposer en particulier d'une eau particulièrement pure et la déminéraliser pour éviter tout dépôt dans la turbine. Ceci induit une augmentation des coûts d'exploitation et maintenance. De plus, cette technique n'est pas applicable aux turbines mobiles. Les normes se renforçant encore, les constructeurs de turbine ont dû revoir le mode de combustion de leurs produits. D'une manière générale, toutes les marques ont alors adopté le principe de la combustion prémélangée pauvre. De cette façon, on arrive à obtenir un compromis permettant de produire peu de NO_x , par des températures basses et peu de CO par une température suffisante (Fig. 4.1). À ces deux tendances contradictoires à concilier, viennent s'ajouter les HI qui sont le produit d'une combustion riche ou d'un mauvais mélange. De plus, si l'apparition des suies est fortement conditionnée par le type de carburant, elle se produit principalement en combustion riche. Comme on le voit, le compromis se situe dans les régimes pauvres prémélangés.

Si le mode de combustion prémélangée pauvre est maintenant commun à toutes les TT modernes, on constate néanmoins que chaque marque a développé des intégrations particulières. Les technologies spécifiques portent surtout sur le mode d'injection. En effet, le contrôle de la stabilité de flamme est essentiel dans le régime pauvre où la stabilité de la flamme est marginale. Les brûleurs doivent parfois intégrer un système stabilisant comme par exemple une flamme pilote (flamme de diffusion), ou une injection de carburant étagée qui permet d'ajuster la distribution de richesse du prémélange, et ainsi moduler la forme et position de la flamme dans la chambre. La qualité du mélange détermine aussi les performances en termes d'émissions polluantes de la TT. Là encore, on

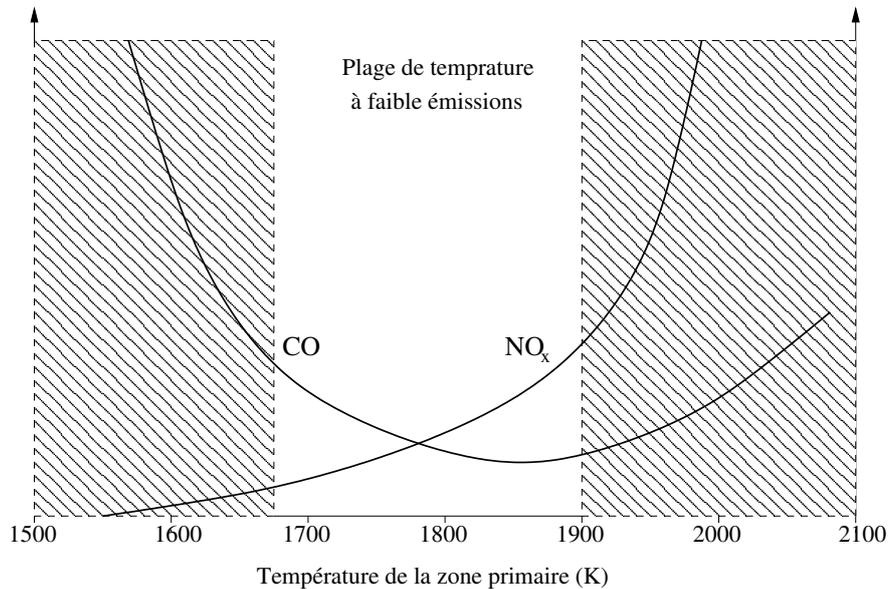


FIG. 4.1 – Courbes de tendance des émissions NO_x et CO en fonction de la température de flamme

peut dégager une tendance dans les choix technologiques. Le dessin des chambres prévoit des modes de combustion en fonction de la charge et parfois même des injecteurs dédiés aux faibles ou pleines charges. Nous nous concentrons ici sur la technologie développée par ABB puis ALSTOM puisque le brûleur considéré dans cette étude voit son dessin directement inspiré du design *EV burner*. Ce brûleur est l'un des éléments composant le concept de combustion séquentielle. Le concept ALSTOM est assez singulier car il met en oeuvre deux chambres en tandem, pour une combustion alors dite séquentielle. Cette technologie n'a été mise en oeuvre que pour les plus grosses TT de la gamme (GT-24 et GT26). Elles sont capables de fournir une puissance électrique de l'ordre de 200 à 250 MW. Grâce à une pression étonnamment élevée pour des TT (30 bar), les GT24-26 sont capable de fournir cette puissance de l'ordre d'un tiers de tranche nucléaire avec une emprise au sol comparable à celle d'un bus.

4.1.1 Combustion séquentielle

Efficacité du cycle de Brayton idéal

Considérons un cycle de Brayton idéal (Fig. 4.2). On fait alors l'hypothèse que la compression 1-2 ainsi que la détente 3-4 sont isentropiques. On néglige les pertes de charge en particulier au niveau de la chambre de combustion. On peut estimer alors le travail fourni par une turbine traversée d'un débit \dot{m} comme étant la différence entre le travail absorbé par le compresseur et le travail fourni

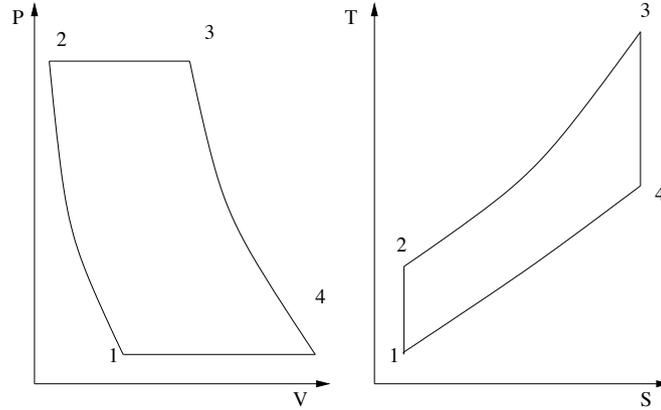


FIG. 4.2 – Diagrammes de Clapeyron et T-S pour le cycle de Brayton idéal.

par la turbine¹ :

$$\dot{W} = \dot{m} [(h_3 - h_4) - (h_2 - h_1)] \quad (4.1)$$

Considérant un gaz parfait à C_p constant on a $p_2/p_1 = p_3/p_4 = \pi_c$ et $T_2/T_1 = T_3/T_4 = \tau_c$ et l'Eq. 4.1 donne :

$$\dot{W} = \dot{m} C_p \left[T_3 \left(1 - \frac{1}{\tau_c} \right) - T_1 (\tau_c - 1) \right] \quad (4.2)$$

On peut déterminer le rapport de températures τ_c pour maximiser \dot{W} . En résolvant $d\dot{W}/d\tau_c = 0$, on trouve :

$$\tau_c^{opt} = \sqrt{\frac{T_3}{T_1}} \quad (4.3)$$

On détermine alors, le taux de compression π_c^{opt} correspondant en supposant le processus isentropique :

$$\begin{aligned} \pi_c^{opt} &= (\tau_c^{opt})^{\gamma/(\gamma-1)} \\ &= \left(\frac{T_3}{T_1} \right)^{\gamma/2(\gamma-1)} \end{aligned} \quad (4.4)$$

En réinjectant Eq. 4.3 dans Eq. 4.1 on obtient :

$$\dot{W}^{opt} = \dot{m} C_p \left(\sqrt{T_3} - \sqrt{T_1} \right)^2 \quad (4.5)$$

qui est fonction croissante² de la température T_3 d'entrée de la turbine haute pression (**THP**).

¹Le mot turbine sert à la fois à désigner le système complet et la turbine de détente

² T_1 correspondant à la température ambiante est considérée fixe.

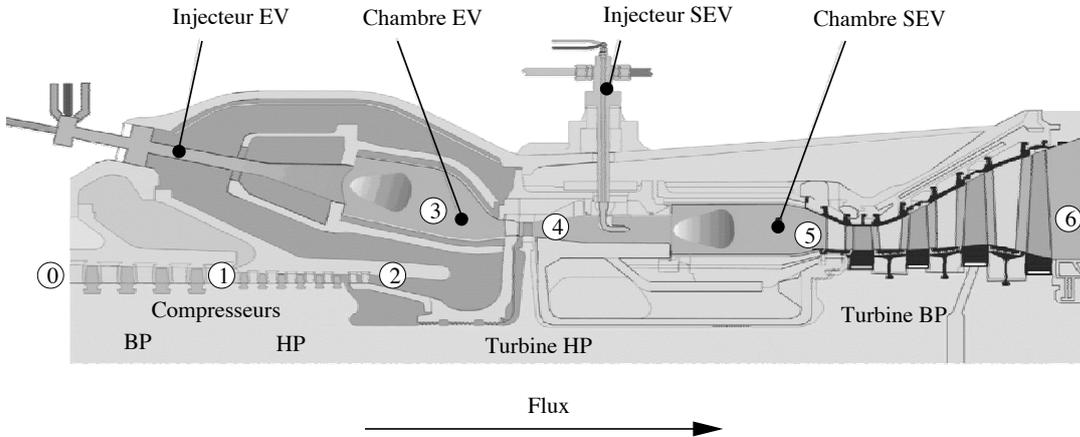


FIG. 4.3 – Organisation de la combustion séquentielle. Les stations numérotées se reportent à Fig. 4.4

Le rendement d'une turbine, qui correspond au rapport de la puissance disponible sur arbre et de l'énergie extraite du carburant est aussi une fonction croissante de T_3 :

$$\begin{aligned}
 \eta &= \frac{(h_3 - h_4) - (h_2 - h_1)}{h_3 - h_2} \\
 &= \frac{h_3(1 - h_4/h_3) - h_2(1 - h_1/h_2)}{h_3 - h_2} \\
 &= 1 - \frac{T_4}{T_3} \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

Pour obtenir plus de travail à débit donné ou augmenter le rendement dans un cycle de Brayton classique, il faut augmenter la température d'entrée THP, T_3 . Dans la pratique l'augmentation de T_3 est limitée par la capacité de la THP à supporter les hautes températures. On utilise alors une part importante du flux froid³ pour abaisser la température des gaz brûlés avant leur entrée dans la THP.

Combustion séquentielle

Le concept ALSTOM de combustion séquentielle modifie le cycle de Brayton afin de pouvoir extraire le maximum de travail possible ($W_{THP} + W_{TBP}$ sur Fig. 4.4), maximiser le rendement, tout en conservant des températures d'entrée turbines relativement basses. Ce faisant, on augmente la durée de vie des disques de turbines et la fiabilité globale, d'où, une réduction de coût de maintenance

³flux d'air qui ne sert pas de comburant, mais au refroidissement de la chambre.

et d'exploitation. La figure 4.3 illustre le concept, tandis que Fig. 4.4 expose le cycle de Brayton modifié par la combustion séquentielle. Un tel cycle thermodynamique n'est pas sans rappeler celui du turboréacteur avec post-combustion avec une différence notable au niveau du placement de la THP. La turbine dispose de deux chambres de combustion annulaires entre lesquelles s'intercale la THP. L'air comprimé (0-1-2) sortant du compresseur (~ 30 bar) passe par une première chambre équipée du brûleur EV qui utilise une partie du flux d'air pour alimenter la combustion. À pleine charge environ 60% du carburant est consommé dans cette chambre. Le flux servant au refroidissement et à la dilution est mélangé aux gaz brûlés. Le flux sortant de la chambre EV est détendu dans la THP (3-4). Les gaz perdent environ $1000K$ et la pression chute à $15bar$. Le mélange arrivant à la seconde chambre (**SEV**) est composé de gaz vicié (CO, CO_2, H_2O) mais aussi d' O_2 . On réinjecte du carburant en amont de la chambre SEV. Le mélange étant alors à une température de l'ordre de $1200K$, s'auto enflamme plus en aval dans la chambre SEV (4-5). Les gaz ainsi réchauffés, sont alors détendus (5-6) à travers les étages de la turbine basse pression (**TBP**).

Un tel système présente quelques inconvénients. En premier lieu il est plus complexe et donc plus coûteux qu'un système à chambre unique. En second lieu, l'introduction d'une deuxième chambre rallonge la turbine⁴. Néanmoins, comme on le voit sur Fig. 4.3 une intégration de la chambre SEV autour du compresseur haute pression permet de conserver une longueur standard. Néanmoins en maîtrisant la combustion séquentielle on est à même de contrôler les températures d'entrée des turbines de détente, contribuant ainsi à leur longévité. Malgré des températures d'entrée turbine modestes, la modification du cycle de Brayton permet d'atteindre un rendement élevé.

Comme on l'a vu, le mode de combustion par auto-inflammation [144] du SEV est assez particulier et ne sera pas traité ici. Le brûleur EV (**BEV**) retient ici toute notre attention. Ce brûleur équipe la majeure partie de la gamme des turbines à gaz ALSTOM. Sa mise au point a débuté en 1987. Dès 1990, une chambre de type silo est rééquipée de 37 BEV (GT11N, 113MW) obtenant un prometteur 13 ppmv d'émission NOx (charge normale, $\pi_c = 12.5bar$). Par la suite, il a été intégré dans des chambres annulaires des GT13E (165MW) en 1993 puis plus récemment sur les puissantes GT24/26 (265MW). L'objectif était de développer non seulement un brûleur permettant de répondre aux exigences des normes anti-pollution (en particulier les NOx), mais aussi de maximiser l'efficacité de combustion et la densité d'énergie. Le module EV a déjà accumulé plusieurs centaines de milliers d'heures de fonctionnement.

⁴plus qu'un problème d'encombrement, la longueur des arbres doit être minimisée (flambage, vibration etc.)

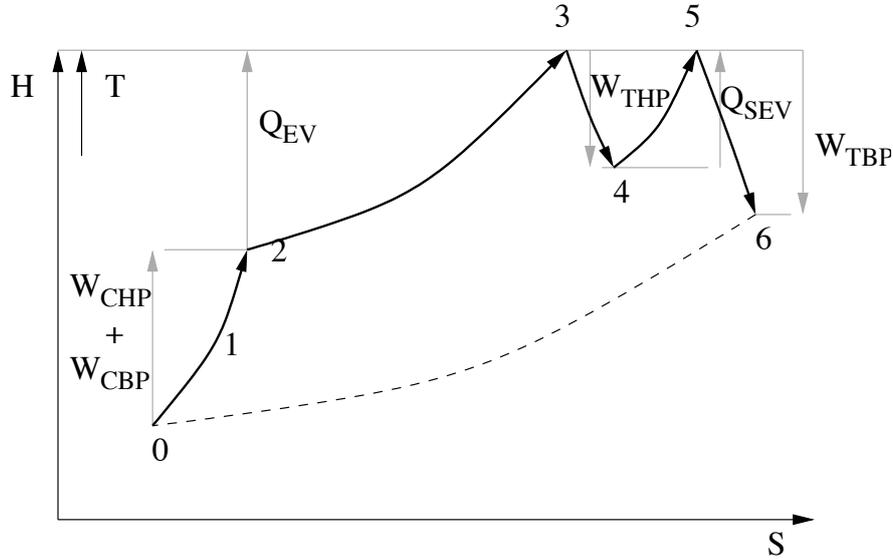


FIG. 4.4 – Diagramme Enthalpie-Entropie du cycle de Brayton modifié représentant le concept de combustion séquentielle.

Le module de brûleur EV

Comme la plupart des brûleurs modernes, le BEV est du type vrillé. Pour ces brûleurs, le principe général de stabiliser les flammes à l'aide de zone de recirculation (**ZdR**) est conservé. Les gaz brûlés à haute température sont ainsi mis au contact des gaz frais provenant de l'injecteur. Les gaz frais sont alors soumis à un flux de chaleur quasi continu qui permet leur inflammation. De la stabilité des ZdR dépend donc en partie la stabilité de la flamme. Les ZdR ne sont pas générées ici par le sillage d'un accroche flamme ou uniquement par un élargissement brusque. Néanmoins, l'élargissement brusque couplé à la mise en rotation de l'écoulement permet de créer des topologies fluides complexes. Plusieurs régimes d'écoulement sont possibles et sont communément classifiés à l'aide du nombre de swirl (Eq. 4.7) qui compare le flux axial de moment cinétique au flux axial d'impulsion :

$$S_w = \frac{\int_0^\infty \rho u_x u_\theta r^2 dr}{R \int_0^\infty \rho u_x^2 r dr} \quad (4.7)$$

Avec R , rayon du tube de courant.

Le régime présentant un éclatement fort est privilégié. On l'obtient pour des $S_w > 0.6$. Il présente alors une ZdR centrale et une ZdR périphérique comme l'illustre Fig. 4.5. Ces ZdR agissent alors comme le sillage des accroches flammes. La formation de la ZdR centrale est suspendue au maintien de l'équilibre entre les forces issues du gradient de pression radial et la force centrifuge s'appliquant

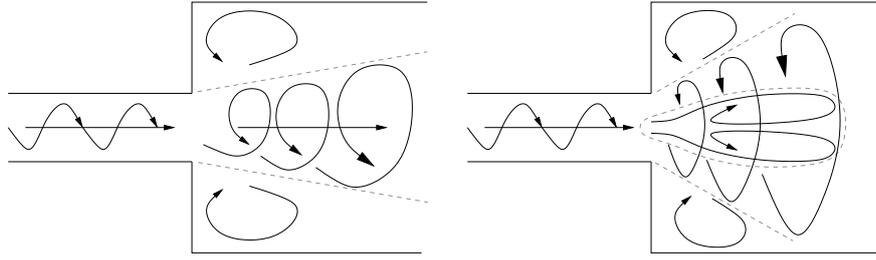


FIG. 4.5 – Topologies d'un écoulement vrillé débouchant en cavité : Gauche - Régime sous-critique $S_w < 0.6$. Droite - Régime d'éclatement tourbillonnaire $S_w > 0.6$.

sur les particules fluides en rotation :

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\rho u_\theta^2}{r} \quad (4.8)$$

où r est la distance radiale à l'axe et u_θ la vitesse azimutale. L'élargissement brusque, induit par conservation du moment cinétique un ralentissement de la rotation du fluide. La diminution du gradient de pression radial en aval de la marche induit un gradient adverse de pression axial. Si celui-ci est suffisamment prononcé, une ZdR centrale se forme sur l'axe de rotation. On peut alors voir apparaître une structure tourbillonnaire spécifique. Le noyau tourbillonnaire déstabilisé par l'élargissement orbite autour de la ZdR centrale, formant un filament tourbillonnaire s'enroulant hélicoïdalement autour de la ZdR centrale. Cette structure est mieux connue sous son nom anglo-saxon de PVC (Precessing Vortex Core). Plus de détails sur la variété des topologies des écoulements vrillés, sont disponibles dans [70] et [129].

La stabilisation de la flamme entre plusieurs ZdR permet de confiner la flamme. Il permet ainsi d'obtenir des flammes extrêmement compactes à forte densité d'énergie. Les forts cisaillements induits dans l'écoulement rendent le mélange des réactants particulièrement efficace. À sa décharge cette technique implique des géométries d'injection assez sophistiquées, puisqu'il est nécessaire de mettre en rotation forte les gaz frais. Néanmoins, ses qualités intrinsèques font que l'injection vrillée est maintenant un standard pour la turbine à gaz fixes ou mobiles.

Dans le cas du BEV, son dessin se démarque des solutions habituelles qui consistent à faire passer le flux provenant du diffuseur⁵ à travers un aubage afin de le mettre en rotation. Le BEV est composé de demi-cônes d'axes décalés par rapport à l'axe de symétrie (Fig. 4.6). Deux fentes diamétralement opposées se dévoilent alors pour permettre à l'air de pénétrer le système. Sur les lèvres des fentes sont disposés des trous d'injection de gaz alimentés par deux circuits de

⁵le diffuseur s'intercale entre la sortie du compresseur et la chambre de combustion.

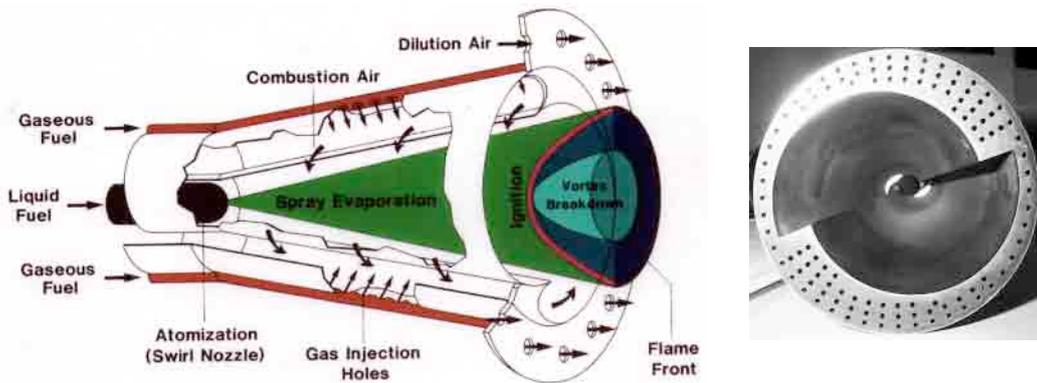


FIG. 4.6 – Schéma du brûleur EV.

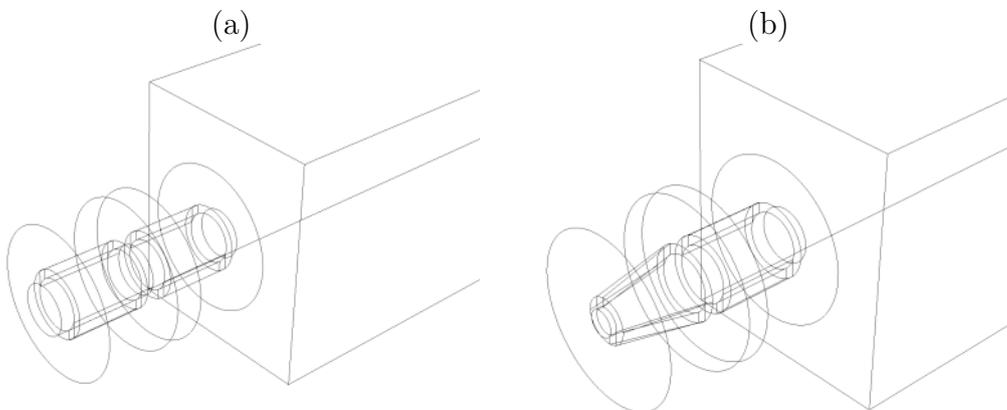


FIG. 4.7 – a) ECPcyl ,b) ECPcone.

carburant distinct, permettant ainsi l'étagement de la carburation. De plus, une lance montée à l'apex du cône, permet l'injection de carburant liquide ou gazeux. Bien que plus long qu'un module d'injection classique, le BEV est plus simple à fabriquer. De plus, la flamme reste relativement confinée et n'est en contact avec aucune paroi. Ainsi, en pratique seule la base du cône, exposée est refroidie par soufflage d'air. Ceci permet de notables simplifications du système de refroidissement du BEV lui-même mais aussi de la chambre. La diminution des charges thermiques diminue d'autant la fatigue des matériaux du brûleur.

4.2 Description de la configuration ECP

Désirant se doter d'un brûleur générique expérimental aux caractéristiques proches du BEV, la conception s'est déroulée en deux phases. La conception menée par l'EM2C, a tout d'abord identifié les particularités devant être intégrées au dessin. Premièrement, le système de vrillage de l'air par injection tangentielle est conservé. En deuxième lieu, on conserve la capacité d'étager la carburation.

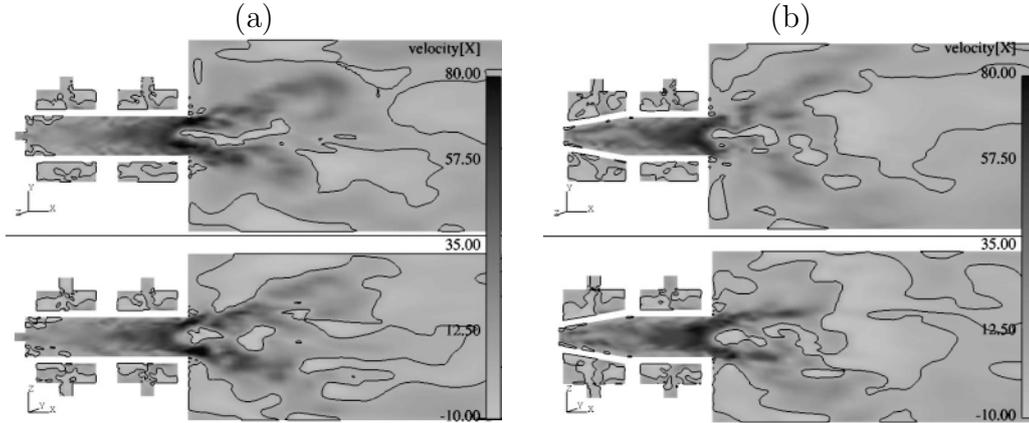


FIG. 4.8 – Coupes longitudinales de vitesse axiale moyenne, — : iso- $u=0$. (a) ECPcyl , (b) ECPcone.

Pour ce faire, le principe de deux injecteurs montés en tandem est retenu. Le dessin initial propose l'alternative entre deux configurations proches, ECPcyl et ECPcone (Fig. 4.7). ECPcyl est formé de deux éléments de vrille identiques formant un tube d'injection de diamètre constant. Tandis que ECPcone est un assemblage d'un élément de vrille conique et d'un élément cylindrique. Ce dernier étant sensé représenté plus fidèlement la géométrie du BEV. Néanmoins, au vu de la complexité de construction accrue modèle ECPcone, sa construction doit se justifier par une différence notable de l'écoulement entre les deux configurations. Des calculs aérodynamiques sur maillage grossier ont rapidement été mis en oeuvre au CERFACS afin d'épauler le choix entre les deux modèles. Les calculs n'ont montré que des différences mineures sur les champs de vitesses, en particulier sur le positionnement des ZdR (Fig. 4.8). Ces calculs ont alors permis d'écarter la configuration ECPcone, qui, malgré un dessin à complexité accrue, n'enrichissait pas la phénoménologie du brûleur (Fig. 4.8).

4.2.1 Dessin révisé : brûleur ECPmod

La poursuite des calculs à froid sur le brûleur ECPcyl a mis en évidence des incursions intermittentes de la ZdR centrale dans le tube d'injection. Le brûleur devant fonctionner en prémélange parfait, la sécurité du dispositif fut mise en doute. En effet, la remontée de poches de prémélange allumées, peut endommager gravement le système. L'ajout d'un port d'injection axiale d'air en fond d'injecteur a été réalisé. Cette modification est censée empêcher la remontée d'éventuelles poches de prémélange par la ZdR centrale. Les calculs LES confirmeront cette amélioration, donnant le feu vert à la construction du brûleur ECPmod et de sa chambre à section carrée (Fig. 4.9).

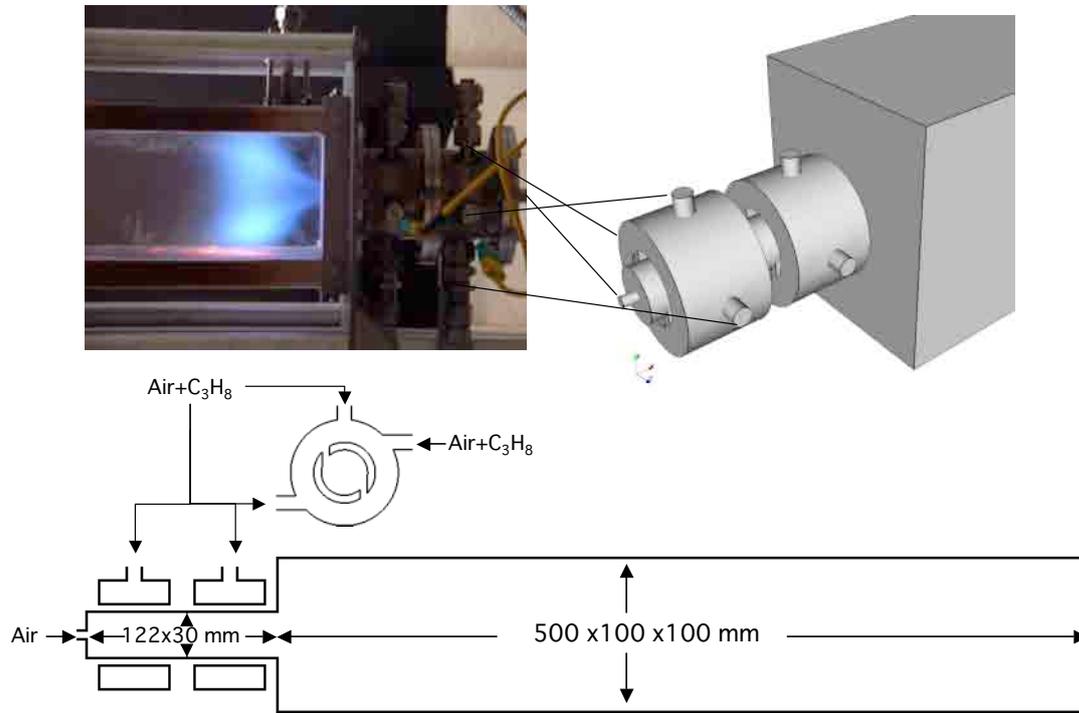


FIG. 4.9 – Configuration du brûleur prémélangé à injection étagée ECPmod.

4.2.2 Etagement de l'injection carburant

Le brûleur ECPmod dispose comme le brûleur EV, d'une capacité d'étager l'injection de carburant le long du tube de d'injection (ou cône de mélange pour le EV). Cette spécificité permet de piloter la distribution de richesse du prémélange avant son arrivée dans la zone de combustion. Ceci a pour effet théorique de modifier à la fois la forme et la position de la flamme. En jouant sur le taux d'étagement du carburant, on agit ainsi sur la marge de stabilité du brûleur [124]. Néanmoins, on note un effet moins franc de l'étagement sur ECPmod que sur EV. Comme on peut le constater sur Fig. 4.10, la modification de l'étagement sur EV provoque un changement notable de la position de stabilisation de la flamme. Dans le cas de l'ECPmod la position de la flamme ne change quasiment pas. On note tout de même qu'en augmentant l'étagement, on voit la flamme pénétrer plus en amont dans le tube d'injection ($\alpha > 50\%$).

Les deux vrilles à alimentation indépendante sont montées en tandem. Le débit d'air principal est divisé en deux parts égales vers les plenums des vrilles (Fig. 4.11a). Le débit d'air \dot{m}_{air} des vrilles est donc fixe. L'injection axiale quant à elle reçoit un débit de l'ordre de $\dot{m}_{ax} = \dot{m}_{air}/40$ soit environ 10% du débit passant à travers une fente de vrille. Le débit de propane injecté par chaque vrille est déterminé par le taux d'étagement α qui spécifie la part de carburant affectée

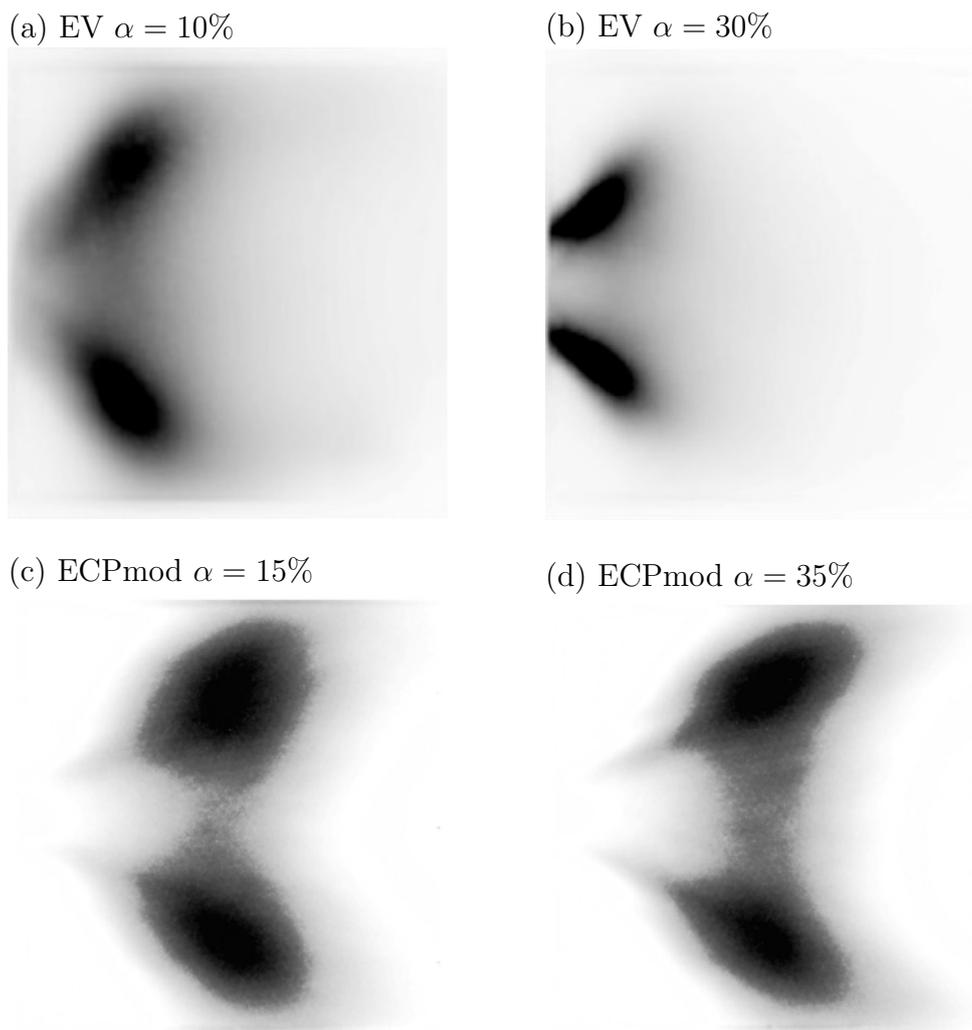


FIG. 4.10 – Influence de l'étagement de carburant sur la topologie de flamme, Emission spontanée OH. ligne 1 : EV, ligne 2 : ECPmod. **Min** **Max** (mesures DLR-Ecole Centrale Paris)

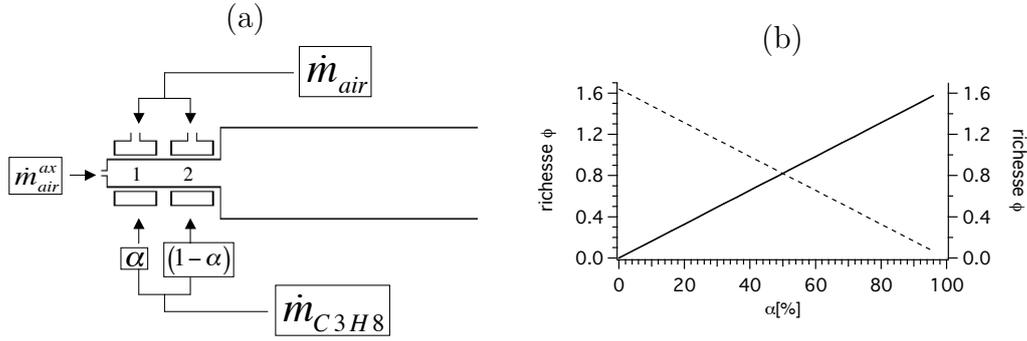


FIG. 4.11 – Etagement de l'injection de carburant. a) schéma de distribution des flux. b) Evolution de la richesse de prémélange en fonction de l'étagement α ($\phi_g = 0.82$). — vrilles 1, ---- vrilles 2.

à chaque vrilles :

$$\dot{m}_{F,1} = \alpha \dot{m}_F \quad (4.9)$$

$$\dot{m}_{F,2} = (1 - \alpha) \dot{m}_F \quad (4.10)$$

où \dot{m}_F est le débit total de carburant injecté et $\dot{m}_{F,1}$ et $\dot{m}_{F,2}$ les débits de carburant affectés respectivement à la vrilles 1 et 2 (Fig. 4.11a). On peut déterminer la richesse globale du système dès lors qu'est fixé le débit d'oxydant⁶ \dot{m}_O :

$$\phi_g = s \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O} \quad (4.11)$$

où s est le coefficient stœchiométrique défini comme le rapport de la masse d'oxygène nécessaire pour une combustion complète d'une masse de combustible donné. s vaut 3.63 pour le couple propane/oxygène. La richesse du prémélange injecté par chaque vrilles (Fig. 4.11b) est alors déterminée par :

$$\phi_{g,1} = \frac{\alpha \dot{m}_{F,1}}{\dot{m}_O/2} \quad (4.12)$$

$$= 2\alpha \phi_g$$

$$\phi_{g,2} = \frac{(1 - \alpha) \dot{m}_{F,1}}{\dot{m}_O/2} \quad (4.13)$$

$$= 2(1 - \alpha) \phi_g$$

⁶on considère que l'oxygène occupe 21% d'un volume d'air ou en représente 30% en masse.

Chapitre 5

Calculs LES stables

5.1 Validation des calculs non-réactifs

5.1.1 Objectifs des calculs non-réactifs

L'objectif principal de cette série de calculs non-réactifs est de valider la capacité prédictive de l'aérodynamique du brûleur ECPmod par le code AVBP. En effet, les mesures expérimentales de vélocimétrie nécessitent des outils et méthodes de pointes. Il est par contre moins difficile d'effectuer des mesures sur un écoulement non-réactif, que sur le brûleur en fonctionnement. La plupart des méthodes de vélocimétrie modernes utilisent des lasers illuminant des traceurs qui ensemencent l'écoulement. La présence d'une flamme a pour effet de brûler les particules et donc d'annuler le signal de mesure. La méthode de vélocimétrie par imagerie de particules, employée ici, ne peut donc opérer qu'à froid¹. Ces comparaisons mesures-calculs sont essentielles car elles permettent de confirmer le bien fondé des solutions mises en oeuvre. Elles permettent en outre, de mesurer quantitativement les effets des différents modèles disponibles, sur le résultat. On peut ainsi effectuer un choix qui tient compte à la fois des coûts de chaque modèle mais aussi de l'amélioration (ou de la dégradation) qu'ils induisent sur la solution. Les calculs à froid sont de toute manière un préalable à tout calcul réactif. Avant tout allumage numérique, on se doit de mener le calcul non-réactif à un niveau de convergence suffisant. Le calcul étant totalement explicite, l'obtention d'un état convergé, puis de statistiques stables a un coût non négligeable. Néanmoins c'est sur cette validation que s'assoit la confiance dans les résultats des calculs réactifs.

5.1.2 Données expérimentales

Les mesures expérimentales présentées ici ont été effectuées au laboratoire EM2C de l'école Centrale Paris par Nathalie Dioc, chercheur en thèse [27]. Les

¹En utilisant des particules d'oxyde de titane on peut opérer à chaud

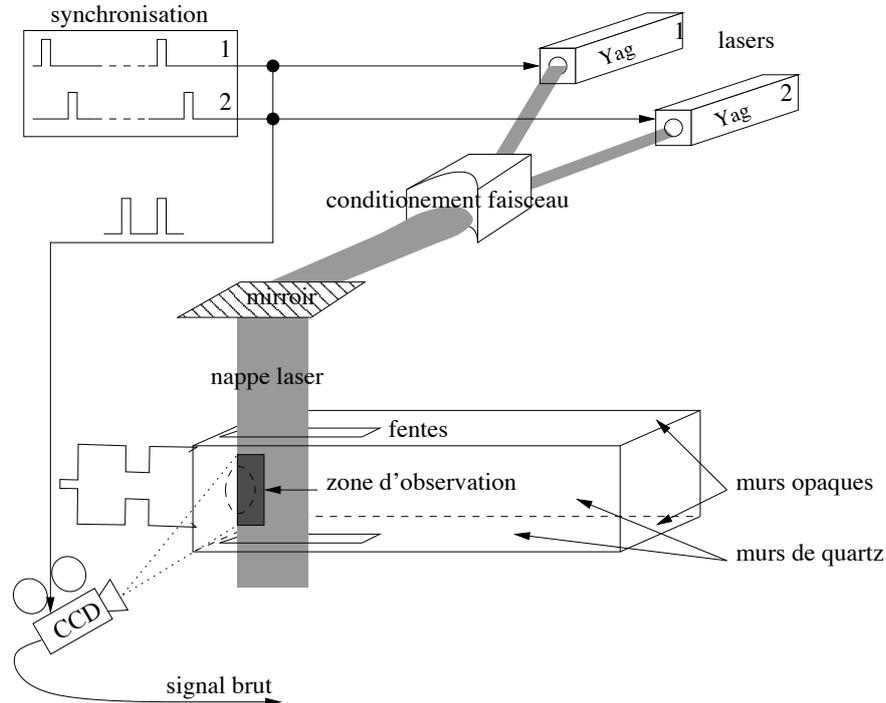


FIG. 5.1 – Schéma de principe du banc de mesure PIV sur la manipulation ECP-mod.

données disponibles sont de deux types. On dispose en premier lieu de mesures quantitatives du champ de vitesse projeté dans un plan longitudinal. Ces mesures sont détaillées et exploitées dans les paragraphes suivants. On dispose aussi de film de visualisation par tomographie laser. Ces films sont tournés à l'aide d'une caméra rapide, n'offrent qu'une information qualitative mais résolue en temps. On peut en particulier, visualiser l'apparition de tourbillons dans l'écoulement. L'écoulement uniforme chargé uniformément en particule apparaît en blanc, tandis que les particules prises dans les tourbillons sont centrifugées et migrent vers la périphérie de la structure tourbillonnaire. Ce mécanisme induit une latence entre la formation du tourbillon et sa détection par ce procédé. Néanmoins ces films ont pu permettre de déterminer la fréquence de rotation du PVC²Precessing Vortex Core.

Vélocimétrie par imagerie de particule

Cette méthode de vélocimétrie, est habituellement dénommée par son acronyme anglo-saxon PIV (Particle Image Velocimetry). La technique PIV utilisée ici, permet d'obtenir des champs de vitesse bidimensionnels dans un plan. La PIV nécessite l'ensemencement de l'écoulement par des particules. Elles sont sup-

posées être assez fines et légères ($St \ll 1$) pour ne pas influencer l'écoulement et se comporter comme des traceurs. Le principe général repose sur un traitement d'images qui, en corrélant deux images successives, est capable d'estimer le déplacement des particules entre les deux prises de vue. Connaissant le temps séparant les prises des deux images, on en déduit un champ de vitesse. Ce champ de vitesse est considéré comme instantané, car on a pris soin de sélectionner une fréquence d'échantillonnage suffisante. En effet, afin de pouvoir corrélérer efficacement les images, il est nécessaire de faire les prises de vues à des temps assez rapprochés. Les champs de vitesse obtenus sont bidimensionnels, on ne dispose pas de la composante normale au plan de mesures.

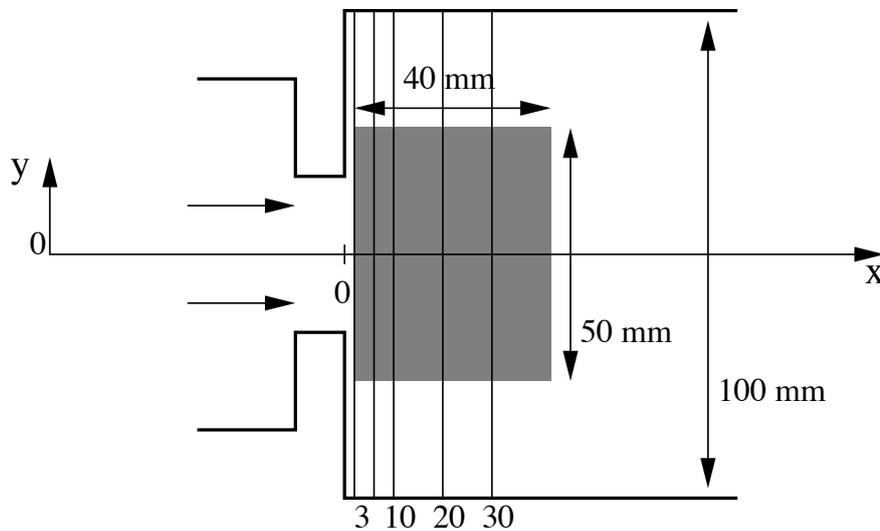


FIG. 5.2 – Schéma proportionné des positions de coupes : — lignes d'extraction des profils, ■ fenêtré de mesure PIV

Pour les présentes mesures, l'expérimentateur a utilisé deux lasers pulsés de type Nd :Yag (532 nm). Ces deux sources lasers permettent de générer une paire de pulses laser séparés de $20\mu s$, mais sans résolution en temps. C'est-à-dire que deux paires de pulses successives sont séparées d'un temps trop important pour pouvoir corrélérer les images entre chaque paire. Un système optique conditionne les faisceaux lasers en une nappe plane traversant la chambre dans un plan médian (Fig. 5.1). La zone observée par la caméra qui recueille l'image à chacun des impulsions laser, est un rectangle de $50mm$ de hauteur pour $40mm$ de long (Fig. 5.2). Les mesures montrent des vitesses maximales de l'ordre de $30m/s$. Une particule parfaitement entraînée parcourt, entre deux impulsions, la distance maximale de $30 \times 20 \cdot 10^{-6}$, soit $0.6mm$. Les particules les plus rapides, parcoureront environ 1% de la fenêtré de mesure. L'ensemencement utilise de la fumée d'huile introduite par les injections de carburant.

Les mesures ont été effectuées à pression et température ambiante. Le débit volumique d'air et d'air ensemené (remplaçant l'injection de propane) est de

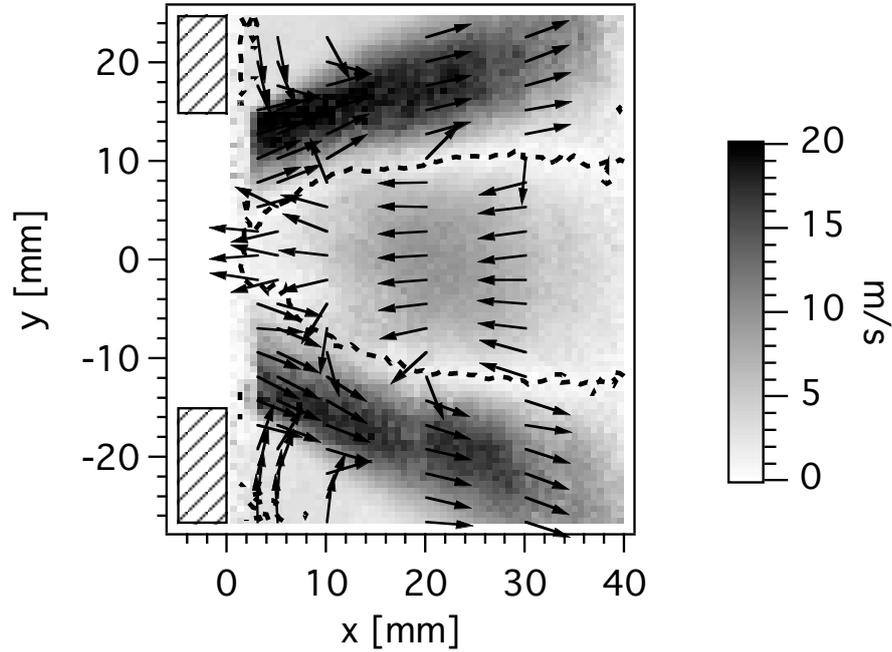


FIG. 5.3 – Mesures PIV : Magnitude de la vitesse moyenne dans le plan médian. Superposition des vecteurs vitesse mesurés aux sections de comparaison-expérience/numérique. - - - - iso-ligne $U = 0$.

$40Nm^3/h^3$. Dans ces conditions, la vitesse débitante à la sortie du tube d'injection est de $16m/s$. On peut calculer le nombre de Reynolds du jet du jet débouchant dans la chambre :

$$Re = \frac{U_c L_c}{\nu} \quad (5.1)$$

En prenant la vitesse débitante comme vitesse caractéristique U_c , le diamètre du tube d'injection comme longueur caractéristique L_c et la viscosité cinématique $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5}m^2/s$ on obtient un nombre de Reynolds de l'ordre de 32000. À ce régime, l'écoulement est pleinement turbulent. De plus on est autorisé à effectuer des corrections autosimilaires sur les profils de mesures afin de ramener tant les mesures expérimentales que celles extraites du calcul à un débit rigoureusement identique. Ce recalage se fait en estimant le débit à la sortie du tube d'injection. Pour cela, on fait l'hypothèse que le profil moyen de vitesse axiale est axisymétrique. On applique ensuite un facteur aux mesures correspondant au rapport du débit estimé et le débit cible de $40Nm^3/h$. Dans notre cas, les corrections n'ont pas dépassé 5%. La figure 5.3 présente la mesure du champ de vitesse moyenne. L'axe de coordonnées longitudinale (x) prend son origine en

³ Nm^3/h : normaux mètres cubes par heure, i.e. donnés à température et pression standard (293K, 101325Pa)

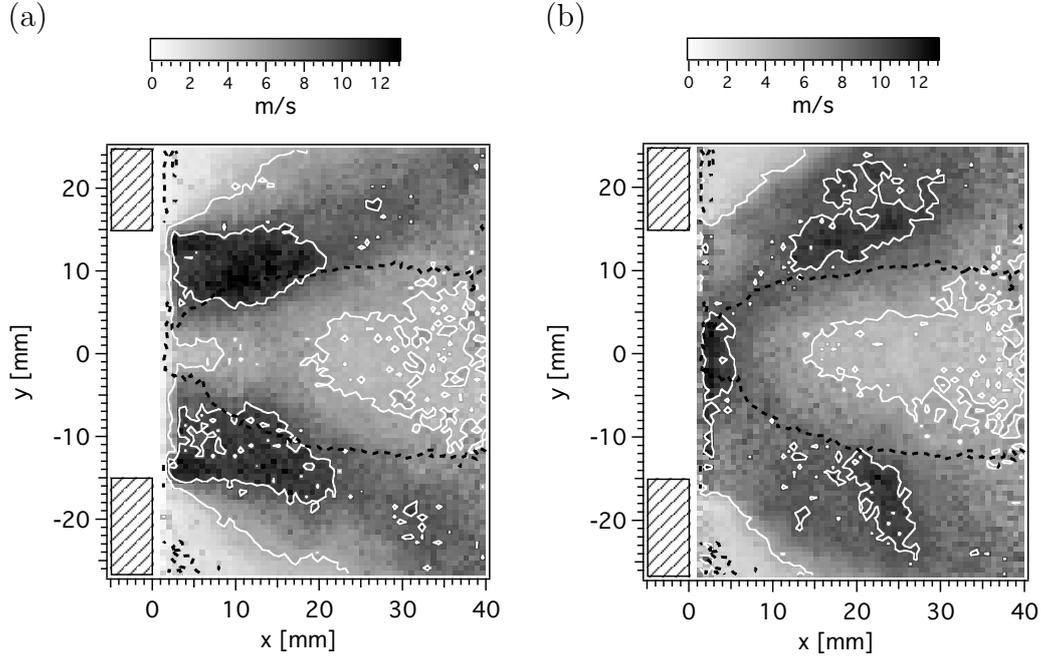


FIG. 5.4 – Mesures PIV : Moyennes de fluctuations quadratiques. (a) U^{rms} , (b) V^{rms} . - - - iso-ligne $U = 0$.

fond de chambre. On note bien évidemment l'absence de signal dans le tube d'injection, celui-ci étant opaque. On obtient un signal pleinement cohérent environ 3mm en aval du fond de chambre. La topologie d'un écoulement vrillé avec éclatement tourbillonnaire se retrouve bien sur cette fenêtre centrée sur la ZdR centrale. On a superposé les vecteurs vitesse afin de visualiser l'orientation locale de l'écoulement. On distingue clairement la forme de la ZdR centrale. Malheureusement la fenêtre de mesure ne s'étend pas assez en aval pour constater sa fermeture et en estimer sa longueur. En outre on peut estimer, en extrapolant ses limites, que de la ZdR centrale ne remonte qu'assez peu dans le tube d'injection, même si là encore l'absence de mesure ne nous autorise à être pleinement affirmatif. L'absence de mesure de vitesse azimutale, ne nous permet pas d'estimer le nombre de swirl (Eq. 4.7).

La centaine de champs instantanés fournis permet d'extraire une estimation du niveau de fluctuation absolue (Fig. 5.4) et relatif (Fig. 5.5) respectivement par (Fig. 5.4) :

$$U^{rms} = \sqrt{\overline{U^2} - \bar{U}^2} \quad (5.2)$$

$$U_{rel}^{rms} = \sqrt{\frac{\overline{U^2} - \bar{U}^2}{\bar{U}^2}} \quad (5.3)$$

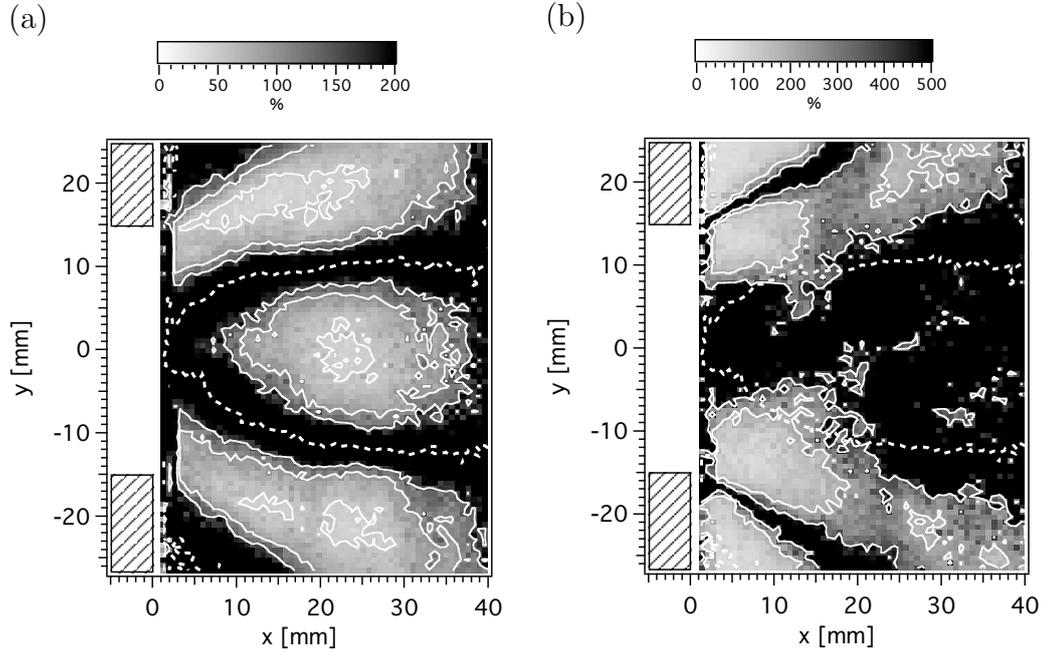


FIG. 5.5 – Mesures PIV : Moyennes de fluctuations quadratiques relatives. (a) U_{rel}^{rms} , (b) V_{rel}^{rms} . --- iso-ligne $U = 0$.

L'interprétation des champs U_{rel}^{rms} et V_{rel}^{rms} (Fig. 5.5) n'est pas aisée. En effet il faut écarter de l'analyse les zones où le dénominateur (\overline{U}^2 ou \overline{V}^2) est d'ordre inférieur aux fluctuations absolues. Pour U_{rel}^{rms} (Fig. 5.5a), on négligera l'information portant sur les ZdR périphériques et l'enveloppe de la ZdR centrale où comme on peut le constater sur Fig. 5.3, $\overline{U}^2 \simeq 0$. C'est paradoxalement là où situent les plus fortes fluctuations relatives que l'on doit négliger l'information ($U_{rel}^{rms} > 100\%$). En outre on observe un taux de fluctuation de plus de 50% sur la composante axiale, à la fois dans le jet et la ZdR centrale. Pour V_{rel}^{rms} (Fig. 5.5b), on négligera l'information portant sur la ZdR centrale car les vecteurs apposés sur Fig. 5.3 nous indiquent bien que dans cette zone, $\overline{V}^2 \simeq 0$. La partie explorée ici des ZdR périphériques se montre particulièrement stable avec un faible taux de fluctuation à la fois relatif et absolu (Fig. 5.5b et Fig. 5.4b). On distingue très distinctement la couche de mélange créée entre le jet éclatant et les ZdR périphériques. Cette couche de mélange se caractérise par un taux de fluctuations très élevé (Fig. 5.5b). On détermine ainsi clairement les limites du jet et permet d'estimer l'éclatement du jet à 50 degrés.

La figure 5.4 présente l'estimation du niveau de fluctuation absolu pour la composante axiale U et verticale V . On observe en premier lieu, que les ZdR centrales et périphériques présente le niveau de fluctuations plus faible que le jet éclaté et ce, sur les deux composantes. Sur la composante axiale, on remarque

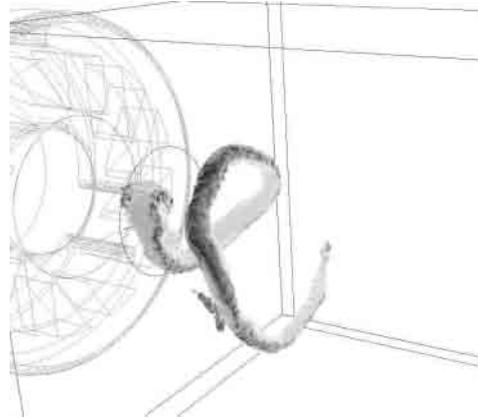


FIG. 5.6 – Visualisation par iso-surface de pression de la structure en simple hélice du PVC à la sortie d’un injecteur vrillé. Source [62]

une zone de fortes fluctuations à la base de l’éclatement du jet. Comme l’ont déjà fait les auteurs de [62] et [129], on peut émettre l’hypothèse que le passage du PVC⁴ est responsable de ces fluctuations. L’apparition d’un PVC est courante dans les écoulements vrillés éclatés (Sec. 4.1.1). En effet, au coeur du PVC, le gradient de pression axiale induit des vitesses remontantes, créant localement ainsi en son centre une fluctuation négative de vitesse axiale. Parallèlement, le blocage partiel de la section par le PVC induit, diamétralement opposées, des survitesses (conservation du débit, effet venturi). De la même manière, il semble que l’origine des trois zones de fortes fluctuations visibles sur V^{rms} (Fig. 5.4b) provient de l’interaction de l’écoulement principale avec le PVC. Le PVC précessant autour de l’axe longitudinal, son champ de vitesse propre induit des fluctuations de vitesse que l’on détecte proche de l’axe. Puis, lorsque le jet éclate, le PVC s’enroule hélicoïdalement autour de la ZdR centrale. Le plan de mesure longitudinal intercepte donc régulièrement le tourbillon du PVC. Les vitesses induites contribuent alors à créer des fluctuations dans le jet éclaté. Notons que dans notre cas, la structure du PVC se distingue du “tire-bouchon” (Fig. 5.6) observé dans [131],[62], par une structure en double hélice (Fig. 5.7) La mesure de la fréquence du mouvement du PVC trouve un bon accord entre les calculs LES et expérience : Sa mesure sur les films de tomographie rapide donne $400Hz$ tandis que les calculs LES fournissent la valeur de $370Hz$.

⁴Precessing Vortex Core

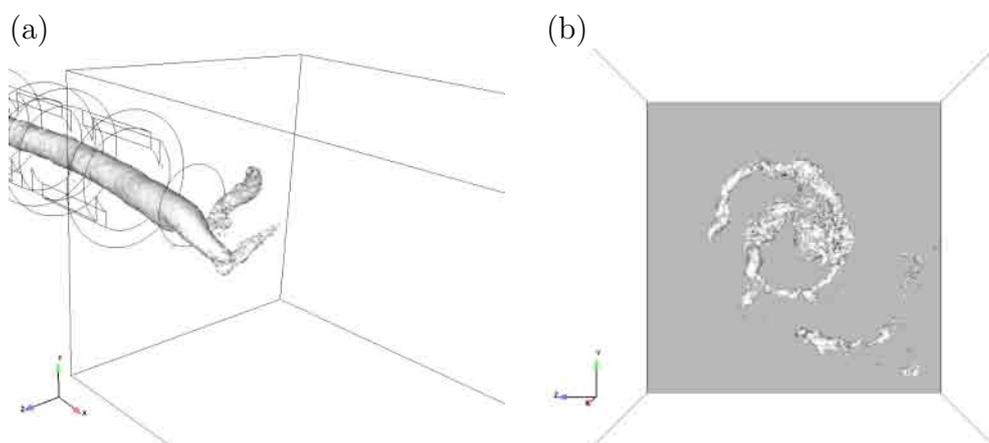


FIG. 5.7 – Visualisations de la structure en double hélice du PVC par une iso-surface de dépression, Calcul AVBP non-réactif.

5.1.3 Comparaisons LES/PIV

Nous présentons ici, des comparaisons quantitatives entre les mesures de vélocimétrie expérimentales et résultats des calculs LES. Ces comparaisons sont effectuées dans le même plan longitudinal ($z = 0$). On y extrait les profils de vitesses en cinq positions : $x = 3, 5, 10, 20, 30mm$ en aval de la sortie du brûleur comme le montre Fig. 5.2. Ces comparaisons, en plus vont permettre de valider nos paramètres numériques. On va pouvoir aussi répondre à deux questions :

- Est-ce que dans notre cas présent, l'utilisation d'un schéma spatial d'ordre élevé (TTGC) est elle indispensable ?
- L'utilisation des lois de parois (LdP) dans AVBP étant encore récente : Décèle-t-on, une différence significative sur le champ de vitesse lorsque l'on utilise les LdP par rapport à une condition d'adhérence aux parois classique ?

La première question se justifie par le coût non négligeable du schéma TTGC. On estime le surcoût dans l'utilisation de TTGC par rapport à Lax-Wendroff (LW) à un facteur de deux à trois. Par exemple, un calcul non-réactif avec deux espèces en TTGC coûte aussi cher (pour un nombre donné d'itérations) qu'un calcul réactif avec LW et 7 espèces. Pour ce qui est du traitement des parois, l'utilisation de LdP doit en principe augmenter la précision du calcul. Les maillages utilisés, ne résolvent pas ou très mal les couches limites, l'utilisation d'une condition d'adhérence est dans ce cas préjudiciable à la précision du calcul dans ces zones. L'utilisation de LdP doit en principe améliorer sensiblement l'estimation du frottement pariétal et donc des pertes de charges. Elles facilitent, aussi le passage du débit dans des tubes d'injection grossièrement discrétisé. Leur implémentation est par contre plus complexe en particulier dans le traitement des coins. Les LdP proposent des raffinements qui sont absents dans la condition de murs non glissants. En particulier elles incluent une modélisation de la couche limite thermique, autorisant ainsi le calcul précis du flux thermique pariétal en fonction de la nature et l'épaisseur du mur. Le surcoût de calcul des LdP est minime, si l'on écarte le calcul initial des distances la paroi. Pour ces raisons, nous souhaitons pouvoir les utiliser dans les calculs réactifs.

Nous présentons ici les résultats de trois calculs :

- Calcul avec le schéma Lax-Wendroff et LdP
- Calcul avec le schéma TTGC et LdP
- Calcul avec le schéma TTGC et Murs non-glissants.

on note bien que toutes autres conditions sont égales par ailleurs :

- Même maillage d'éléments tétraédriques de 240000 noeuds.
- Hors parois, mêmes conditions limites. Des conditions non réfléchissantes de type NSCBC [102] sont appliquées sur la vitesse aux entrées, et sur la pression en sortie.
- Tous les autres paramètres numériques sont rigoureusement identiques.

TAB. 5.1 – Nomenclature des calculs LES non-réactifs.

Schéma	Conditions parois	Dénomination
TTGC	Loi de paroi	TTGC-LdP
LW	Loi de paroi	LW-LdP
TTGC	Murs non-glissants	TTGC-MnG

On dispose de 100 champs de mesure expérimentale. Ceci permet d'obtenir des moyennes de bonne qualité. Néanmoins ceci est moins vrai pour le calcul des moments statistiques d'ordre supérieur. Les statistiques LES ont été collectées sur un temps de $35ms$. En considérant un temps convectif τ_c associé à la vitesse débitante et la taille de la fenêtre de mesure, on collecte alors les statistiques sur plus de $10\tau_c$. Le mouvement de rotation du PVC quant à lui, a été mesuré à la fréquence de 400 Hz, soit une période rotation de $2.5ms$. Ceci devrait permettre d'obtenir une convergence statistique satisfaisante.

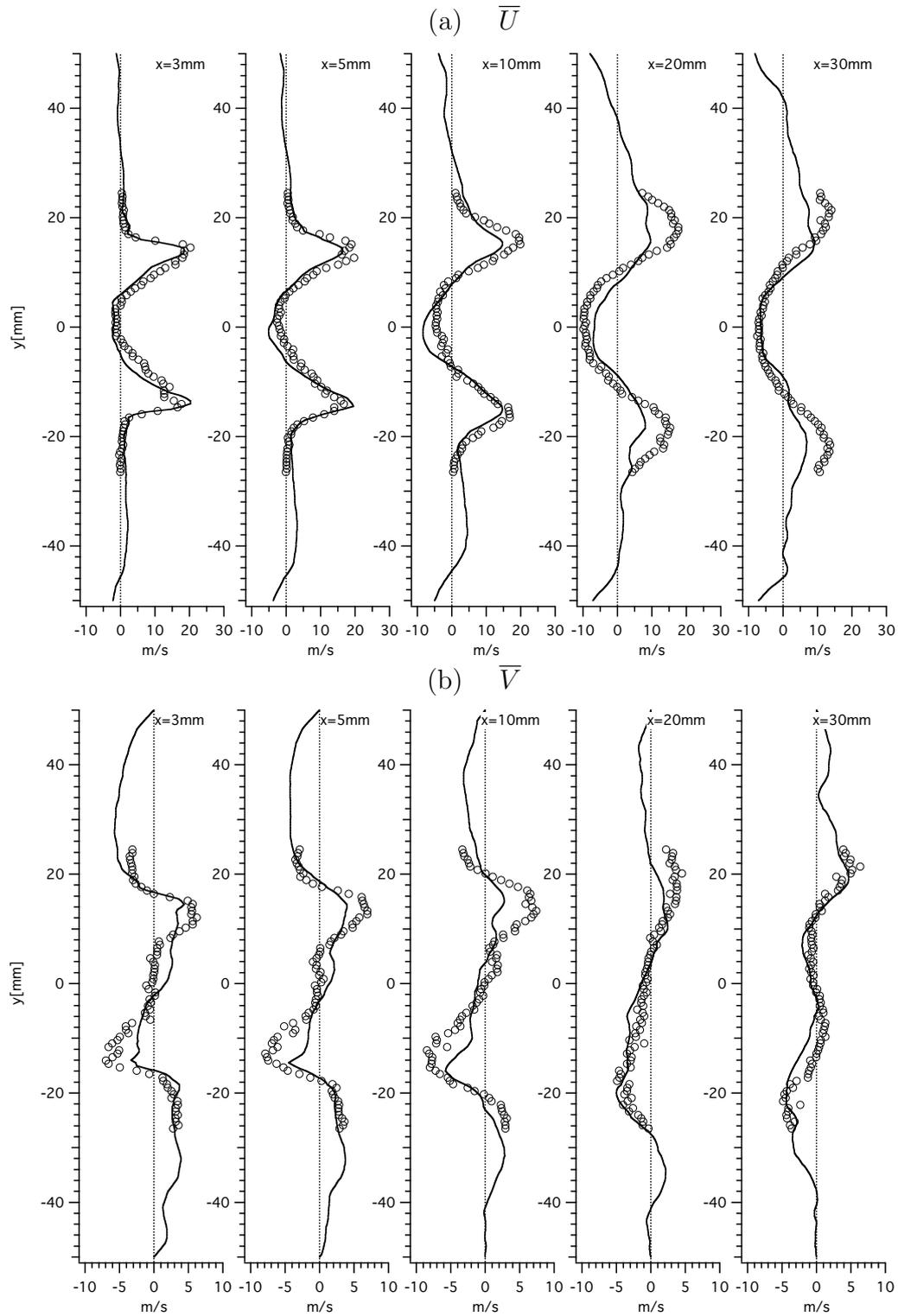
Comparaison Lax-Wendroff/TTGC

On compare ici les calculs utilisant soit le schéma TTGC soit Lax-Wendroff (LW). Les deux calculs mettent en oeuvre des LdP pour le traitement des murs. On désigne les calculs par les acronymes définis dans Tab. 5.1 En premier lieu ; l'accord général avec l'expérience sur les grandeurs moyennes est bon avec les deux schémas (Fig. 5.8a et Fig. 5.8b). Comme on pouvait s'y attendre le schéma d'ordre plus élevé (TTGC) donne des résultats meilleurs. En particulier sur la composante axiale (Fig. 5.8a et Fig. 5.10a), TTGC se montre beaucoup moins dissipatif que LW sur les profils en aval. On note que LW sous estime l'éclatement du jet alors que TTGC a tendance à le surestimer. Dans les deux cas, la zone de recirculation (ZdR) centrale est bien capturée. Sur la composante transverse, l'accord est bon dans les deux cas, avec un léger avantage pour TTGC-LdP, dont les profils sont quasiment superposés aux profils expérimentaux. Les profils des vitesses fluctuantes axiales (Fig. 5.9a et Fig. 5.9a), montrent la aussi un très bon accord avec les mesures tant qualitativement que quantitativement et ce, pour les deux calculs. LW-LdP semble même donner un résultat quantitatif meilleur que TTGC-LdP. Néanmoins on décèle des asymétries parfois prononcées, ce qui traduit un manque de convergence des statistiques. Ce problème se révèle un peu plus sur les fluctuations transverses (Fig. 5.9b). On peine à distinguer les pics de V^{rms} dans la couche de mélange externe du jet sur les profils expérimentaux. Néanmoins, les profils obtenus possèdent tout de même, les bonnes tendances, avec même des niveaux concordants pour LW-LdP. On peut noter une différence de tendance sur le profil en $x = 5mm$ au niveau du niveau de fluctuation sur l'axe. Le profil en LW-LdP est déjà creusé alors qu'un extrême est attendu. En effet,

cette zone est soumise à des variations radiales dû au champ de vitesse induit par le PVC. Les différentes visualisations du PVC, ont montré une forte instationnarité, avec par exemple la disparition temporaire du second bras du PVC pendant plusieurs rotations complètes. Il est alors compréhensible que des statistiques établies sur environ dix périodes puissent être biaisées. Malgré des résultats un peu meilleurs avec TTGC-LdP, il nous semble plus raisonnable pour entamer des simulations relativement longues, d'opter pour un schéma plus économique tel que LW, avec dans notre cas une perte de précision limitée.

Comparaison LdP/Murs non-glissants

On compare ici deux calculs TTGC-LdP et TTGC-MnG ne différant que par le traitement des parois afin de mesurer l'éventuel impact de l'utilisation des LdP. A priori cet impact sera plus fortement marqué dans les régions confinées. On pense en particulier aux ZdR périphériques. Malheureusement l'étendue de la fenêtre de mesure ne court pas jusqu'à ces zones. On peut donc tout au plus s'assurer que l'utilisation des LdP ne dégrade pas le champ aérodynamique. C'est ce que l'on peut constater sur l'ensemble des profils comparés de TTGC-MnG et TTGC-LdP (Fig. 5.12 et Fig. 5.13). Les profils moyens sont quasi identiques dans la zone de mesure. Ils ne diffèrent qu'en proche paroi. On note tout de même, que la taille et la position des ZdR périphériques ne sont pratiquement pas influencées par les choix du traitement des murs (Fig. 5.12a). Les profils des fluctuations présentent les mêmes similitudes. Les lois de parois seront donc utilisées pour les calculs réactifs.



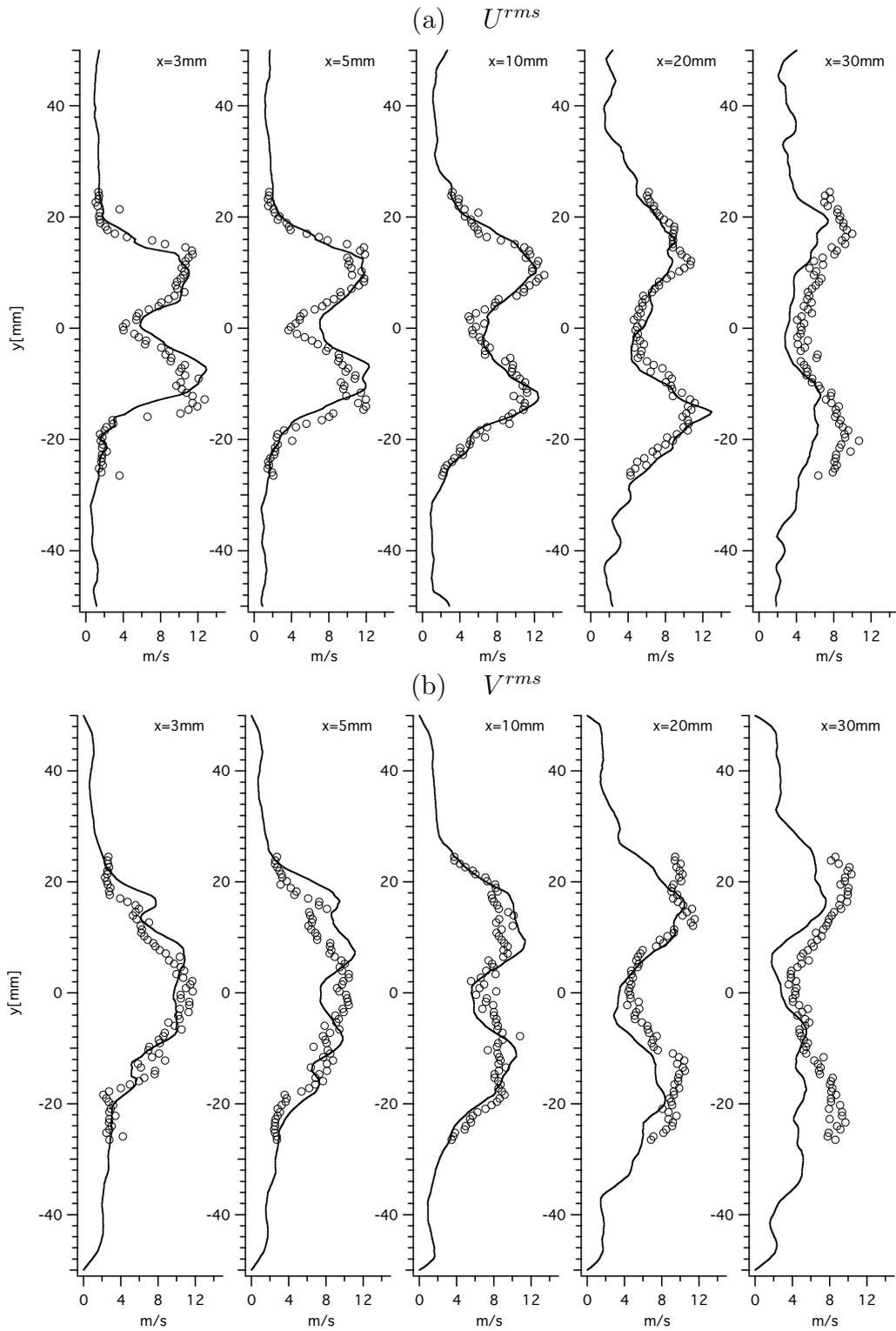
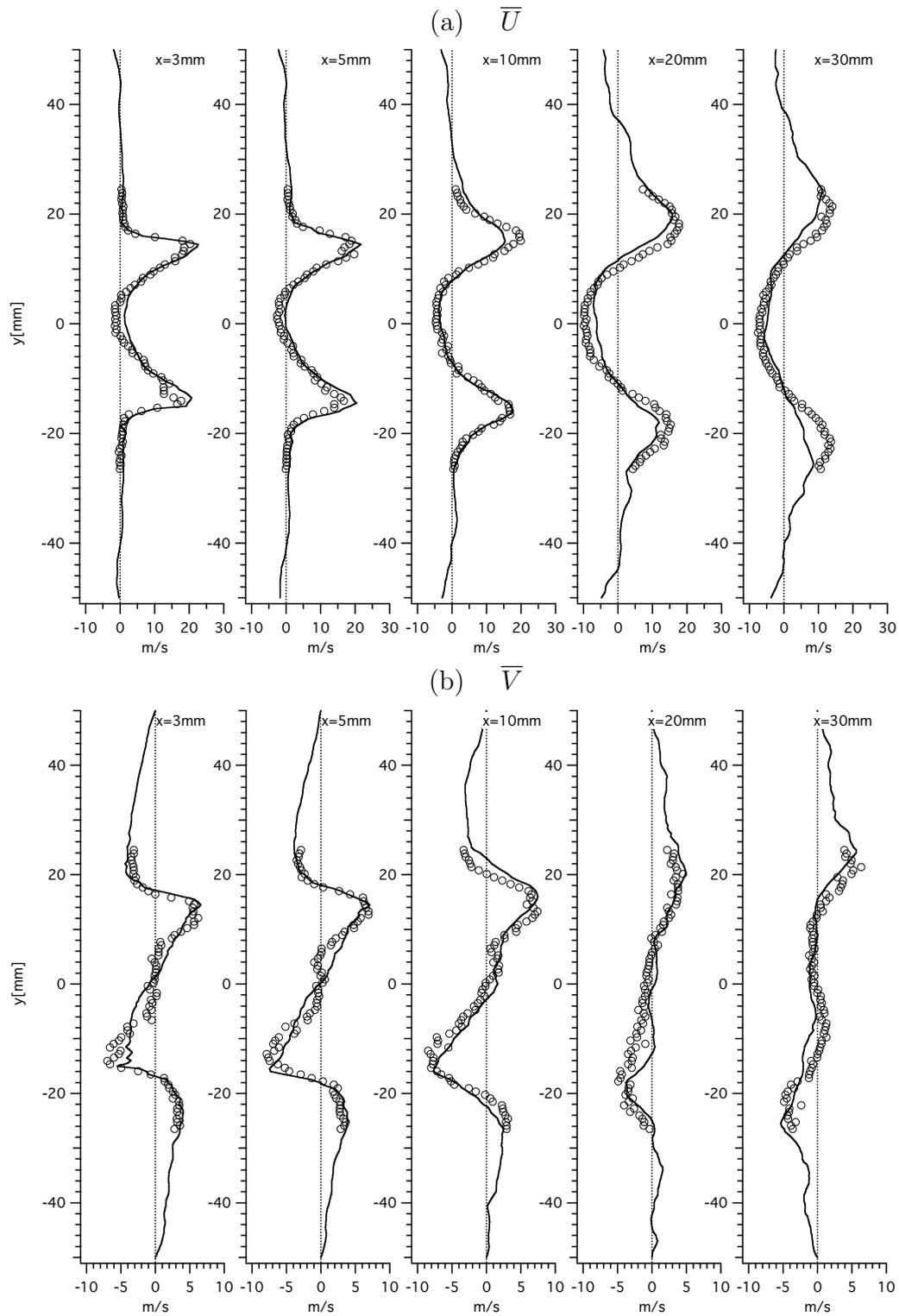


FIG. 5.9 – Comparaison LES(—)/PIV(\circ) des profils des fluctuations moyennes, Schéma LW-LdP : a) U_{rms} , b) V_{rms} .



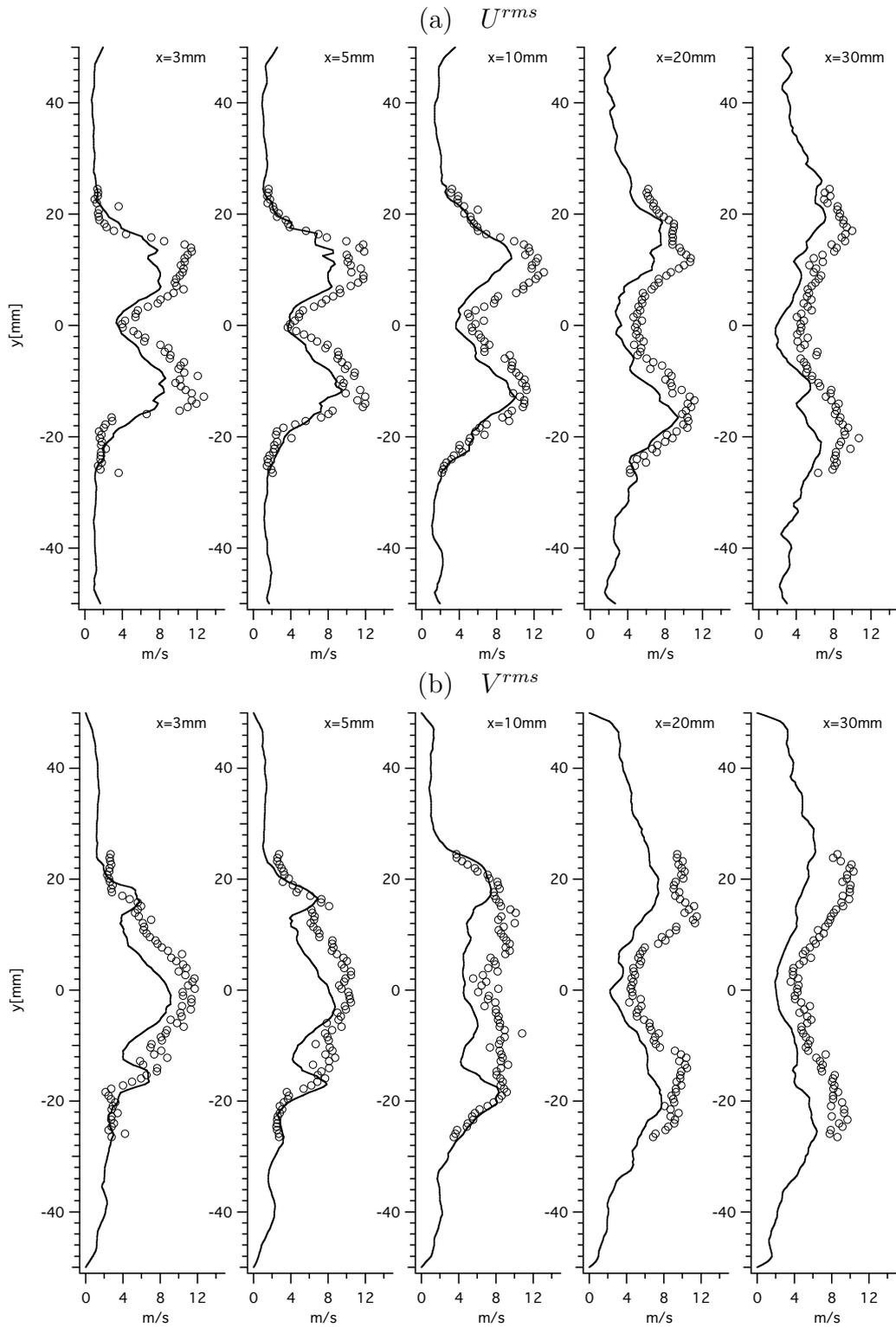


FIG. 5.11 – Comparaison LES/PIV(\circ) des profils des fluctuations moyennes, Schéma TTGC-LdP : a) U_{rms} , b) V_{rms} .

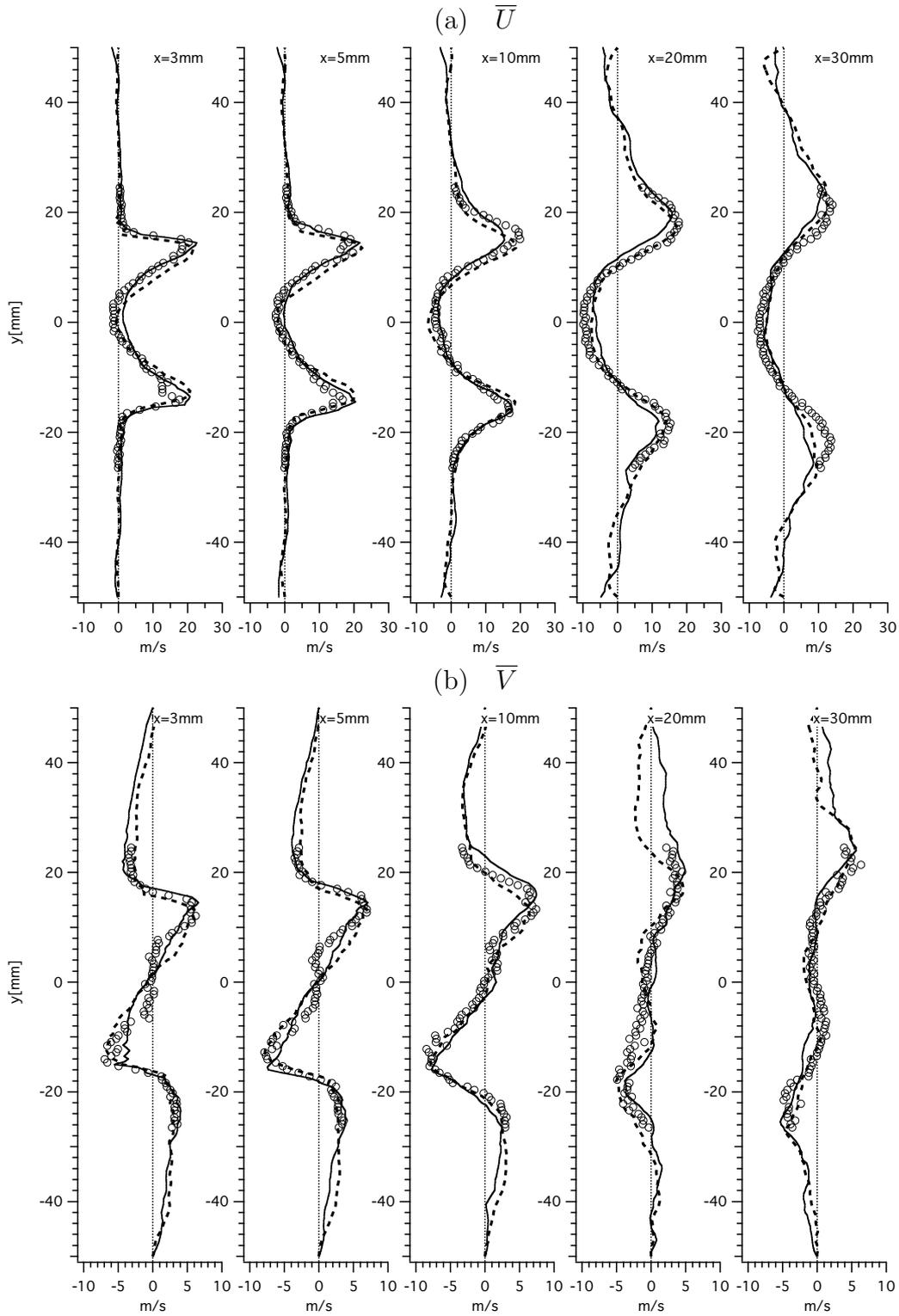


FIG. 5.12 – Comparaison LES/PIV(\circ) des profils de vitesses moyennes, Schéma TTGC : a) \bar{U} b) \bar{V} . — TTGC-LdP, ---- TTGC-MnG.

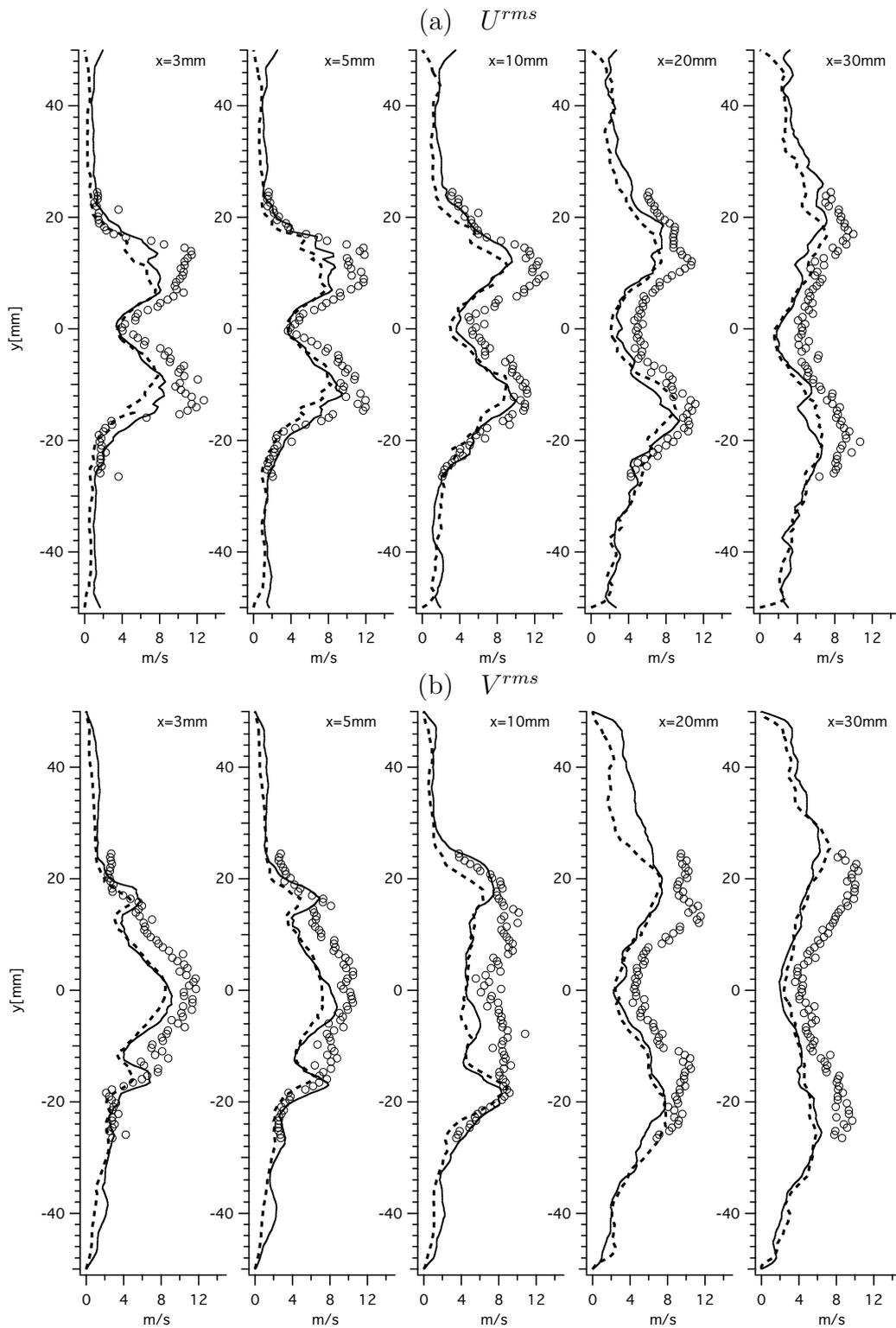


FIG. 5.13 – Comparaison LES/PIV(\circ) des profils des fluctuations moyennes, Schéma TTGC : a) U_{rms} , b) V_{rms} . — TTGC-LdP, ---- TTGC-MnG.

5.2 Calculs Réactifs stables

La validation précédente de l'aérodynamique du brûleur, ouvre la voie à la réalisation de calculs réactifs. On va s'efforcer dans un premier temps d'obtenir une combustion stable avec une position de flamme relativement fixe. Les premiers essais expérimentaux constatent un brûleur assez bruyant à l'oreille. Les spectres mesurés (Fig. 6.2) montrent une fréquence caractéristique bien marquée aux alentours de $400Hz$. Ce pic est aussi visible sur le spectre issu du signal du photomultiplicateur. Ce qui laisse à penser que la flamme réagit à ces oscillations de pressions dont la fréquence tombe dans la gamme de celle des premiers modes propres acoustiques du système (Sec. 5.2.2). Néanmoins, dans un premier temps nous ne tentons pas reproduire ce comportement instable. Les objectifs premiers sont de reproduire une stabilisation de la flamme en papillon comme les visualisations nous le montre (Fig. 5.15, Fig. 5.16), et d'établir le spectre des modes propres s'exprimant dans le calcul. Le calcul présenté ici, utilise les modèles standards de AVBP (Tab. 5.2).

Les visualisations expérimentales vont nous permettre d'effectuer une validation qualitative de notre calcul réactif. Nous disposons à la fois de mesures LIF-OH⁵ et de mesures en émission spontanée. Ces deux méthodes utilisent le même principe. L'objectif est de mesurer l'énergie lumineuse sur une bande étroite du spectre d'émission de la flamme. Cette bande correspond à l'émission lumineuse du radical OH lorsqu'il passe d'un état excité à son état le plus stable. L'état excité existe naturellement, mais reste minoritaire. De ce fait, les mesures en émission spontanée nécessitent un temps d'observation plus long ($0.5ms$). On obtient alors un champ moyenné en temps de l'émission OH. De plus, la mesure restant passive, on se contente d'observer la flamme. On collecte alors une information intégrée sur une ligne de vue (i.e. la coordonnée y) perpendiculaire au plan d'observation ($z = 0$). Si l'on souhaite retrouver la structure dans le plan de coupe, il est nécessaire d'opérer une transformée d'Abel [155], qui permet sous l'hypothèse d'axisymétrie de déconvoluer le signal intégré $F(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, z)dz$:

$$f(x, r) = -\frac{1}{\pi} \int_r^R \frac{\partial F(x, z)}{\partial z} \frac{dz}{\sqrt{r^2 - z^2}} \quad (5.4)$$

Le succès de cette transformation est suspendu à quelques conditions :

- la flamme doit être axisymétrique
- l'auto absorption de l'émission lumineuse par la flamme elle-même doit rester faible. En effet, la méthode ne suppose aucune atténuation du signal en fonction de la distance d'observation
- mesure précise car la déconvolution accumule les erreurs en particulier sur l'axe (Fig. 5.15b)

⁵Laser Induced Fluorescence

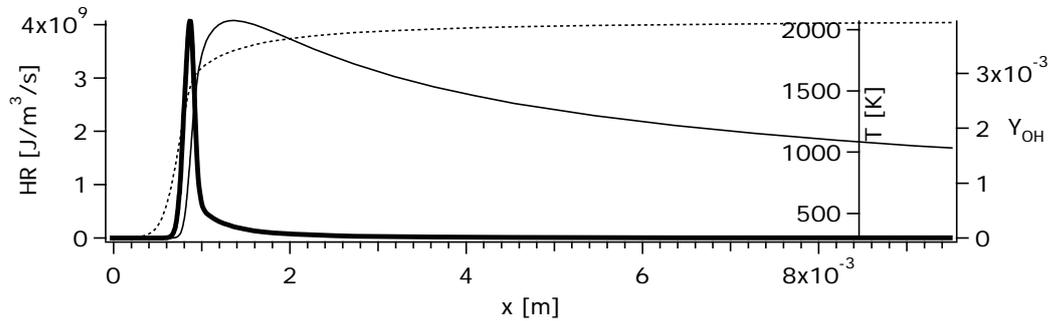


FIG. 5.14 – Profils extraits de flamme laminaire 1D stationnaire calculée avec le schéma de Peters pour le Propane [99] $\phi = 0.8$: — Taux de dégagement de chaleur. Température. — Fraction massique OH.

La LIF-OH utilise un laser ($281nm$) pour exciter une couche électronique du radical OH produit dans la flamme. L'état excité étant instable, le radical OH retombe à son état stable en réémettant dans l'ultraviolet ($\simeq 308nm$). L'émission induite par laser permet alors d'obtenir un rapport signal/bruit très favorable. On collecte alors les données sur un temps de pose assez court ($25ns$) qui permet d'avoir une image quasi instantanée de la flamme en coupe. Le principe même de l'excitation requiert l'énergie d'un laser dont le faisceau est conditionné en nappe. On récolte alors les données dans un plan tomographique. L'installation est similaire à celle utilisée pour les mesures de PIV (Fig. 5.1). On ne peut associer directement la présence du radical OH au front de flamme. Comme on le constate sur les calculs de flamme laminaire avec PREMIX[54], la position du maximum du profil de OH se trouve toujours en aval du front de flamme (Fig. 5.14), que l'on considère centré sur le maximum du taux de dégagement de chaleur. Le radical OH est donc plutôt un marqueur de la zone en aval de la flamme où les gaz brûlés n'ont pas encore pleinement atteint l'équilibre chimique.

Conditions opératoires

Les conditions expérimentales correspondant aux conditions ambiantes de pression et température, il a été choisi d'opérer à $101325Pa$ avec un prémélange à $300K$. Ces calculs correspondent à un étagement α de 50% (Sec. 4.2.2), c'est-à-dire que le débit de carburant est partagé à part égale entre les deux vrilles. Par conséquent, la composition du prémélange est identique pour les deux vrilles. On se place alors dans un mode de combustion parfaitement prémélangé et homogène.

Conditions Limites

Les entrées de prémélange ou d'air sont de type NSCBC, acoustiquement non-réfléchissantes. On y spécifie la composition du mélange gazeux ainsi que sa température. Un profil de vitesse doit en outre être spécifié. Un profil d'écoulement

TAB. 5.2 – Modèles utilisés pour les calculs LES réactifs.

Schéma	Lax-Wendroff
Modèle de sous-maille	WALE (Sec. 2.3.1)
Modèle de combustion	Flamme épaissie TF (Sec. 2.1.5)-épaississement 20
Modèle de combustion de sous-maille	TF-LES (Sec. 2.4)
Chimie	1 étape 5 espèces (C3H8-1SCM1 Sec. 3.5.3)
Condition limites :	
parois	Loi de paroi adiabatiques
entrées	NSCBC non-réfléchissante Relaxation sur $\mathbf{u}, \{Y_k\}, T$
sortie	NSCBC non-réfléchissante Relaxation sur la pression p

TAB. 5.3 – Conditions opératoires des calculs réactifs.

débit air	$40m^3/h$	
débit air injection axiale	$1.4m^3/h$	
richesse prémélange	0.82	
composition en fraction massique	C_3H_8	$0.4994 \cdot 10^{-1}$
	O_2	$2.2146 \cdot 10^{-1}$
	CO_2	0
	H_2O	0
	N_2	$7.2860 \cdot 10^{-1}$
température prémélange	300K	
pression	1atm	
débit propane	$1.378m^3/h$ $0.7517g/s$	
vitesse débitante pipe d'alimentation	$23.6m/s$	
vitesse débitante injection axiale	$13.75m/s$	
puissance thermique	35kW	

turbulent en tube est appliqué pour la composante normale de la vitesse via la formule semi-empirique de loi en puissance [123] :

$$\mathbf{u} = U_0 \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n}} \mathbf{n} \quad (5.5)$$

où $n = 7$ pour un nombre de Reynolds de l'ordre de 10^4 . R est le rayon du tube.

5.2.1 Résultats

Champs moyens

L'observation des champs moyens d'émission OH (5.15), montre une structure de flamme en papillon caractéristique des injecteurs vrillés fonctionnant en prémélange [129][62][124]. La flamme "enrobe" le jet de prémélange éclatant. Elle s'accroche extérieurement sur la circonférence du tube d'injection. La flamme se stabilise à l'interface entre les ZdR centrale et périphérique. On note une légère remontée de la flamme dans le tube d'injection. Du côté du calcul LES, on retrouve l'éclatement du jet au sortir du tube d'injection (Fig. 5.19a) comme dans les cas non réactifs. Le champ de pression moyen reste uniforme dans la chambre tandis qu'un gradient radial dû à la rotation forte de l'écoulement est nettement visible dans le tube d'injection (Fig. 5.19). La ZdR centrale remonte légèrement dans le tube d'injection. Par contre la flamme, se positionne en aval du fond de chambre. La zone de flamme proche de l'axe ne semble pas vouloir remonter plus en amont dans le tube d'injection comme les visualisations (Fig. 5.15, Fig. 5.16) semble le montrer. On peut penser que l'épaississement de la flamme empêche cette dernière de se courber suffisamment pour pénétrer le tube. En effet, l'épaisseur de la flamme laminaire de propane est d'environ $0.4mm$ (Fig. 3.24). Le modèle de flamme épaissit 20 fois le front laminaire afin de le résoudre sur ce maillage. La flamme a donc dans ce calcul une épaisseur $8mm$ (Fig. 5.17b), soit un peu moins de 4 fois le diamètre du tube d'injection, mais seulement 2 fois le diamètre de la ZdR dans le tube. La flamme est donc peut être dans l'impossibilité géométrique de remonter dans l'injecteur. Des tests ont été menés en raffinant localement le maillage conduisant à une épaisseur de flamme de $3mm$. Malgré cette faible épaisseur, la position de la flamme n'a pas changé. On peut donc exclure l'effet de l'épaississement sur ce problème de stabilisation.

5.2.2 Détection des modes acoustiques

Comme tout système de cavité, ce brûleur comporte des modes acoustiques propres. Comme on le verra au chapitre 6, certains modes peuvent interagir fortement avec la combustion et mener à une instabilité forte. Néanmoins, même dans les cas de combustion dite stable, certains modes propres peuvent s'exprimer. Cependant, ils n'interagissent pratiquement pas avec la flamme. Dans ce calcul,

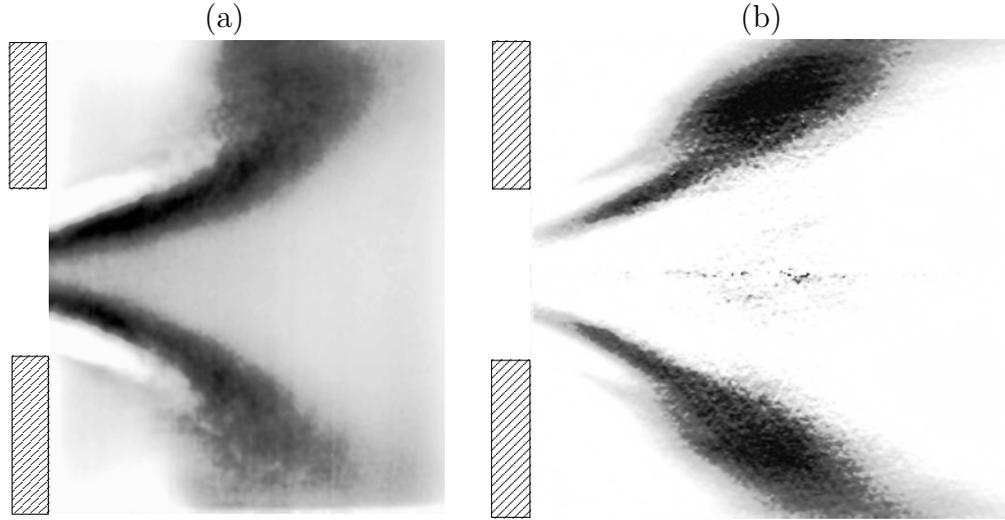


FIG. 5.15 – Champs moyens d'émissions OH : a) Emission induit par laser (LIF) b) Transformée d'Abel de l'émission spontanée. Min Max.

on a pu caractériser les principaux modes s'exprimant dans un cas stable. Pour cela nous avons opéré de plusieurs façons. Dans un premier temps, on étudie le champ de pression instationnaire moyenne :

$$p_1^{rms} = \sqrt{p^2 - \bar{p}^2} \quad (5.6)$$

Cette technique permet seulement de détecter le mode s'exprimant le plus fort, qui "couvre" les autres. En effet, les statistiques collectées moyennent les effets de tout le spectre (résolu). On obtient un résultat exploitable seulement si un mode domine l'évolution du champ de pression. Elle est bien sur mise en échec dès lors que plusieurs modes s'expriment avec des niveaux comparables. Si l'on souhaite pouvoir différencier efficacement des modes de puissance diverse, on peut alors dresser des cartes spectrales. Cette méthode permet de différencier les modes seulement si leurs fréquences sont suffisamment distinctes⁶. Son principe général correspond à mesurer le spectre en puissance du champ de pression instationnaire. Comme nous le verrons, cette méthode est relativement lourde car elle nécessite de stocker les signaux temporels de la pression ou de la vitesse pour un nombre significatif de points afin de pouvoir reconstruire la structure spatiale des modes. En effet, on va placer des senseurs dans des plans caractéristiques de la configuration, là même où l'on sera capable reconnaître tel ou tel mode. La dernière approche, plus fine, nécessite d'utiliser un solveur d'Helmholtz sur la géométrie considérée [7][91]. Un calcul LES peut fournir la distribution de la vitesse du son via son champ de température moyenne. Ce genre d'outils est alors capable de déterminer l'ensemble des modes propres associés à la géométrie. On doit faire

⁶dépendant de la résolution spectrale des spectres en puissance

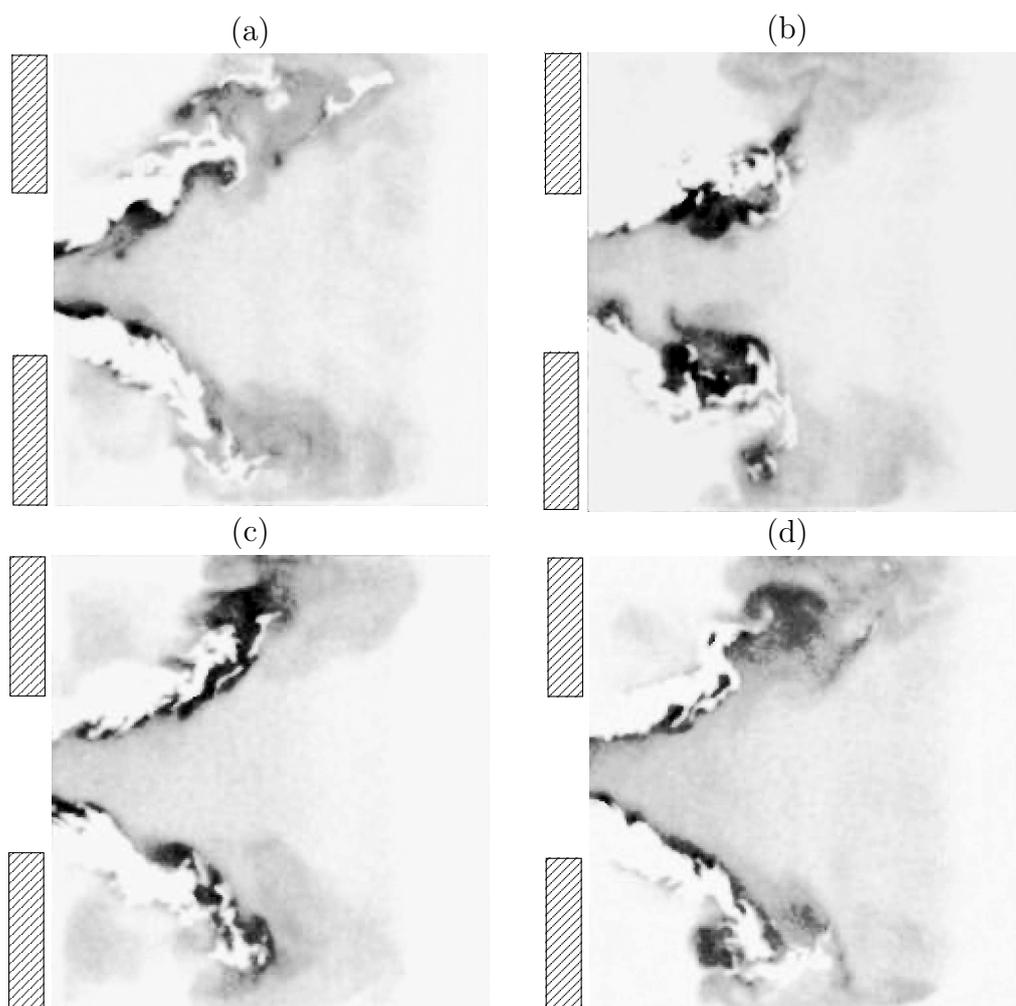


FIG. 5.16 – LIF-OH, champs instantanés non résolus en temps. Min Max.

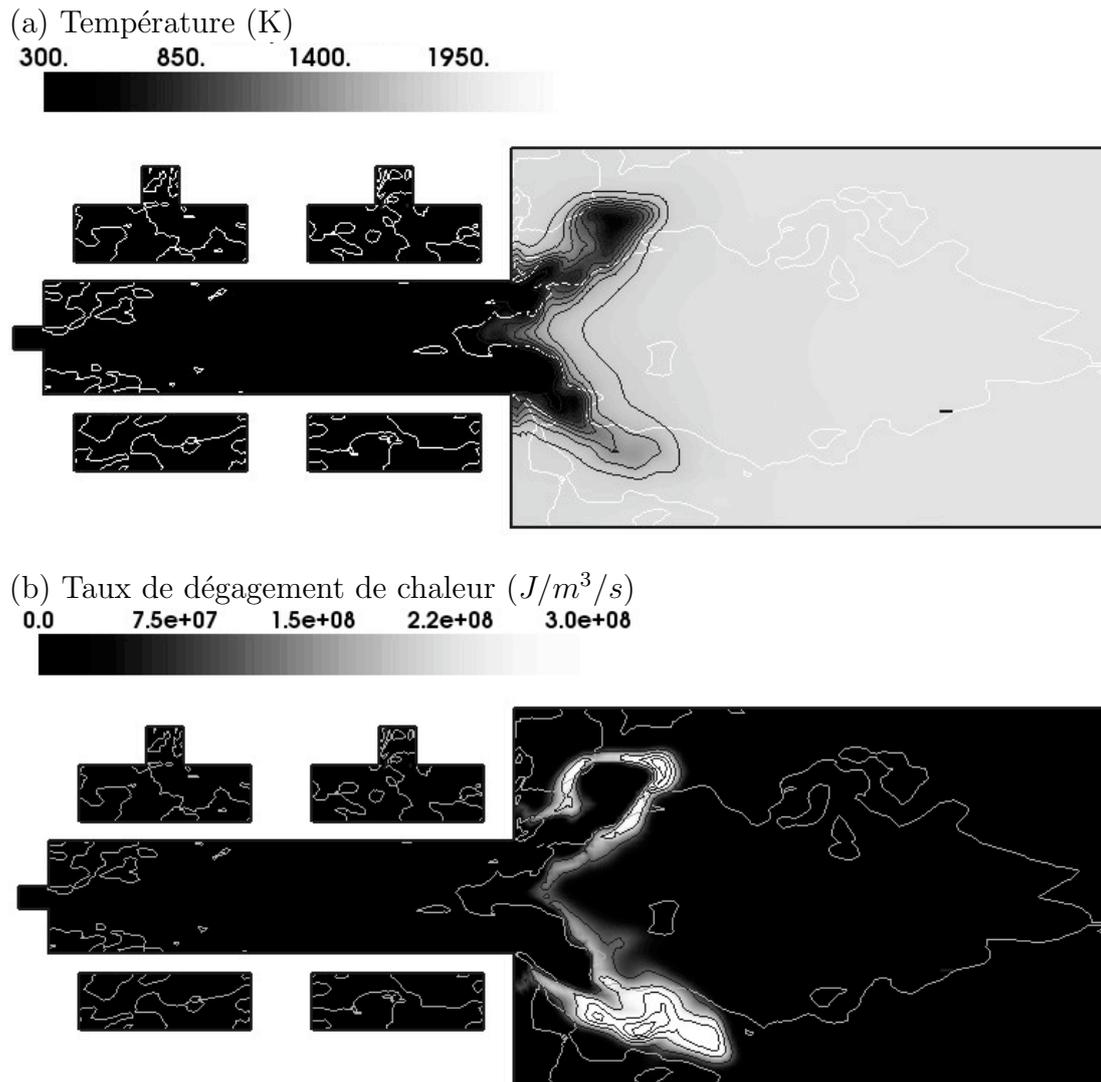


FIG. 5.17 – Champs instantanés : Coupe longitudinale $z = 0$. a) Température (K). b) Taux de dégagement de chaleur ($J/m^3/s$). — iso-contour $u = 0$.

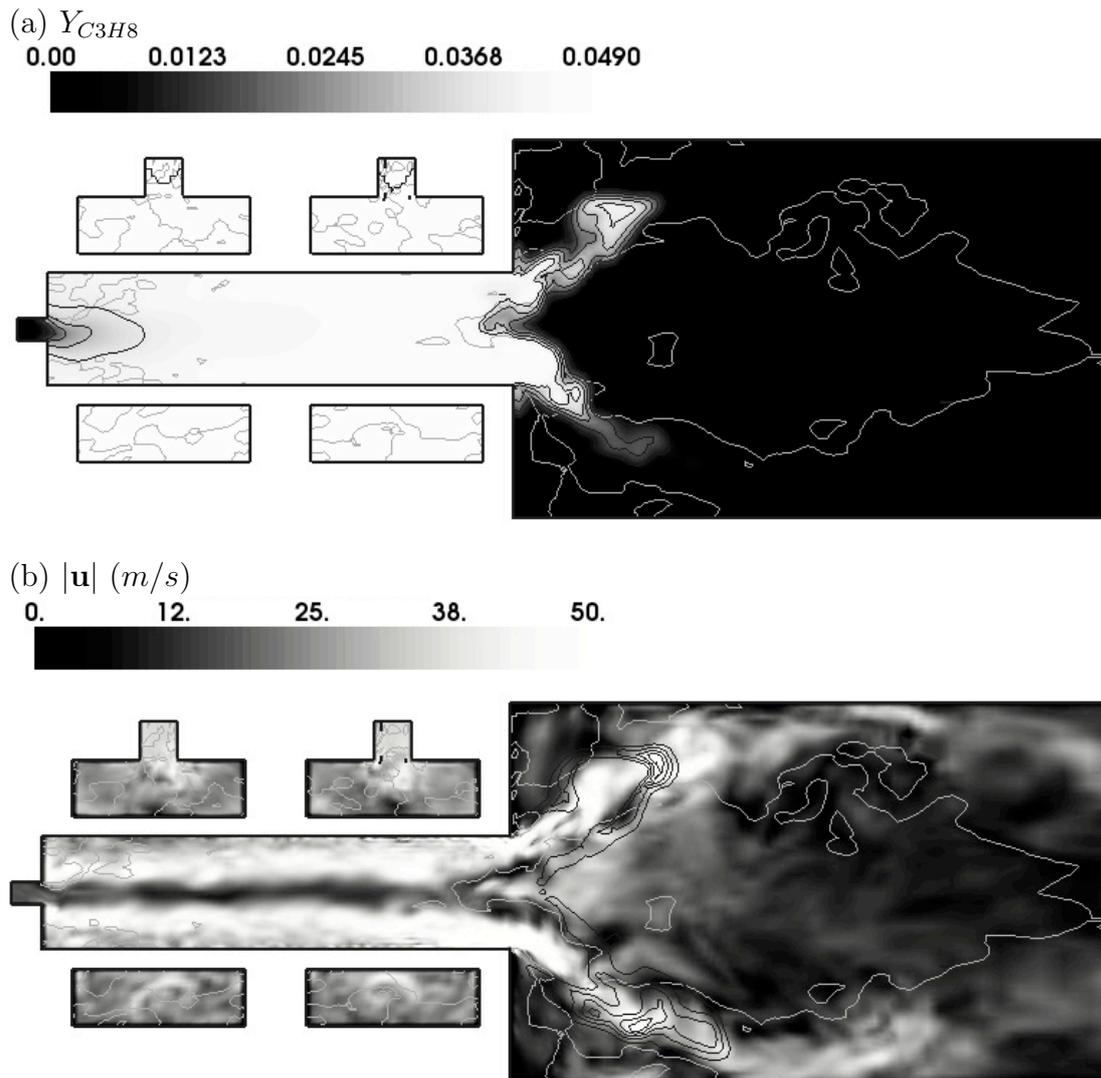


FIG. 5.18 – Champs instantanés : Coupe longitudinale $z = 0$. a) Fraction massique de propane (K). b) Module de la vitesse (m/s). — iso-contour $u = 0$.

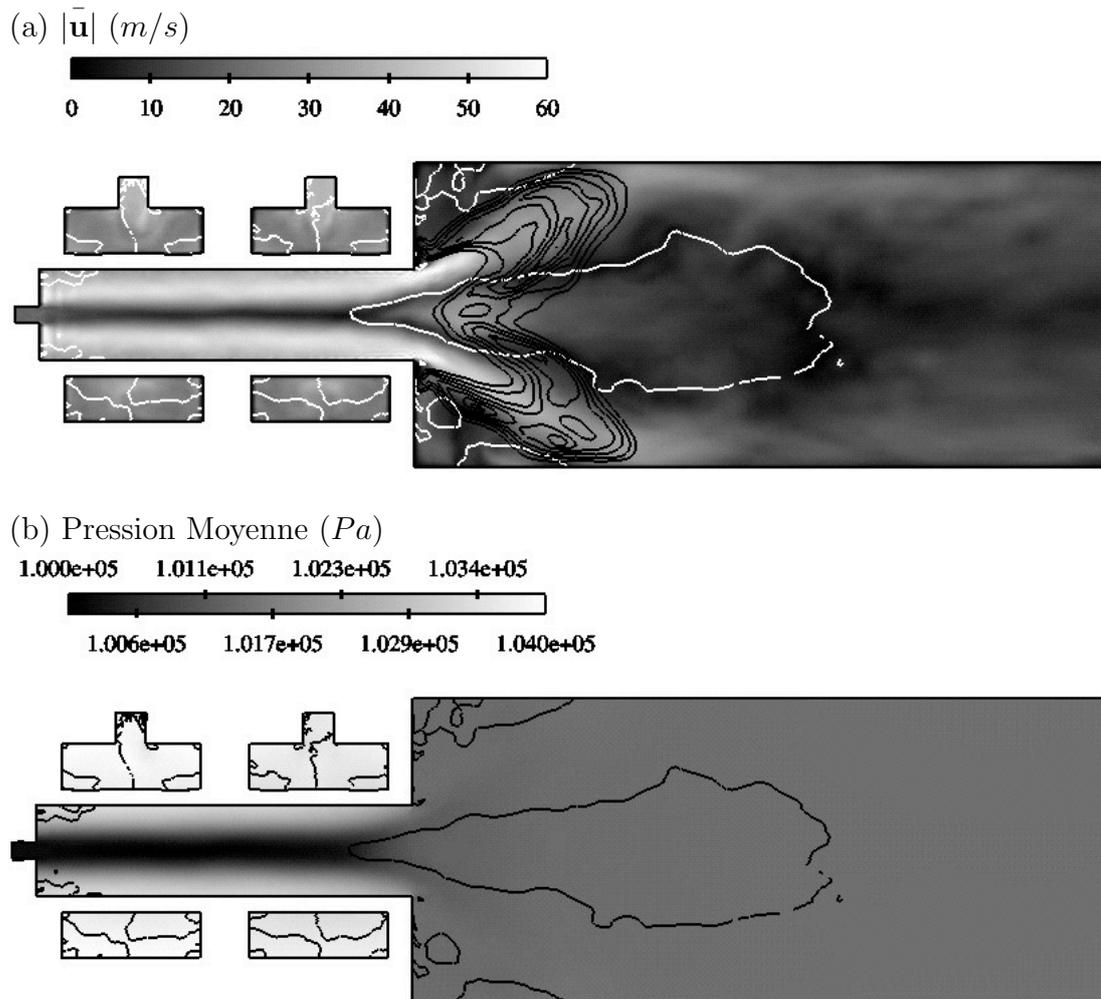


FIG. 5.19 – Champs moyens : Coupe longitudinale $z = 0$. a) Colorée par le module vitesse moyenne (m/s). \blacksquare iso-contour $u = 0$. — iso-contours du taux de dégagement de chaleur. b) Distribution de la pression moyenne. — iso-contour $u = 0$.

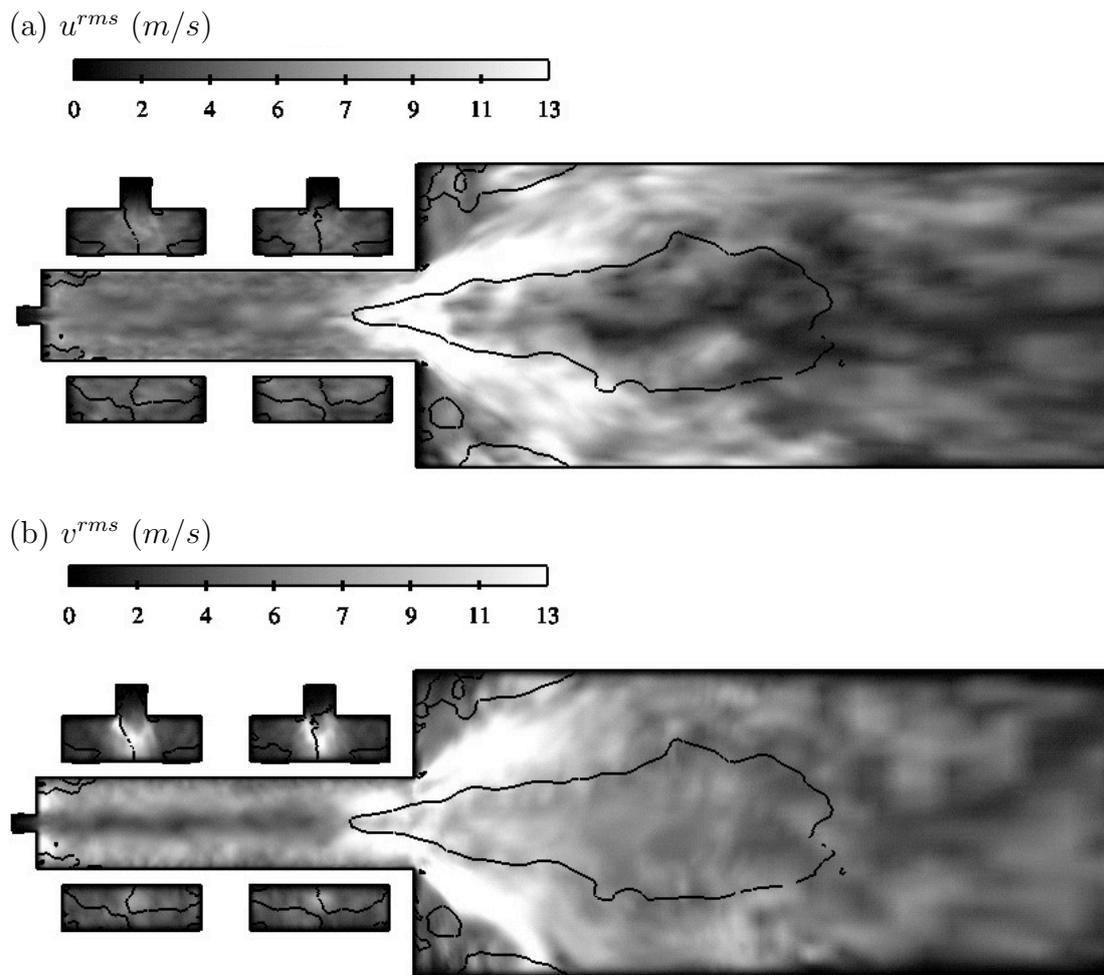


FIG. 5.20 – Moyenne des fluctuations de vitesse (m/s). — iso-contour $u = 0$.
a) Fluctuations longitudinales. b) Fluctuations transverses. Coupe longitudinale $z = 0$.

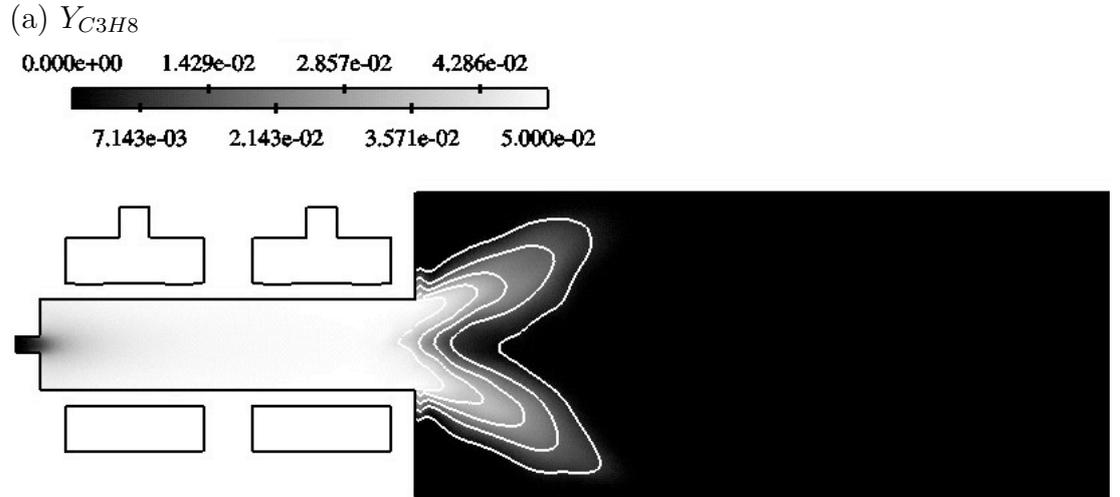


FIG. 5.21 – Distribution moyenne de la fraction massique de propane.  iso-contours de température $1000 \leq T \leq 2000K$. Coupe longitudinale $z = 0$.

quelques hypothèses sur les impédances des entrées et sorties, ou bien savoir les mesurer. Si dans le calcul seulement certains modes s'expriment, le solveur d'Helmholtz ne donne aucune information sur l'expression effective d'un mode en particulier. Par contre il en fournit la liste exhaustive. La combinaison des deux méthodes nous permet dans un premier temps de vérifier que l'on retrouve bien parmi les modes prédits par le solveur d'Helmholtz AVSP (brièvement décrit en Sec. 7.4), les modes s'exprimant dans le calcul.

Cartes spectrales

L'objectif de la carte spectrale est de déterminer, pour une fréquence donnée, la répartition spatiale du niveau de puissance du signal. Pour ce faire, on doit calculer la densité spectrale de puissance du champ de pression. On définit⁷ la densité spectrale de puissance S_{xx} d'un signal $x(t)$ comme le carré du module de son spectre $X(f)$:

$$\begin{aligned} S_{xx} &= X(f)X^*(f) \\ &= |X(f)|^2 \end{aligned} \quad (5.7)$$

Le spectre est obtenu par transformée de Fourier discrète (TFD) : $X(f) = TFD(x(t))$. Comme il est très coûteux de stocker les champs de pression complet avec un échantillonnage élevé, on ne place qu'un nombre limité de senseurs.

Avec cette méthode, il faut néanmoins avoir une idée de ce que l'on recherche. On sait par expérience que les modes apparaissant aux plus basses fréquences

⁷En utilisant la méthode du périodogramme et non celle du corrélogramme

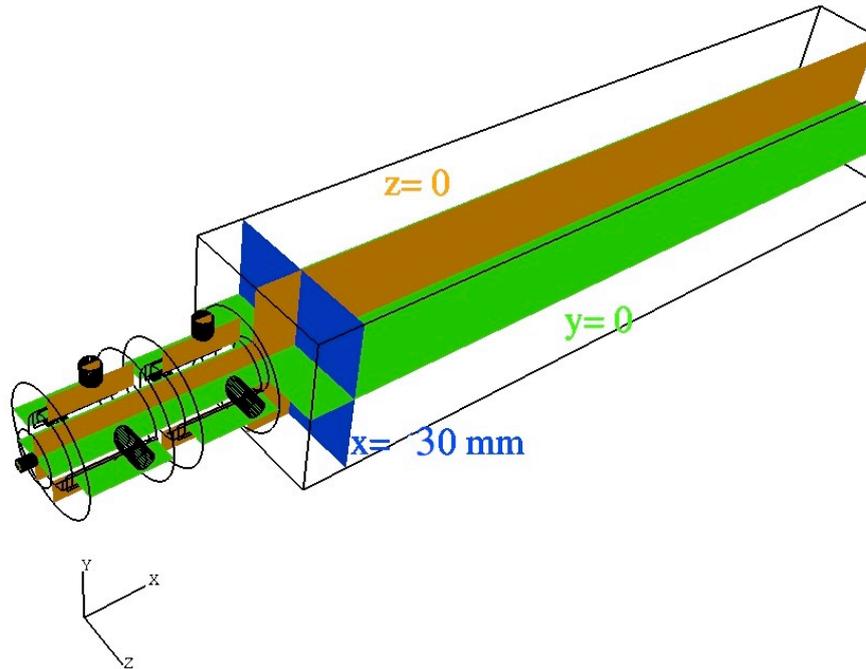


FIG. 5.22 – Disposition des plans d’observation pour les cartes spectrales.

sont en principe des modes longitudinaux⁸. On les recherchera alors dans des plans longitudinaux. Pour les fréquences plus élevées, on pourra capter des modes transverses ou azimutaux dans des plans transverses. Comme nous ne recherchons l’expression des modes uniquement dans certains plans de coupe, nous stockons uniquement le signal de pression dans les plans considérés (Fig. 5.22), avec une discrétisation suffisante. On peut résumer la procédure pour obtenir des cartes spectrales comme suit :

- Définition des plans de mesures et d’observation (Fig. 5.22)
- Discrétisations des plans de mesures par le placement des senseurs
- On effectue le calcul instationnaire en enregistrant le signal de pression aux senseurs.
- Pour la première étape de la phase de post-traitement on calcule la densité spectrale de puissance (DSP) pour les signaux de pression de chaque senseur.
- L’observation de quelques spectres permet de sélectionner les fréquences des modes les plus énergétiques.
- Pour chaque fréquence d’étude sélectionnée : on reporte la valeur de la DSP à la fréquence considérée sur les plans de mesures.

L’observation d’un spectre d’allure caractéristique (Fig. 5.24) permet de dis-

⁸principalement longitudinaux, la forme des modes reste tridimensionnelle

tinguer deux pics aux fréquences de $290Hz$ et $4020Hz$. Le mode haute fréquence dominant largement dans ce calcul, on peut alors se contenter d'observer le champ de p_1^{rms} . La haute fréquence laisse à penser que l'on a affaire à un mode transverse de la chambre. En effet si on calcule approximativement la fréquence du mode demi-onde entre les murs de la chambre, avec $c_0 = 800m/s$:

$$f_{1T} = \frac{c_0}{2L} = 4000Hz \quad (5.8)$$

En conséquence, nous observons ce mode dans un plan transverse (à 30 mm du fond de chambre). Nous normalisons les champs de p_1^{rms} issu du calcul LES afin de pouvoir le comparer avec les prédictions du code acoustique AVSP. Pour ce faire, on superpose au plan coloré par la distribution de pression acoustique (AVSP), les iso-contours de p_1^{rms} extraites des statistiques du calcul LES (AVBP). Ces iso-contours sont construits sur la même échelle normalisée ce qui permet une comparaison objective. Si l'on compare la prédiction de AVSP et les statistiques du calcul pour ce mode (Fig. 5.23a), on obtient alors un accord très satisfaisant. Il est à note que le mode possède aussi un structure longitudinale (Fig. 5.23b). Celle-ci indique que le mode s'exprime principalement au niveau de la zone de combustion. Il est par contre totalement absent du tube d'injection. On note qu'il est fortement atténué en direction de la sortie de chambre sans que sa structure transverse n'en soit affectée. Ceci est un effet de la condition limite de sortie qui bien que non réfléchissante, limite les écarts trop importants entre consigne et pression locale.

L'observation de la structure transverse (Fig. 5.23a), nous indique que le mode est soit une composition des modes transverses demi-onde⁹ ou un mode à part entière. En effet, en ne s'intéressant qu'à la structure transverse on peut recomposer une structure de mode s'apparentant à celle observée en combinant les modes demi-ondes des directions transverses (Fig. 5.25d). Néanmoins, AVSP prédit le mode à $4020Hz$ comme mode propre à part entière, car dans la série des modes prédit autour de $4KHz$, on ne trouve pas trace des modes transverses demi-onde de la chambre. Il est tout à fait possible que les inhomogénéités du champs de vitesse du son dans la chambre ne puissent permettre l'établissement des modes purement transverses (Fig. 5.25 a et b) de la chambre.

Ainsi que nous l'avons souligné plus haut, il n'est pas possible d'utiliser la même méthode pour extraire la forme de modes de puissance inférieure au mode principal. On emploie alors une technique de carte spectrale pour le mode basse fréquence détecté à $290Hz$ (Fig. 5.24). Ce mode étant principalement longitudinal (Fig. 5.26), un profil extrait de la carte spectrale suffit pour visualiser sa forme. Néanmoins AVSP détermine ses deux premiers modes avec des structures et fréquences proches de ce qui est mesuré dans le calcul LES. Pour comparer les profils longitudinaux, on a normalisé les données issues de la carte spectrale. On

⁹Formulés par une analyse 1 ou 2D, leur existence n'est pas garantie en 3D

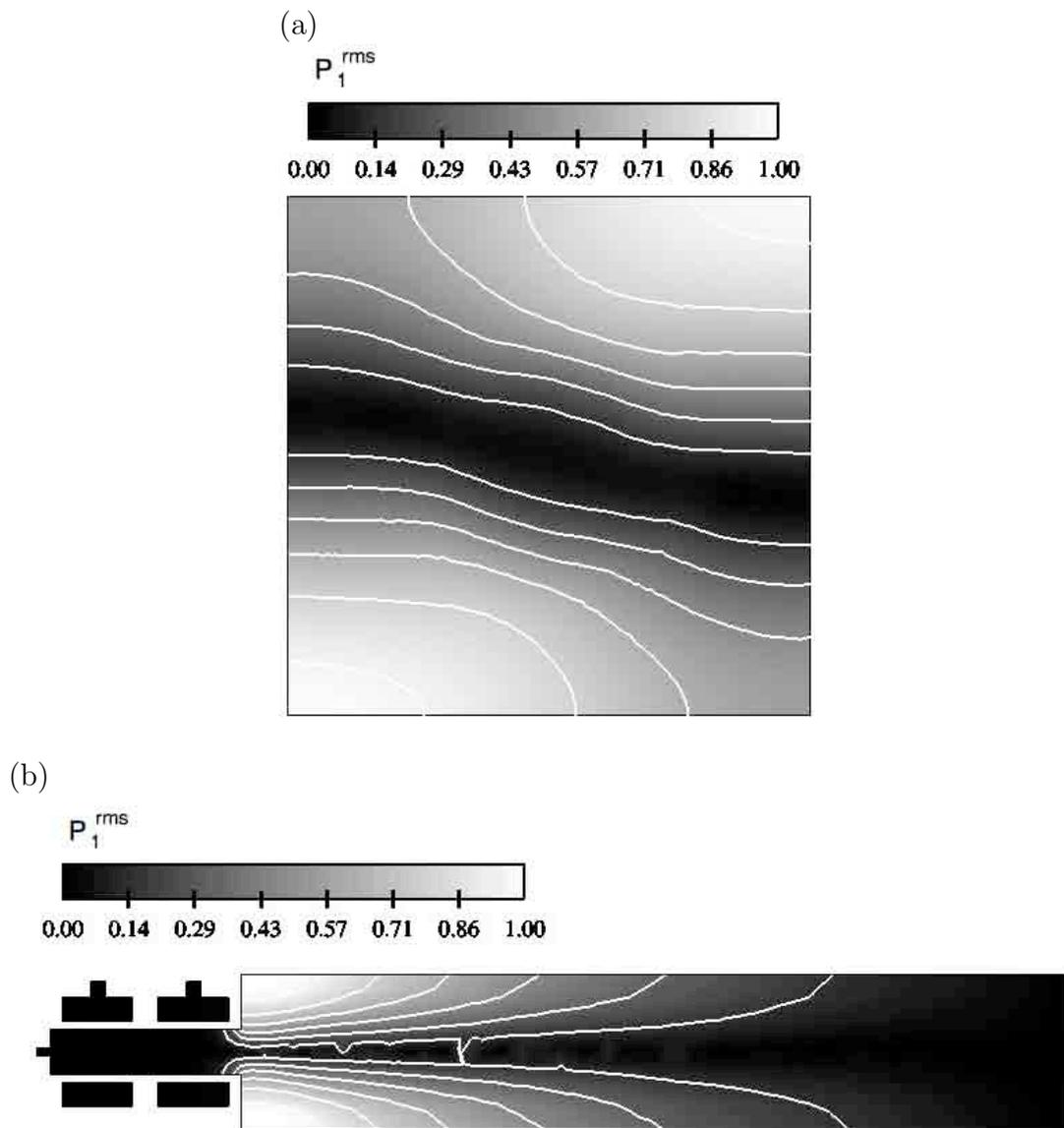


FIG. 5.23 – Plan de coupe coloré par le module de pression (AVSP).  iso-contours de p_1^{rms} normalisé (AVBP). (a) plan $x = 30mm$. (b) plan $z = 0$.

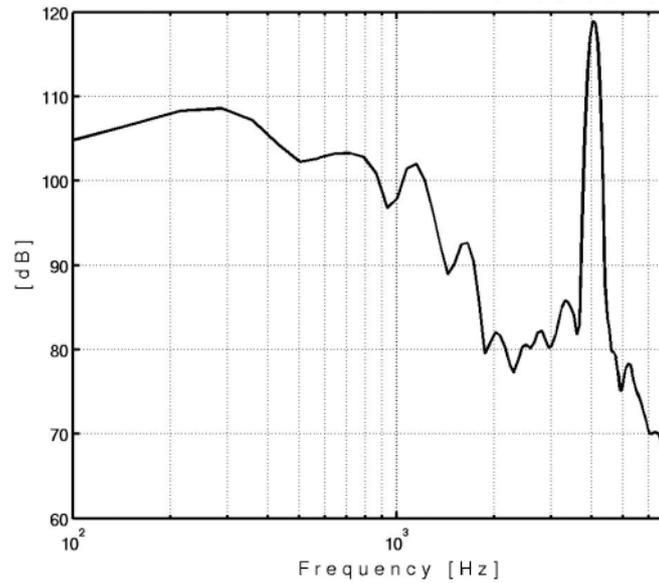


FIG. 5.24 – Densité spectrale de puissance (pression) caractéristique mesurée au niveau de la flamme.

TAB. 5.4 – Conditions opératoires des calculs réactifs.

Code	mode basse fréquence	mode haute fréquence
AVBP (LES)	290Hz	4020Hz
AVSP (Helmholtz)	307Hz ou 434Hz	4230Hz

pris soin de replacer les niveaux sur une échelle linéaire (et non logarithmique) avant de normaliser. Sur Fig. 5.27, il est difficile d'associer catégoriquement le mode mesuré à un des modes déterminé par AVSP. Le premier mode dont la fréquence de 307Hz coïncide assez bien avec la mesure, est en revanche plus éloigné en forme que le second mode à 434Hz. On pourra néanmoins lever cette ambiguïté au chapitre 7.

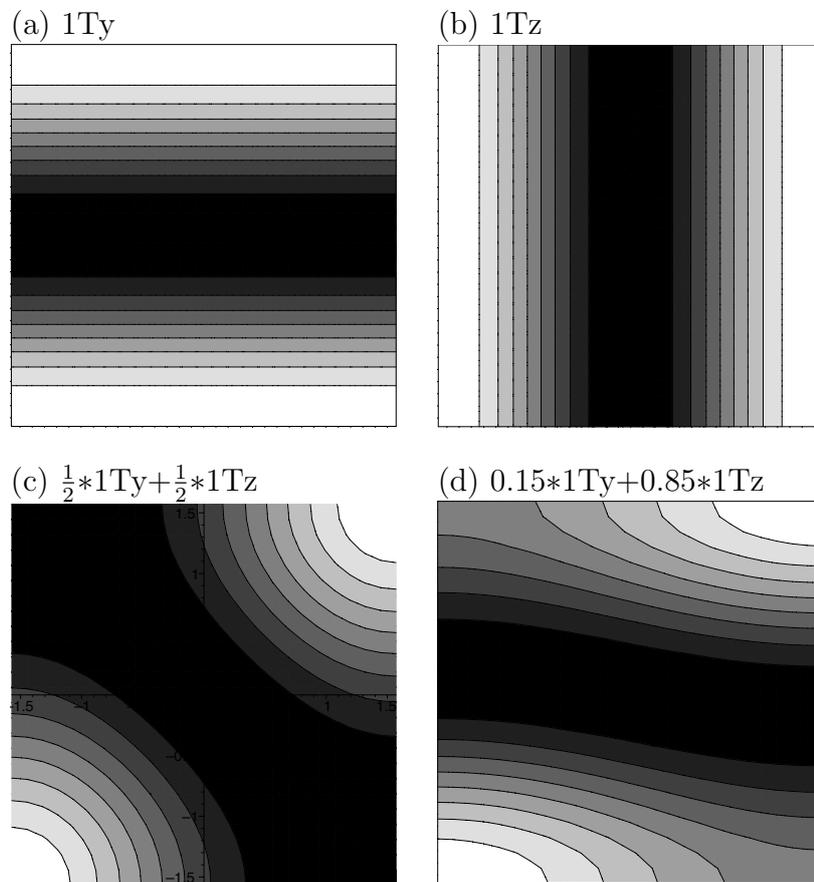


FIG. 5.25 – Composition analytique des premiers modes transverse (1Ty, 1Tz) dans une boîte carrée. p_1^{rms} **Min** **Max**

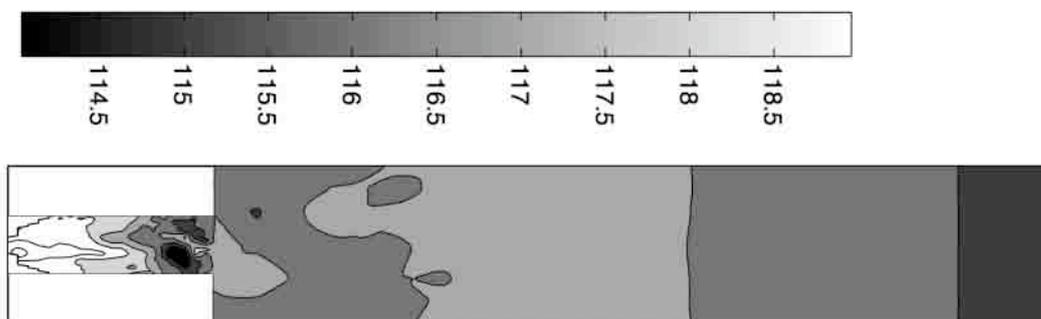


FIG. 5.26 – Carte Spectrale de pression à $290Hz$ dans le plan $z = 0$. Densité spectrale de puissance du signal de pression en dB

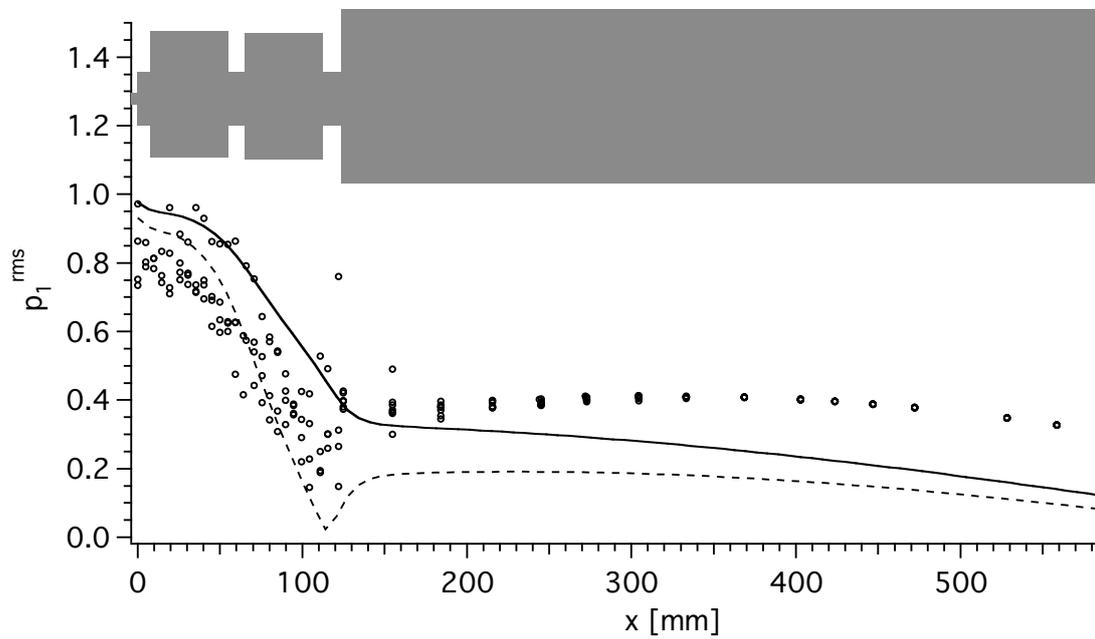


FIG. 5.27 – Comparaison des modes propres déterminés par AVSP et profil extrait de la carte spectrale à 290Hz . — AVSP mode 1 à 307Hz . ---- AVSP mode 2 à 434Hz . \circ Carte spectrale.

Chapitre 6

Brûleur Instable et méthodes d'analyse

6.1 Comportement instable du brûleur ECPmod

Les mesures expérimentales menées sur le brûleur ECPmod [27], ont montré sur ce dernier une forte propension à développer un mode de combustion instable. Cela se caractérise par un niveau sonore élevé lorsque le brûleur est en fonctionnement. De nombreuses conditions sont réunies dans ce dispositif pour promouvoir un mode de combustion instable :

- Le brûleur fonctionne en prémélange pauvre, qui est comme on l'a vu en Sec. 1.4, un mode de combustion à stabilité réduite.
- La chambre de combustion possède des murs dénués de système de refroidissement par fente ou perforation. La longue chambre peut alors se comporter comme un guide d'onde (pour les modes longitudinaux) ou cavité résonnante (pour les modes transversaux) présentant des parois fortement réfléchissantes pour les perturbations acoustiques.
- La configuration géométrique du brûleur, présentant un tube débouchant brutalement dans une chambre de grande dimension, se prête particulièrement bien à l'apparition de larges structures tourbillonnaires créées au niveau de la marche. Ces structures peuvent alors interagir plus ou moins fortement avec la flamme.

Le système d'injection n'encourage pas en revanche une rétroaction (Fig. 1.6 Sec. 1.4) par variation de richesse. Les fentes des vrilles sont alimentées par un prémélange parfait préparé dans les plenums des vrilles. Le mélange dans les plenums, n'est a priori pas influencé par l'acoustique du brûleur. Néanmoins, la capacité d'étagement du brûleur influence la stabilisation de la flamme. Par ce biais, la stabilité du brûleur est affectée par le taux d'étagement α . En effet, la distribution radiale de richesse du prémélange à la sortie du tube d'injection est contrôlée par α . Les valeurs de l'étagement inférieures à 50% produisent une

distribution de richesse très pauvre proche de l'axe et plus riche à la périphérie du tube (Fig. 7.3). Les taux d'étagement supérieurs à 50% produisent l'effet inverse sur la distribution radiale de richesse. Les simulations ont montré que cette distribution reste inchangée avec l'apparition d'une instabilité. L'exploration du domaine de fonctionnement du brûleur a permis de caractériser en particulier l'influence de l'étagement du carburant (Sec. 4.2.2). On note un maximum de l'amplitude de l'instabilité pour un étagement de 30–40% (Fig. 6.1b). Pour cette raison, nous modifions le point de fonctionnement, de $\alpha = 50$ à $\alpha = 30\%$, dans l'espoir de placer le brûleur dans les conditions les plus promptes à développer une instabilité de combustion.

Les spectres du signal de photomultiplicateur et de micro (placé en milieu de chambre) montrent un pic de fréquence bien marqué (Fig. 6.2) aux alentours de 400Hz . On remarque un glissement de la fréquence d'instabilité (Fig. 6.1a). Son évolution est fonction strictement croissante de l'étagement jusqu'à 70%. Cette tendance semble principalement liée à l'impédance de la condition de sortie qui varie avec la température de gaz brûlés. Ne disposant d'aucune mesure de l'impédance de sortie, nous n'avons pas tenté de reproduire cette tendance. En effet, nous n'avons aucune garantie que les conditions limites utilisées dans les simulations reproduisent cette caractéristique. Néanmoins, la formulation de ces conditions reposant sur une analyse acoustique (Sec. 2.5.2) nous permet de rester confiants sur leur capacité à modéliser des impédances s'approchant de conditions réelles. Pour atteindre notre objectif premier qui est de capturer l'instabilité du brûleur, nous allons justement modifier l'influence de la condition de sortie (Sec. 6.2.1) pour induire la croissance d'un mode thermo-acoustique instable.

6.2 Capture d'une séquence instable sur ECP-mod

Les sections suivantes ont un rôle complémentaire à l'article présenté en Chap. 7. L'objectif premier est de présenter plus en détail les différentes techniques de validations des dérivations des équations utilisées dans cet article. En second lieu, on explicite plus clairement certains points que le format nécessairement compact de l'article, n'a pas permis de développer. On y présente en particulier le lien fort existant entre le comportement acoustique des conditions limites et l'apparition de l'instabilité. Par ailleurs, la période de croissance de l'instabilité est étudiée plus en profondeur. Comme dans l'article formant le chapitre 7, on montre ici que :

- La LES compressible permet d'investiguer en détails des instabilités de combustion.
- Les conditions limites acoustiques permettent de contrôler le niveau d'in-

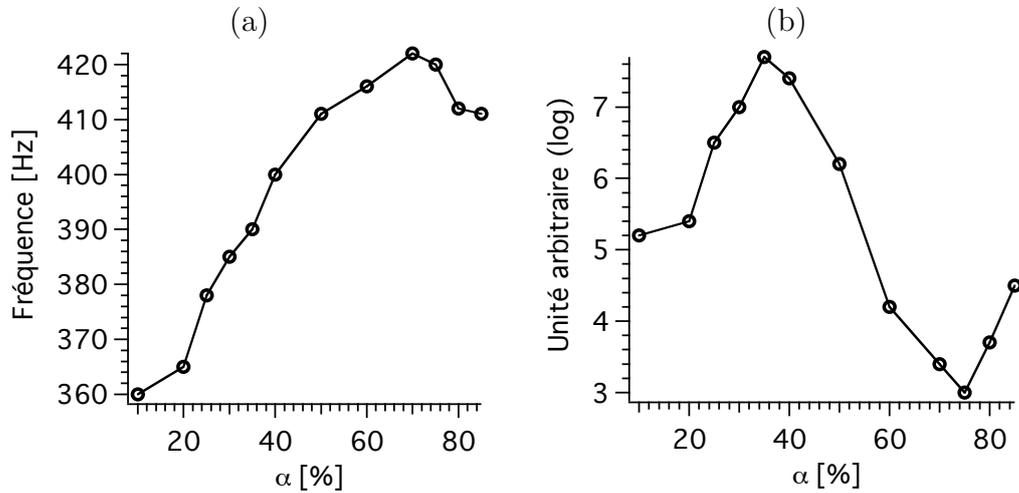


FIG. 6.1 – Influence du taux d'étagement sur le spectre acoustique du brûleur ECPmod. a) Glissement de la fréquence principale du spectre. b) Evolution de la densité de puissance de la fréquence la plus énergétique. Mesures N. Dioc/EM2C [27]

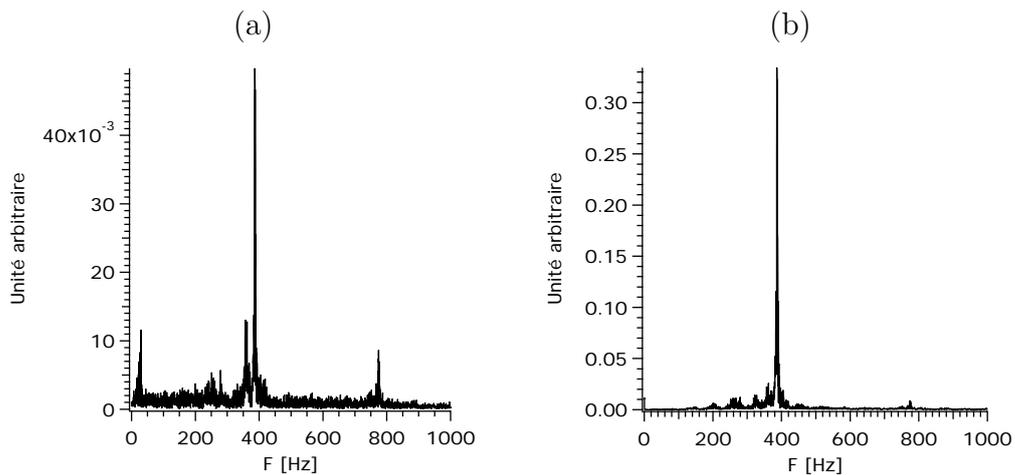


FIG. 6.2 – Spectres mesuré sur : a) signal photomultiplicateur. b) signal micro chambre. $\alpha = 30\%$. Mesures N. Dioc/EM2C [27]

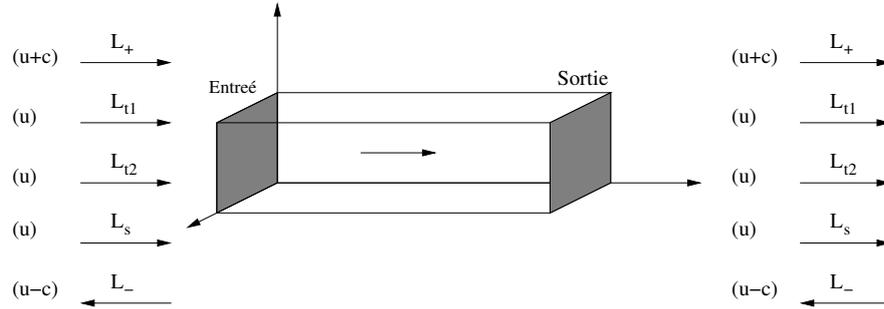


FIG. 6.3 – Orientation des ondes aux limites.

stabilité à volonté, donc de les déclencher ou de les annihiler. Ceci apporte un outil d'étude puissant donnant la capacité de contrôler l'amplitude des oscillations.

- La LES permet aussi de fermer un bilan d'énergie acoustique complet qui étend le critère de Rayleigh à une formulation plus générale.

6.2.1 Amorçage de l'instabilité

Dans cette étude, le rôle des conditions limites est essentiel. En dehors des murs, c'est en effet en partie grâce au traitement approprié des ondes acoustiques sur les limites du domaine que cette étude a été rendue possible. Dans les écoulements que nous simulons, aucune approximation (type bas-mach) n'est faite sur l'acoustique. Nous résolvons donc en plus de l'écoulement convectif, le champ acoustique instationnaire du problème. Le parti pris de calculer l'acoustique s'intègre justement dans la volonté de disposer d'outils numériques adaptés à l'étude de phénomènes couplant l'acoustique instationnaire et les écoulements réactifs. Ces deux ingrédients sont indispensables à l'étude des instabilités thermoacoustiques. Une fois ce choix assumé, il faut être capable de traiter les ondes acoustiques interagissant avec les conditions limites, d'entrée et de sortie en l'occurrence.

L'objectif principal est de rendre les limites ouvertes du domaine perméables aux ondes tout en maintenant les consignes pour l'écoulement moyen. Ces deux objectifs peuvent paraître contradictoires. En effet imposer (sans latitude) une valeur donnée de pression en sortie rend cette dernière totalement réfléchissante, puisqu'on impose alors un noeud de pression acoustique ($p = p_0$ i.e. $p_1 = 0$). Si le même traitement est appliqué sur la vitesse en entrée, on impose alors des flux acoustiques nuls (Eq. 6.35) aux limites ouvertes. Les murs étant parfaitement réfléchissants, l'énergie acoustique, si elle n'est pas dissipée au sein du système (acoustiquement clos), ne peut que croître indéfiniment. Ceci rend alors indispensable le traitement acoustique des limites ouvertes sous peine de voir les niveaux de fluctuations acoustiques croître sans limite. Ce traitement est assuré par des conditions de type NSCBC [102] dont le fonctionnement est

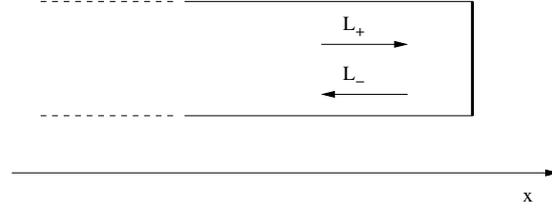


FIG. 6.4 – Configuration monodimensionnelle pour le calcul du coefficient de réflexion. $\frac{\mathcal{L}_-}{\mathcal{L}_+}$. \blacksquare condition de sortie relaxante sur la pression.

détaillé en Sec. 2.5.2. L'idée principale repose sur la capacité à expliciter les différentes ondes entrant ou sortant du domaine. On exprime alors l'ensemble des ondes en fonction des variable primitives (Eq. 2.93). Toutes les ondes sortantes peuvent être calculées explicitement par les relations Eq. 2.93. Par contre les ondes entrantes doivent être spécifiées par un autre moyen. À première vue, rien empêche de calculer les ondes entrantes à l'aide de l'équation 2.93. Il existe deux raisons simples pour ne pas opérer ainsi. On objecte en premier un problème numérique, car le calcul de gradients “downwind” est instable. Puis d'un point de vue physique, ces ondes portent l'information entrante, et ne peuvent donc pas être calculées sur les points intérieurs du domaine. Cette information entrante doit être spécifiée par l'utilisateur via les conditions NSCBC. C'est par l'intermédiaire de ces ondes entrantes que le comportement acoustique de limites du domaine est modulé. Dans cette étude, la modification d'un paramètre gérant le calcul de l'onde acoustique \mathcal{L}_-^{-1} entrant par la sortie est responsable de la naissance et la croissance d'une instabilité autoentretenu. Il ne faut pas non plus négliger l'influence des différentes entrées du système. Néanmoins, dans cette étude, les paramètres des conditions limites des entrées restent inchangés entre le cas stable et instable. L'influence des conditions limites d'entrée est donc passive mais non négligeable comme cela est souligné dans l'établissement d'un bilan d'énergie acoustique (Sec. 6.3). Il faut donc avant toutes choses préciser le comportement acoustique des conditions aux limites ouvertes servant dans ce calcul.

Coefficient de réflexion en sortie

L'objectif de la condition de sortie est de pouvoir faire entrer l'information sur la pression de consigne tout en conservant un comportement globalement non-réfléchissant pour les ondes sortantes. Pour un écoulement subsonique la seule information qui peut remonter l'écoulement est portée par l'onde \mathcal{L}_- . C'est donc par cette seule onde que l'on pourra influencer sur une condition de sortie. On se sert alors de l'onde entrante pour corriger la dérive par rapport à la consigne de pression p_∞ . La méthode employée dans AVBP utilise une méthode de relaxation

¹c'est en réalité la variation d'amplitude de l'onde puisque : $\mathcal{L}_k = \lambda_k \frac{\partial A_k}{\partial x} = -\frac{\partial A_k}{\partial t}$. Cet abus de langage est couramment utilisé dans la littérature

linéaire sur la pression en sortie. On impose alors comme onde entrante :

$$\mathcal{L}_- = K_p(p - p_\infty) \quad (6.1)$$

L'amplitude de l'onde est proportionnelle à un terme de rappel analogue à celui trouvé dans un problème masse ressort. Cette formulation est totalement non-réfléchissante si et seulement si $p = p_\infty$. En pratique, toute onde sortante influant sur la pression va induire l'introduction d'une onde \mathcal{L}_- proportionnelle à la dérive en pression afin de corriger cette dernière. On voit bien qu'en pratique une partie de l'onde sortante sera réfléchiée par la condition de sortie. Les travaux de Selle *et al.* dans [132], proposent une expression analytique du coefficient de réflexion $R_{out} = \frac{\mathcal{L}_-}{\mathcal{L}_+}$, obtenue pour une onde (\mathcal{L}_+) plane impactant une sortie (Fig. 6.4) avec relaxation sur la pression. Nous reprenons ici cette analyse qui nous permet d'estimer les caractéristiques fréquentielles du coefficient de réflexion sur la sortie de notre domaine de calcul. L'onde impactant la sortie est supposée être plane et harmonique. On la décrit par :

$$\mathcal{L}_+ = 2\rho cu_0 i\omega e^{-i\omega t} \quad (6.2)$$

La condition limite de sortie impose via Eq. 6.1 l'onde entrante. En injectant ces expressions des ondes² dans Eq. 2.95 on obtient :

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2} (2\rho cu_0 i\omega e^{-i\omega t} + K_p(p - p_\infty)) = 0 \quad (6.3)$$

dont la solution pour la pression sur la sortie est :

$$p(t) = p_\infty + a_0 e^{-\frac{K_p t}{2}} - \frac{\rho cu_0 i\omega}{\frac{K_p}{2} - i\omega} e^{-i\omega t} \quad (6.4)$$

Le second terme du membre de droite $a_0 e^{-\frac{K_p t}{2}}$ est une contribution transitoire éventuelle à la solution ($a_0 \simeq (p(t=0) - p_\infty)$), qui tend de toute manière à s'annuler. Ce terme est alors négligé dès lors que toute dérive de la pression moyenne en sortie est nulle. Sous cette hypothèse, l'expression de $p(t) = p_\infty - \frac{\rho cu_0 i\omega}{\frac{K_p}{2} - i\omega} e^{-i\omega t}$ sert à expliciter \mathcal{L}_- dans Eq. 6.1. On peut alors exprimer le coefficient de réflexion complexe :

$$R_{out} = \frac{\mathcal{L}_-}{\mathcal{L}_+} = -\frac{1}{1 - i\frac{2\omega}{K_p}} \quad (6.5)$$

Cette expression du coefficient de réflexion est similaire à la fonction de transfert d'un filtre passe bas du premier ordre. On extrait le module et l'argument de

²seulement valables sur la sortie

R_{out} afin de pouvoir établir un diagramme de Bode permettant de caractériser le comportement fréquentiel de la condition de sortie. L'expression du module et de la phase donnent :

$$|R_{out}| = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2\omega}{K_p}\right)^2}} \quad (6.6)$$

$$\phi_{Rout} = -\pi - \arctan\left(\frac{2\omega}{K_p}\right) \quad (6.7)$$

Le module du coefficient de reflexion est donc à la fois fonction de K_p qui est un paramètre à fixer et de la fréquence de l'onde incidente qui est un résultat du calcul.

Il est à noter que les paramètres des conditions limites ont une influence sur les modes s'exprimant dans les cavités ouvertes, en particulier sur les fréquences de ces modes. Ceci peut être expliqué par le fort déphasage que subissent les ondes de fréquence supérieure à la fréquence de coupure (Fig. 6.5). Ce faisant, la condition de sortie se comporte comme si la réflexion (fortement atténuée certes) de l'onde incidente était rejetée de plus en plus loin en aval. On peut visualiser cela comme l'allongement artificiel du domaine par un tube guide d'onde débouchant lui-même sur l'atmosphère. Ceci a pour conséquence de modifier les fréquences propres du système que l'on peut intuitivement plus basses. Ce phénomène n'ayant lieu que pour les fréquences fortement atténuées, ces modes ne s'expriment que très faiblement dans les calculs. Selle *et al.*[132] proposent une analyse de ce phénomène sur un tube guide d'onde dont l'entrée est acoustiquement réfléchissante et la sortie utilise la condition relaxante. Ils montrent analytiquement, que pour une longueur de tube donnée, la fréquence associée au premier mode (mais aussi des suivants) croît avec le coefficient de relaxation K_p , jusqu'à atteindre la valeur asymptotique de $f_0 = \frac{c}{4L}$. On retrouve alors sur l'expression analytique des fréquences propres d'un guide d'onde de longueur L avec noeud de vitesse en entrée et noeud de pression en sortie ($f_n = (2n + 1)\frac{c}{4L}$). Ceci nous indique, que si l'on est capable de déterminer la fréquence propre du mode de plus basse fréquence avec des conditions limites acoustiquement réfléchissantes, on peut alors définir la valeur de K_p qui permet d'éviter de faire résonner le mode concerné, en permettant aux ondes de sortir du domaine. Néanmoins, cette étude nous indique justement que ce faisant (diminuer K_p), la fréquence du premier mode est abaissée. Ceci est confirmé dans notre cas avec le glissement en fréquence (de $270Hz$ à $380Hz$) du mode longitudinal avec l'augmentation du coefficient de relaxation. En replaçant ces informations sur le diagramme de Bode de R_{out} (Fig. 6.5), on s'aperçoit que le coefficient de réflexion réel, associé au mode instable est inférieur à celui attendu si sa fréquence était resté inchangée.

Prenant en compte ces observations, nous allons les vérifier sur un calcul réactif tridimensionnel du brûleur ECPmod. En premier lieu, un calcul utilisant des conditions d'entrée et de sortie non-réfléchissantes est effectué.

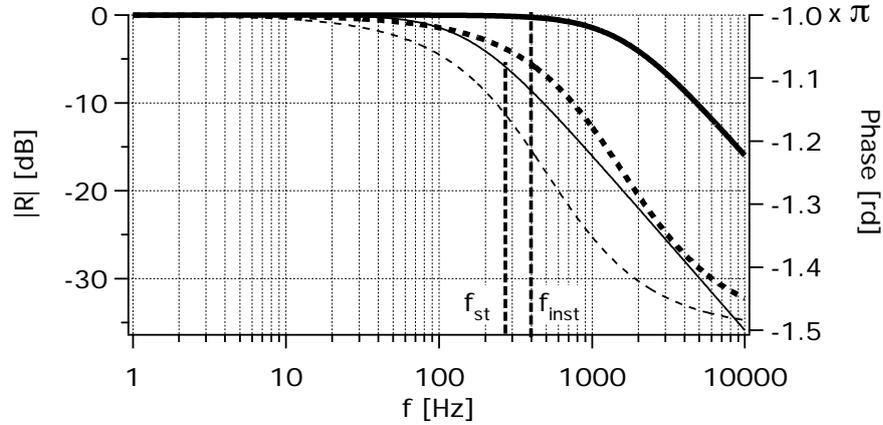


FIG. 6.5 – Digramme de Bode du coefficient de réflexion acoustique en sortie. $K_p = 1000$: — $|R|$, - - - $arg(R)$; $K_p = 10000$: — $|R|$, - - - $arg(R)$.

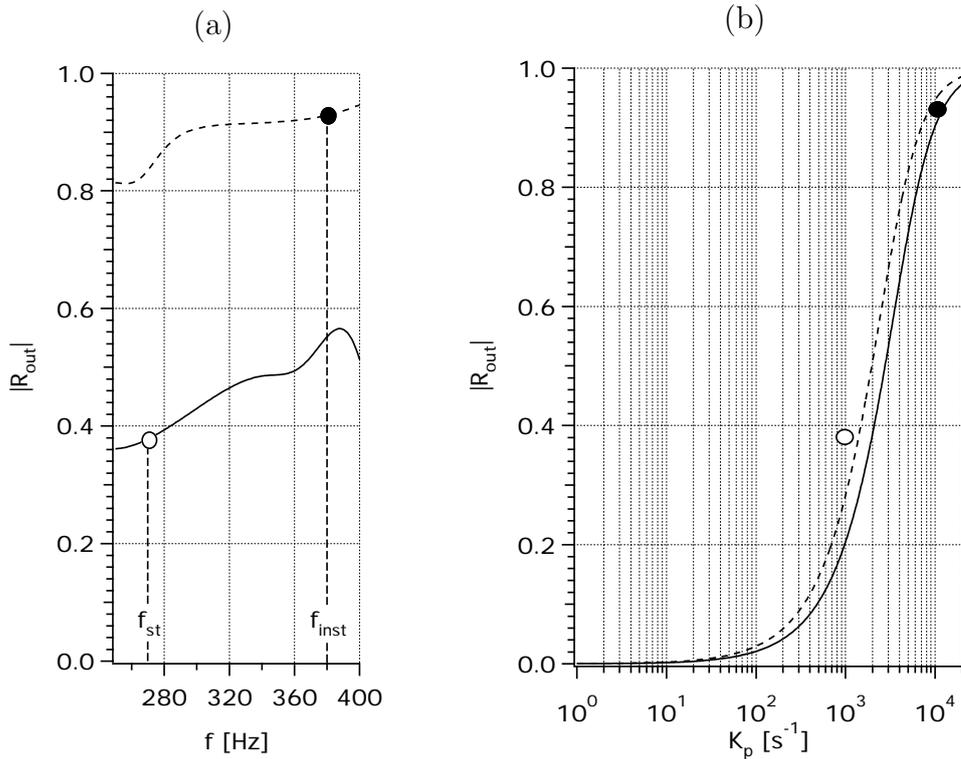


FIG. 6.6 – Evaluation du module du coefficient de réflexion : (a) Mesure calcul, — $K_p = 1000$, - - - $K_p = 10000$. \circ mesure de $|R_{out}|(f = 270Hz)$, \bullet mesure de $|R_{out}|(f = 380Hz)$. (b) Analytique (Eq. 6.6), — $|R_{out}|(f = 380Hz)$, - - - $|R_{out}|(f = 270Hz)$.

L'observation du signal de pression moyenne nous permet d'affirmer que le brûleur est acoustiquement stable ($\frac{\max|p_1|}{p_0} < 0.5\%$). L'analyse spectrale révèle cependant l'existence d'un mode longitudinal de faible amplitude à la fréquence $f_{st} = 270Hz$ (Sec. 5.2.2). Pour ce calcul stable, on a utilisé un coefficient de relaxation en sortie $K_p = 1000$. Le diagramme de Bode réalisé (Fig. 6.5) à partir de Eq. 6.6 permet de constater que les ondes réfléchies à cette fréquence sont fortement atténuées ($|R_{out}| \simeq -6dB$). Si l'on souhaite faire résonner le système, il faut alors augmenter K_p . Mais comme démontré dans [132] ceci va induire un glissement de la fréquence de résonance. On augmentera K_p suffisamment pour que malgré cet effet de phase, la condition limite soit suffisamment réfléchissante pour induire une résonance. En multipliant par 10 la valeur initiale de K_p , on obtient alors la croissance forte d'un mode longitudinal, qui fait rentrer l'ensemble du brûleur dans un mode de fonctionnement totalement instable (Fig. 6.7, $t > 0.127s$). La fréquence associée à cette instabilité est $f_{inst} = 380Hz$. On constate bien l'augmentation de fréquence du mode longitudinal avec l'augmentation de K_p . Connaissant les deux fréquences des modes s'exprimant à la fois dans le cas stable et instable (resp. f_{st} et f_{inst}), on peut repérer sur le digramme de Bode de Fig. 6.5, la valeur du coefficient de réflexion réel effectif dans chaque cas. On peut néanmoins objecter que ce diagramme à été établi sur une configuration bien plus simple, et donc mettre en doute l'opportunité de se servir de Eq. 6.6 ici. Nous proposons donc de mesurer *in situ* le module du coefficient de réflexion. Pour cela nous reconstruisons L^+ et L^- à partir des signaux temporels de la vitesse et de la pression sur la sortie concernée :

$$\mathcal{L}^+ = \rho c \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial t} \quad (6.8)$$

$$\mathcal{L}^- = \frac{\partial p}{\partial t} - \rho c \frac{\partial u}{\partial t} \quad (6.9)$$

Pour obtenir la valeur de $|R_{out}|$ pour chaque fréquence, les deux signaux sont décomposés en série de Fourier. On calcule alors le rapport des coefficients respectifs de chaque harmonique pour déterminer le coefficient de réflexion correspondant. Le principal inconvénient de cette méthode est d'induire une erreur assez forte dès que l'énergie contenue dans l'harmonique considérée est faible. En effet effectuer le rapport de deux quantité très petites, déterminées avec une précision limitée³ peut mener à des résultats entachés d'une erreur importante (non physique e.g. $|R_{out}| > 1$). On ne prendra donc en compte que les valeurs de $|R_{out}|$ sur la gamme de fréquences énergétiques. Les valeurs mesurées sur les calculs sont présentées sur Fig. 6.6a. Les deux marqueurs correspondant à la valeur mesurée dans les deux cas stables et instables sont reportés sur le diagramme voisin Fig. 6.6b. Ce dernier représente l'évolution de l'expression analytique de $|R_{out}|$ en fonction de K_p paramétré par la fréquence de l'onde. On observe un accord

³duréé limitée du signal etc.

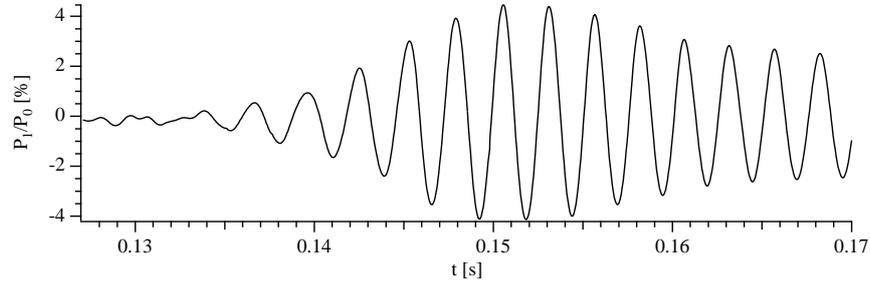


FIG. 6.7 – Evolution de la fluctuation de pression normalisée par la pression de fonctionnement.

tout à fait honorable entre les mesures issues du calcul et l'approche analytique. Ceci permet de valider l'utilisation dans un cas de calcul réel de la formule de R_{out} qui sera utilisée en particulier dans l'article présenté au chapitre 7.

6.2.2 Description de la séquence instable

La section précédente a explicité le comportement de la condition limite de sortie en termes de coefficient de réflexion des ondes sortantes (par la sortie de chambre). Ayant établi un calcul stable, où le niveau de pression instationnaire reste faible ($< 0.5\%P_0$), on modifie à $t = 0.127s$ (Fig. 6.7) la valeur du coefficient de relaxation sur la pression pour la condition limite de sortie, passant d'une valeur de $1000s^{-1}$ à $10000s^{-1}$. Comme on a pu l'estimer en Sec. 6.2.1, la fonction de transfert du coefficient de réflexion voit sa fréquence de coupure⁴ abaissée brutalement de $1500Hz$ à $150Hz$ (Fig. 6.5). La prédiction des fréquences des premiers modes propres par le solveur d'Helmholtz AVSP (Sec. 5.2.2) est inférieure à $450Hz$. L'augmentation du coefficient de relaxation sur la pression en sortie, induit une augmentation notable du coefficient de réflexion pour la gamme de fréquences correspondant aux modes propres du système. Le coefficient de réflexion (Sec. 6.2.1) passe alors de 0.4 à 0.9 vers $[300; 400]Hz$. On observe alors la naissance d'une instabilité autoentretenu caractérisé par un niveau de pression instationnaire élevé (Fig. 6.7). L'apparition de cette instabilité n'est pas seulement le fait de l'expression d'un mode acoustique puisant son énergie dans le bruit de la flamme. Il sera montré par la suite que le phénomène de combustion participe activement à l'établissement de cette instabilité par un couplage associant combustion, acoustique et hydrodynamique. La phase de croissance de l'instabilité ($0.127s < t < 0.15s$) sera analysée en Sec. 6.3.1 tandis que l'aspect énergétique du problème est développé dans les sections suivantes. Une application de ces développements est proposée sur la séquence instable présente en chapitre 7.

⁴ $f(R_{out}) = -3dB$

6.3 Construction d'une équation de bilan d'énergie acoustique

L'objectif ici, est d'établir une équation de bilan pour une quantité e_1 qui permet de quantifier le niveau d'énergie acoustique d'un système. Cette quantité est définie par Landau [61] comme étant l'énergie mécanique associée aux fluctuations acoustiques.

$$e_1 = \frac{1}{2}\rho_0 u_1^2 + \frac{1}{2}\frac{p_1^2}{\rho_0 c_0^2} \quad (6.10)$$

où chaque grandeur est décomposée en une partie stationnaire indiquée 0 et fluctuante (à moyenne temporelle nulle) indiquée 1 :

$$f = f_0 + f_1 \quad (6.11)$$

Equation de bilan

Nous avons besoin tout d'abord de rappeler les équations de Navier-Stokes et d'énergie qui caractérisent les écoulements réactifs multi-espèces[105][14]. On y omettra néanmoins les effets des forces en volume de type électromagnétiques ou d'Archimède, ainsi que les sources volumiques de chaleur comme le rayonnement.

– Conservation de la masse :

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.12)$$

– Conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (6.13)$$

– Conservation de l'énergie :

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \dot{\omega}'_T + \frac{Dp}{Dt} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} - \left(\rho \sum_{k=1}^K C_{p,k} Y_k \mathbf{V}_k \right) \cdot \nabla T \quad (6.14)$$

En divisant l'équation de l'énergie Eq. 6.14 par $\rho C_p T$ et en introduisant l'équation d'état $p = \rho r T$ ainsi que l'Eq. 6.12, on obtient :

$$\frac{1}{\gamma} \frac{D \ln p}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\rho C_p T} \left[\dot{\omega}'_T + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} - \left(\rho \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k \mathbf{V}_k \right) \cdot \nabla T \right] + \frac{1}{r} \frac{Dr}{Dt} \quad (6.15)$$

Pour la suite, nous ferons les hypothèses suivantes :

- La partie fluctuante est dominée par l'acoustique et non par la turbulence ou l'hydrodynamique.
- écoulement à faible nombre de Mach : $M = \frac{|u|}{c} \ll 1$. Cette hypothèse permet de négliger le terme convectif ($o(M_0)$) par rapport au terme temporel ($o(1)$) dans les dérivées particulières de grandeurs instationnaires :

$$\frac{Df_1}{Dt} = \frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla f_1 \quad (6.16)$$

on caractérise l'évolution temporelle par un temps acoustique τ_{ac} . L'échelle de longueur associée est $\lambda_{ac} = \tau_{ac}c$. On montre par l'analyse d'ordre :

$$o\left(\frac{Df_1}{Dt}\right) = o\left(f_1 \left(\frac{1}{\tau_{ac}} + \frac{|u|}{\lambda_{ac}}\right)\right) \quad (6.17)$$

$$= o\left(\frac{f_1}{\tau_{ac}} (1 + M)\right) \quad (6.18)$$

Le terme convectif de la dérivée particulière est donc de l'ordre du nombre de Mach qui, dans nos applications sont habituellement très faible ($M < 0.03$) :

$$\frac{Df_1}{Dt} \simeq \frac{\partial f_1}{\partial t} \quad (6.19)$$

Dans ces conditions, la dérivée particulière de la grandeur scalaire f donne au premier ordre :

$$\begin{aligned} \frac{Df}{Dt} &= \frac{Df_0}{Dt} + \frac{Df_1}{Dt} \\ &\simeq \frac{\partial f_0}{\partial t} + (\mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1) \nabla f_0 + \frac{\partial f_1}{\partial t} \\ &\simeq \underbrace{\mathbf{u}_0 \nabla f_0}_{o(0)} + \underbrace{\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{u}_1 \nabla f_0}_{o(1)} \end{aligned} \quad (6.20)$$

- on néglige la contribution du tenseur des contraintes visqueuses : $\tau \simeq 0$
- on considère que toutes les espèces ont même poids moléculaire, ce qui permet de négliger à la fois le terme diffusif et de dérivée particulière de r dans l'Eq. 6.15

On obtient alors une version simplifiée de l'Eq. 6.15 :

$$\frac{1}{\gamma} \frac{D \ln p}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\rho C_p T} \dot{\omega}_T \quad (6.21)$$

Pour linéariser cette équation, on introduit les décompositions de \mathbf{u} , ρ , p :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1 \quad \text{avec} \quad \frac{\mathbf{u}}{c_0} \ll 1 \quad (6.22)$$

$$p = p_0 + p_1 \quad \text{avec} \quad \frac{p_1}{p_0} \ll 1 \quad (6.23)$$

$$\rho = \rho_0 + \rho_1 \quad \text{avec} \quad \frac{\rho_1}{\rho_0} \ll 1 \quad (6.24)$$

$$\dot{\omega}_T = \dot{\omega}_{T,0} + \dot{\omega}_{T,1} \quad \text{avec} \quad \frac{\dot{\omega}_{T,0}}{\dot{\omega}_{T,1}} \ll 1 \quad (6.25)$$

Cette décomposition suppose que le terme moyen (indiqué 0) restant quasi constant au court du temps, on peut négliger sa variation temporelle : ($\frac{\partial f_0}{\partial t} = 0$). En appliquant les décompositions précédentes à Eq. 6.21 et ne retenant que les termes du premier ordre, on a :

$$\frac{1}{\gamma} \left(\frac{\partial \ln p_1}{\partial t} + \mathbf{u}_1 \nabla \ln p_0 \right) + \nabla \cdot \mathbf{u}_1 = \frac{1}{\rho C_p T} \dot{\omega}_{T,0} \quad (6.26)$$

Le terme convectif en $\mathbf{u}_1 \nabla \ln p_0 = \frac{\mathbf{u}_1}{p_0} \nabla p_0$ est négligeable [105][65] puisque le gradient de la pression moyenne (pertes de charge) reste faible dans les systèmes étudiés. En prenant en compte la relation $C_p = \frac{\gamma r}{\gamma - 1}$ et la loi d'état des gaz parfaits on obtient :

$$\frac{1}{\gamma p_0} \frac{\partial p_1}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u}_1 = \frac{\gamma - 1}{\gamma p_0} \dot{\omega}_{T,1} \quad (6.27)$$

Nous avons aussi besoin de linéariser l'Eq. 6.13 où l'on néglige le terme visqueux, ainsi que les dérivées spatiales devant les dérivées temporelles (hypothèse bas Mach) :

$$\frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p_1 \quad (6.28)$$

En sommant Eq. 6.27* p_1 et Eq. 6.28* \mathbf{u}_1 on fait apparaître l'énergie acoustique e_1 (Eq. 6.10) dans l'équation de bilan :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho_0 u_1^2 + \frac{1}{2} \frac{p_1^2}{\rho_0 c_0^2} \right) + \nabla \cdot (p_1 \mathbf{u}_1) = \frac{(\gamma - 1)}{\gamma p_0} p_1 \dot{\omega}_{T,1} \quad (6.29)$$

en posant :

$$f_1 = p_1 \mathbf{u}_1 \quad (6.30)$$

$$s_1 = \frac{(\gamma - 1)}{\gamma p_0} p_1 \dot{\omega}_{T,1} \quad (6.31)$$

on obtient une forme plus compacte du bilan d'énergie acoustique :

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} = s_1 - \nabla \cdot p_1 \mathbf{u}_1 \quad (6.32)$$

Le terme s_1 est la corrélation entre le taux dégagement de chaleur instationnaire et la pression instationnaire. Il correspond au fameux critère de Rayleigh [113] qui mesure le couplage (ici local et instantané) entre l'acoustique et la flamme. Si on suppose une instationarité harmonique de période T , le critère de Rayleigh local est la moyenne sur une période de s_1 :

$$\mathcal{S}_1 = \frac{1}{T} \int_0^T s_1(t) dt \quad (6.33)$$

On note qu'il peut agir en tant que terme source ou puits en fonction du niveau de corrélation entre les deux signaux. Dans de nombreuses études, le critère de Rayleigh est mis en avant comme condition nécessaire mais non suffisante à la naissance d'une instabilité thermo-acoustique. En effet dans l'étude de Rayleigh les conditions aux limites de l'exercice imposent un flux acoustique nul sur toutes les frontières du domaine (tube de Rijke). Dans ces conditions le système possède un taux d'amplification positif de perturbations si et seulement si $S_1 > 0$. Plus littéralement on lit que "les fluctuations du dégagement de chaleur doivent être en phase avec la pression". Cette assertion n'est pas tout à fait rigoureuse puisqu'on peut montrer que l'intégrale sur un période du produit de deux signaux harmonique déphasés de ϕ reste positive si et seulement si $-\frac{\pi}{2} < \phi < \frac{\pi}{2}$ (Eq. 6.34). Les signaux de pression de dégagement de chaleur peuvent être déphasés et néanmoins produire une source d'énergie acoustique.

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T \sin(\omega t) \sin(\omega t + \phi) dt &= \frac{1}{2T} \left[t \cos(\phi) - \frac{\sin(2\omega t + \phi)}{2\omega} \right]_0^T \\ &= \frac{1}{2} \cos(\phi) \end{aligned} \quad (6.34)$$

6.3.1 Mesure du taux d'amplification

Dans cette section, on se propose de comparer la mesure du taux d'amplification obtenue par deux méthodes différentes. Premièrement de manière directe sur le signal de pression moyenne du brûleur puis à l'aide d'une dérivation de Eq. 6.32.

Expression du taux d'amplification

L'Eq. 6.32 permet d'évaluer le taux d'amplification d'une instabilité. On peut l'intégrer sur le volume du brûleur. À l'aide du théorème de la divergence, on

obtient :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} e_1 dV + \int_{\partial\Omega} p_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} dA &= \int_{\Omega} s_1 dV \\ \frac{d}{dt} E_1 + F_1 &= S_1 \end{aligned} \quad (6.35)$$

On note que l'on a utilisé la commutation de l'opération de dérivation partielle $\frac{\partial}{\partial t}$ et de l'intégrale, puis transformé la dérivée partielle $\frac{\partial}{\partial t}$ par une dérivée droite $\frac{d}{dt}$ car elle ne s'applique plus à un champ spatial e_1 mais à une fonction scalaire E_1 . On note l'apparition d'un terme de flux F_1 qui correspond à la somme des flux acoustiques. Si on raisonne en termes d'onde plane :

$$p_1 = A^+ + A^- \quad (6.36)$$

$$u_1 = \frac{1}{\rho_0 c_0} (A^+ - A^-) \quad (6.37)$$

Le flux a alors pour expression :

$$\begin{aligned} F_1 &= \int_{\partial\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0} (A^+ + A^-) (A^+ - A^-) \mathbf{n} dA \\ &= \int_{\partial\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0} (A^{+2} - A^{-2}) \mathbf{n} dA \end{aligned} \quad (6.38)$$

Ce flux quantifie donc bien la différence entre l'énergie acoustique entrante ($\simeq A^{-2}$) et sortante ($\simeq A^{+2}$) aux limites. Le terme F_1 est de signe quelconque. Il reflète le "comportement acoustique" des limites spatiales du domaine. Par exemple, la contribution de murs rigides à ce terme sera nulle puisque $\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} = 0$. De même que pour la contribution de la section d'un tube débouchant sur l'atmosphère, où on impose académiquement $p_1 = 0$. À l'inverse le flux acoustique émanant d'un haut-parleur sera négatif. La normale pointant vers l'extérieur du domaine, on voit les flux positifs "vider" l'énergie du système. Cette convention n'étant pas très intuitive, on considérera le plus souvent le terme $-F_1$ qui est négatif quand de l'énergie est évacuée du système. L'établissement de l'expression du taux d'amplification nécessite de poser certaines hypothèses. En effet on va définir le taux d'amplification g comme le rapport de l'amplitude du signal de pression d'une période sur la suivante. On suppose par là que l'instabilité est harmonique. En effet on est amené à moyenniser Eq. 6.35. On définit alors la forme générale des variables de Eq. 6.35 comme des fonctions harmoniques :

$$p_1 = p_{\omega}(t) \sin(\omega t), \quad \mathbf{u}_1 = u_{\omega}(t) \sin(\omega t), \quad \dot{\omega}_{T,1} = \omega_{\omega}(t) \sin(\omega t) \quad (6.39)$$

En moyennant sur une période (glissante) $T = \frac{2\pi}{\omega}$ Eq. 6.35 on obtient :

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}_1 + \mathcal{F}_1 = \mathcal{S}_1 \quad (6.40)$$

où

$$\mathcal{E}_1 = \int_{\Omega} \frac{1}{T} \int_T e_1 dt = \frac{1}{4\rho_0 c_0^2} p_{\omega} p_{\omega}^* + \frac{1}{4} \rho_0 \mathbf{u}_{\omega} \mathbf{u}_{\omega}^* \quad (6.41)$$

$$\mathcal{F}_1 = \int_{\Omega} \frac{1}{T} \int_T p_1 \mathbf{u}_1 dt = \frac{1}{2} \Re(p_{\omega} \mathbf{u}_{\omega}^*) \quad (6.42)$$

$$\mathcal{S}_1 = \int_{\Omega} \frac{1}{T} \int_T s_1 dt = \frac{(\gamma - 1)}{2\gamma p_0} \Re(p_{\omega} \dot{w}_{\omega}^*) \quad (6.43)$$

En supposant une croissance exponentielle de l'instabilité avec un taux d'amplification g on pose :

$$p_{\omega}(t) = P_1 e^{gt}, \quad \mathbf{u}_{\omega} = \vec{U}_1 e^{gt} \quad \text{et} \quad \dot{w}_{\omega} = W_1 e^{gt} \quad (6.44)$$

on obtient alors pour Eq. 6.41 :

$$\mathcal{E}_1 = \left(\frac{P_1^2}{4\rho_0 c_0^2} + \frac{\rho_0 U_1^2}{4} \right) e^{2gt} \quad (6.45)$$

$$\mathcal{F}_1 = \frac{1}{2} P_1 U_1 e^{2gt} \quad (6.46)$$

$$\mathcal{S}_1 = \frac{\gamma - 1}{2\gamma p_0} e^{2gt} \quad (6.47)$$

En réinjectant ces expressions dans Eq. 6.40 on peut alors obtenir le taux d'amplification g :

$$g = \frac{1}{2\mathcal{E}_1} (\mathcal{S}_1 - \mathcal{F}_1) \quad (6.48)$$

Mesure du taux d'amplification

Nous utilisons ici l'expression du taux d'amplification g (Eq. 6.48). Nous avons évalué tous les termes de (Eq. 6.48) en post traitant les solutions du calcul instable. Les décompositions (Eq. 6.11) sont effectuées en prenant le champ moyen de la grandeur considérée comme valeur stationnaire. Les fluctuations sont évaluées en retranchant le champ moyen au champ instantané. Les champs de fluctuations $p_1, \mathbf{u}_1, \dot{w}_{T,1}$ servent alors à calculer $e_1(\mathbf{x}, t), p_1 \mathbf{u}_1(\mathbf{x}, t), s_1(\mathbf{x}, t)$. On opère d'abord une intégration spatiale de $e_1(\mathbf{x}, t), p_1 \mathbf{u}_1(\mathbf{x}, t), s_1(\mathbf{x}, t)$ en $E_1(t), F_1(t), S_1(t)$. Puis le calcul de g s'effectue en appliquant Eq. 6.48. La moyenne temporelle est effectuée sur une succession de périodes (Fig. 6.8). Cette évaluation fournit une série de valeurs pour g dont la fourchette est :

$$150 < g < 225 \quad (6.49)$$

Nous calculons ensuite g directement sur le signal de pression moyenne, dont la mesure fera référence, afin de comparer les évaluations.

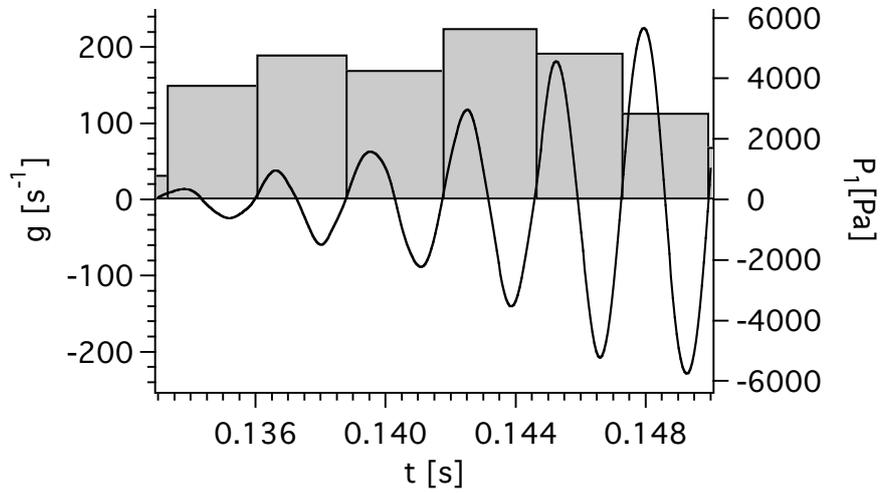


FIG. 6.8 – Evaluation du taux d'amplification (■) sur périodes successives, par application de Eq. 6.48. — signal de pression moyenne mesuré dans le calcul.

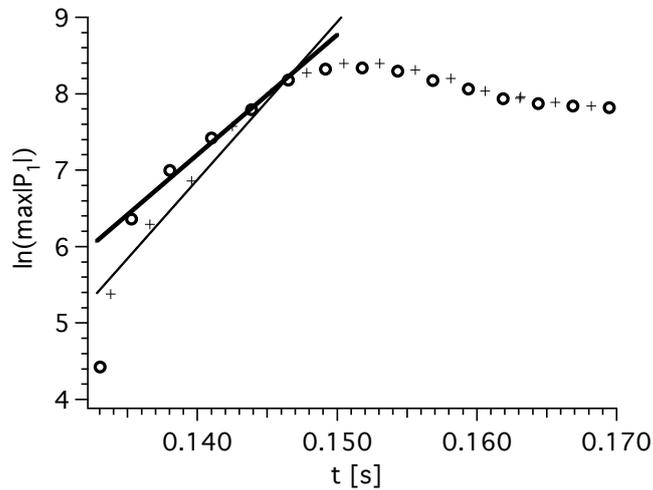


FIG. 6.9 – Mesure du taux d'amplification sur le signal de pression moyenne. — régression linéaire sur l'enveloppe négative (+) ($\ln |\min(p_1)|$); — régression linéaire sur l'enveloppe positive (o) ($\ln |\max(p_1)|$).

Mesure directe du taux d'amplification

La mesure du taux d'amplification de l'instabilité par la méthode directe nécessite d'extraire l'enveloppe du signal de pression. En supposant une évolution mono-harmonique on peut supposer que le signal de pression moyenne est de la forme de Eq. 6.39. En résolvant $\frac{d}{dt}p_1 = 0$ on trouve l'ensemble des points de p_1 appartenant à l'enveloppe $p_\omega(t) = P_1 e^{gt}$. En prenant le logarithme de cette expression on a :

$$\ln(p_1) = \ln(P_1) + gt \quad (6.50)$$

Il suffit alors d'évaluer la pente de l'enveloppe de $\ln(p_1)$ durant la phase de croissance de l'instabilité pour en estimer le taux d'amplification g . On a reporté ces opérations sur Fig. 6.9. On a pu évaluer g à la fois sur la partie négative et positive de l'enveloppe. Ceci permet de d'établir une fourchette qui se trouve être plus resserrée que celle donnée par l'Eq. 6.49 :

$$160 < g < 206 \quad (6.51)$$

Eq. 6.49 et Eq. 6.51 donnent une évaluation du taux d'amplification g par application respectivement de l'Eq. 6.48 et de la mesure directe. Même si cette évaluation présente une certaine dispersion, la méthode directe et l'application de Eq. 6.48 fournissent toutes deux des fourchettes cohérentes.

Reconstruction du signal

Nous confrontons l'hypothèse de croissance linéaire du mode ainsi que l'évaluation du coefficient d'amplification aux mesures relevées dans le calcul. Ayant obtenu une fourchette de valeurs pour le taux d'amplification, nous reconstruisons un signal synthétique p_1^{synth} :

$$p_1^{synth} = P_s \cos(2\pi f_s(t - t_s)) e^{(g_s(t-t_s))} \quad (6.52)$$

Ce signal reconstruit, est comparé à la pression instationnaire moyenne (Fig. 6.10). On a choisi arbitrairement un taux d'amplification tel que : $g_s = 190s^{-1}$. La mesure de la fréquence de l'instabilité donne : $f_s = 360Hz$. Le marqueur noir situe l'origine choisie permettant de définir $(t_s, P_s) = (0.1352s, -640Pa)$ soit environ une période après l'initiation de l'instabilité. On note une bonne concordance entre la mesure et le signal reconstruit, et ce jusqu'à l'approche du cycle limite ($t \simeq 0.15s$).

6.4 Mise en oeuvre et analyse du bilan d'énergie acoustique

Nous mettons en oeuvre la fermeture du bilan acoustique sur le calcul de l'ensemble du cycle instable. L'étude de la phase d'amplification ayant donné

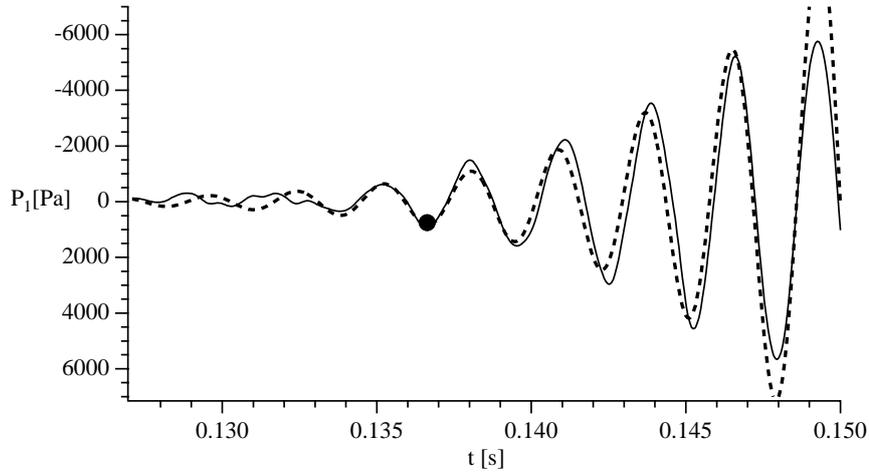


FIG. 6.10 – Comparaison du signal de pression moyenne mesuré dans le calcul (—) et du signal synthétique reconstruit (----). • : (t_s, P_s)

des résultats encourageants, nous proposons la mise en oeuvre de la fermeture du bilan d'énergie acoustique (**BEA**). Néanmoins la validité de dérivation doit normalement se borner à la phase de croissance linéaire. Il est en effet délicat d'appliquer une dérivation d'équations linéarisées à un cycle limite où en théorie les non-linéarités sont non négligeables. On peut y opposer, que les niveaux de pression ou de vitesse instationnaire, nous placent dans le régime linéaire même au plus fort de l'instabilité où $\max|p_1| \simeq 6000Pa$ soit environ 5% de la pression moyenne. Les vitesses acoustiques correspondantes sont comprises entre 15 et 35m/s respectivement pour les gaz frais et brûlés soit environ 4% de c_0 .

Pour chaque cas étudié, on présentera les courbes d'évolution de :

- l'énergie acoustique globale $E_1(t)$ du système.
- des différentiels flux acoustiques
- La somme de flux acoustiques $F_1(t)$ et du terme source thermo-acoustique $S_1(t)$.

Pour s'assurer de la fermeture du BEA on comparera la dérivée temporelle de l'énergie acoustique globale $\frac{dE_1}{dt}$ aux autres termes du bilan passés à droite dans Eq. 6.35, i.e. $S_1(t) - F_1(t)$. Ce test est très exigeant car il nécessite que la LES résolve justement plusieurs aspects du phénomène (hydrodynamique, acoustique, combustion turbulente prémélangée) et leurs couplages éventuels. Il éprouve aussi sur notre configuration les hypothèses faites pour obtenir Eq. 6.29.

Mais avant tout nous effectuons deux cas test laminaires permettant de tester le BEA en configuration simple.

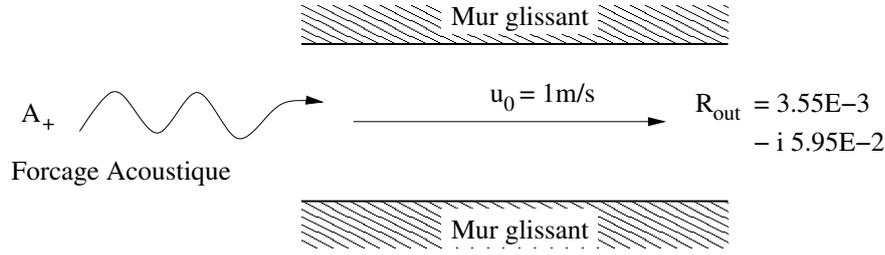


FIG. 6.11 – Configuration du cas test Canal laminaire 1D (CL1D).

6.4.1 Tests Préliminaires

Ces tests ont permis de valider les outils de post-traitement développé pour pouvoir estimer les différents termes de l'équation de bilan d'énergie acoustique. La démarche de validation suit une marche croissante en augmentant graduellement la complexité des cas tests. Je tiens à associer Alexis Giauque avec qui ce travail de développement et tests a été mené conjointement. Je le remercie de sa participation.

Écoulement laminaire 1D pulsé

Nous effectuons les premiers tests de fermeture du BEA sur le cas le plus simple possible. On considère un écoulement monodimensionnel de longueur $L = 0.6m$ (Fig. 6.11). Cet écoulement étant non-réactif, ceci permet d'annuler le terme source S_1 . L'équation à fermer se réduit alors à :

$$\frac{dE_1}{dt} = -F_1 \quad (6.53)$$

Ce qui signifie qu'en l'absence de source thermo-acoustique (S_1) et de dissipation (négligée), les seules variations d'énergie acoustique du système ne peuvent se faire que par l'apport ou la fuite d'énergie au travers des limites du domaine.

Cette configuration en guide d'onde permet de simplifier encore le calcul de termes du bilan. En particulier pour le terme de flux F_1 , qui se réduit alors aux contributions de l'entrée et de la sortie. On s'assure de la fermeture du BEA en comparant l'évolution de la somme de flux acoustique et la dérivée de l'énergie e_1 . A la sortie du domaine, on applique une condition de type NSCBC relaxante sur la pression. L'entrée, reçoit un traitement plus particulier. On y force l'introduction d'une onde acoustique plane d'une amplitude $\max|u_1| = 0.5u_0$. On peut vérifier que l'on reste dans les limites de l'acoustique linéaire avec la loi d'échelle pour les perturbations acoustiques :

$$p_1 \simeq \rho_0 c_0 u_1 \quad (6.54)$$

Dans notre cas, $\max|p_1| \simeq 195Pa$ soit environ 0.2% de la pression ambiante, ce qui confirme le régime linéaire de l'acoustique de notre cas test. On choisit la

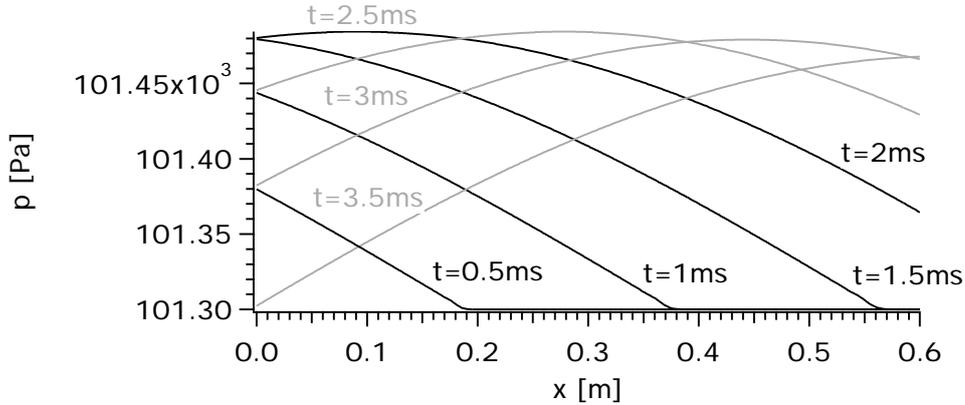


FIG. 6.12 – Canal Laminaire Pulsé : train d'ondes de pression.

fréquence de pulsation proche de celle du mode quart d'onde calculé en condition réfléchissante. C'est-à-dire en supposant que $u_1 = 0$ entrée et $p_1 = 0$ en sortie :

$$f_{1/4} = \frac{c}{4L} \quad (6.55)$$

Pour les conditions présentes, on a $f_{1/4} = 142Hz$. La condition d'entrée en plus d'introduire une onde de forçage, renvoie l'intégralité des ondes remontant l'écoulement. Ceci va nous permettre dans un premier temps de vérifier la fermeture du BEA dans un cas stable où l'on aura pris soin de permettre à l'onde de sortir par la sortie du domaine. On a donc affaire à un train d'ondes allant de gauche à droite (Fig. 6.12). Pour cela on a choisi un coefficient K_p adapté (Tab. 6.1). Dans un second temps ($t > 35ms$), nous modifions le coefficient de réflexion de la condition de sortie afin de la rendre suffisamment réfléchissante. L'ensemble des conditions opératoires est résumé dans Tab. 6.1.

Pour le premier cas test CL1DST, on commence le forçage acoustique sur un écoulement uniforme stationnaire. On observe sur Fig. 6.13a, le niveau d'énergie acoustique augmenter pendant que l'onde initiale travers le domaine. Cette phase initiale induit un déphasage entre les signaux de flux d'entrée et sortie. Ce déphasage correspond au temps acoustique ($\tau_{ac} = L/c_0 \simeq 1.7ms$) pour que le front de l'onde initiale atteigne la sortie. On distingue cela très bien sur Fig. 6.13b où le flux d'entrée est le témoin du forçage dès $t = 0s$ tandis que le flux de sortie ne devient significatif qu'à partir du moment où l'onde initiale atteint les limites du domaine. Durant cette période initiale, l'énergie acoustique croît constamment. Puis atteint un niveau autour duquel elle oscille à une fréquence double du forçage (terme quadratique). Fig. 6.13b nous indique que les flux entrants et sortants sont au déphasage près de signe opposé. La totalité du flux d'énergie entrant est donc évacué par la sortie. Ce qui montre que la condition de sortie est bien acoustiquement non réfléchissante à la fréquence de forçage. Dans ce cas non-réactif, la fermeture du BEA se réduit à vérifier si les courbes $\frac{dE_1}{dt}$ et $-F_1$

TAB. 6.1 – Conditions opératoires du cas test canal laminaire 1D.

Cas	CL1DST	CL1DINST
	$0 < t < 35ms$	$t > 35ms$
Condition d'entrée	impose $u_0, T_0, Y_{k,0}$ Pulsée à $142Hz$ totalement réfléchissante	
Condition de sortie	maintient de p_0 non réfléchissante à $142Hz$ $K_p = 100, R_{out} = -25dB$	réfléchissante à $142Hz$ $K_p = 5000, R_{out} = -0.5dB$
u_0	$1m/s$	
$max u_1 $	$0.5m/s$	
p_0	$1atm$	
T_0	$300K$	
fluide	Azote	
$max u_1 /c_0$	0.15%	
$max p_1 /p_0$	0.2%	

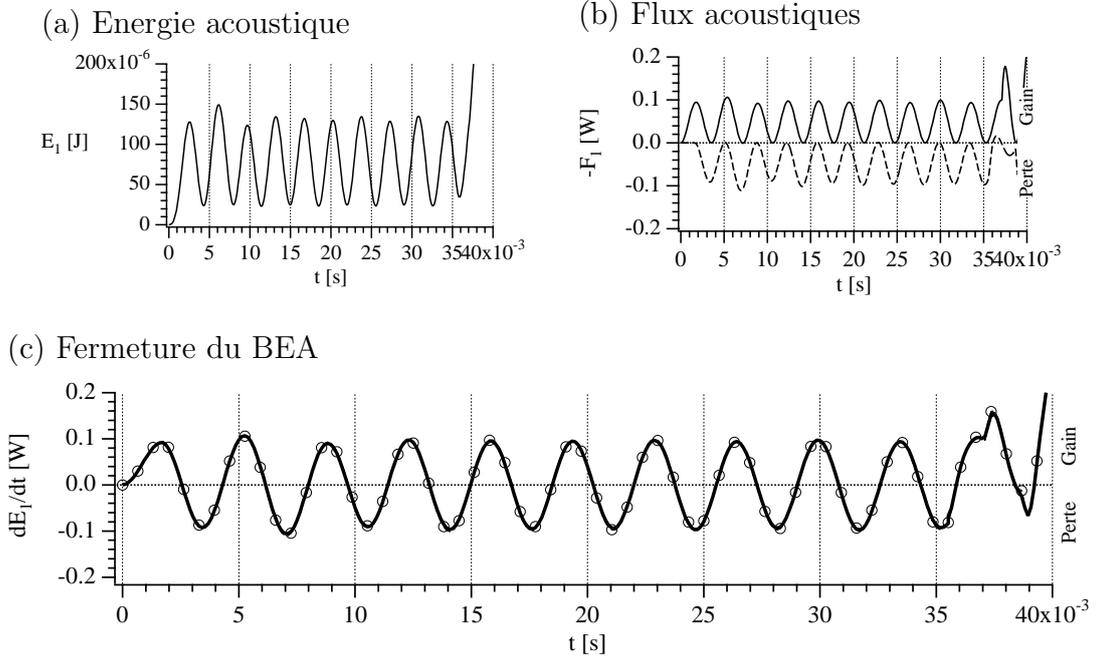
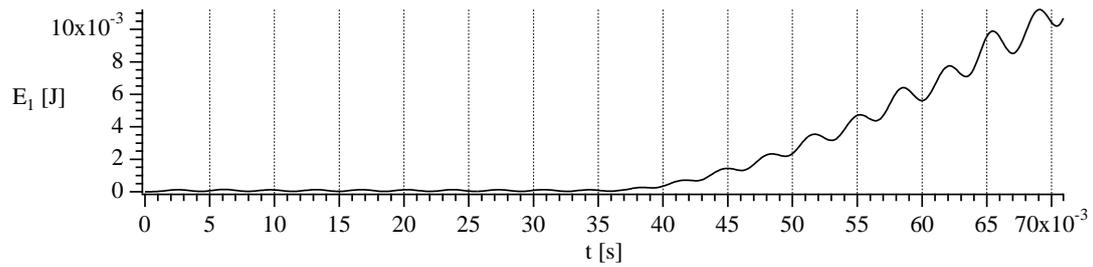


FIG. 6.13 – Cas test CL1DST : Evolution temporelle des termes du BEA. (a) Energie acoustique totale (—) E_1 . (b) Flux acoustiques ($-F_1$). (—) Flux d'entrée, (- - - -) Flux de sortie. (c) Fermeture du BEA. (—) $\frac{d}{dt}E_1$, (- - o - -) Somme des flux acoustiques $-F_1$.

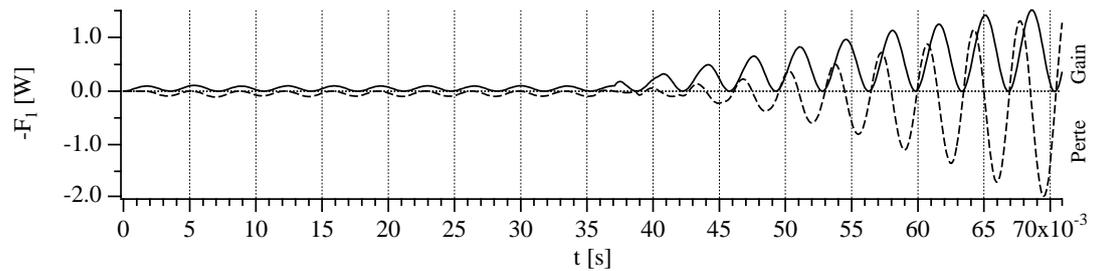
concordent. On constate sur Fig. 6.13c un accord quasi parfait des deux courbes et ceci dès la phase initiale transitoire.

On veut vérifier que le BEA ferme quand un mode propre s'exprime fortement. Par la même occasion, on teste aussi la fermeture lors d'un transitoire. On a choisi de pulser sur la fréquence de résonance, mais on aurait pu obtenir le même résultat en ne pulsant pas, juste en perturbant l'écoulement. Le temps d'apparition des modes propres est alors plus long. Dans la continuation du calcul précédent CL1DST, on modifie l'impédance de la condition de sortie afin qu'elle devienne réfléchissante (Tab. 6.1). A $t = 36ms$ le coefficient de réflexion est augmenté de $|R_{out}| = 0.056$ à $|R_{out}| = 0.944$. La croissance du mode propre est quasi immédiate (Fig. 6.14a). On note la perte de symétrie au niveau des flux acoustiques entrant et sortant (Fig. 6.14b) par rapport au cas CL1DST. Avec l'augmentation du coefficient de réflexion (ainsi que du fort déphasage associé), le flux de sortie contribue à certains moment du cycle à l'augmentation de l'énergie du système. Néanmoins la contribution moyenne du flux de sortie conserve son signe. La sortie évacue toujours une partie de l'énergie acoustique. La croissance du flux en entrée provient du fait qu'au flux de forçage s'ajoute la contribution des ondes réfléchies provenant de la sortie. La fermeture du BEA reste dans ce cas transitoire toujours satisfaisante (Fig. 6.14c).

(a) Energie acoustique



(b) Flux acoustiques



(c) Fermeture du BEA

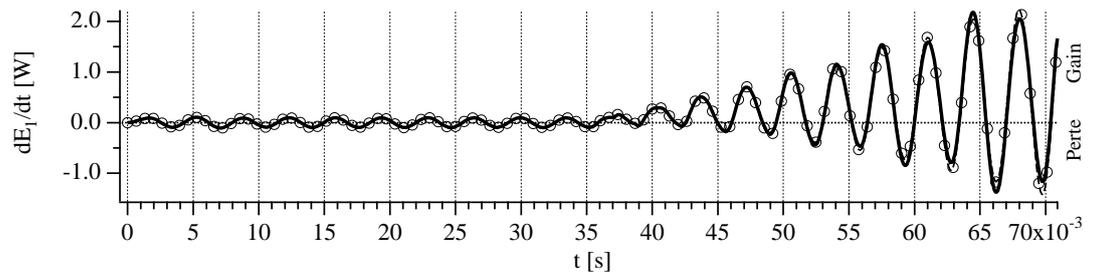


FIG. 6.14 – Cas test CL1DINST : Evolution temporel des termes du BEA. (a) — Energie acoustique totale E_1 . (b) Flux acoustiques ($-F_1$). — Flux d'entrée, ---- Flux de sortie. (c) Fermeture du BEA. — $\frac{dE_1}{dt}$, --o-- Somme des flux acoustiques $-F_1$.

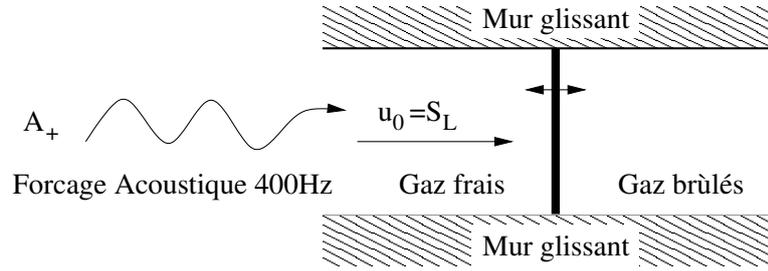


FIG. 6.15 – Configuration de calcul de la flamme 1D pulsée.

TAB. 6.2 – Conditions opératoires du calcul de flamme laminaire 1D pulsée.

Conditions	
Schéma cinétique	CH4-2SCM2 Sec. 3.22
Prémélange CH_4 +air	$\phi = 0.8$
vitesse imposée en entrée	$S_L = 0.276m/s$
Fréquence du forçage	$400Hz$
Amplitude de pulsation	$max u_1 = 0.15S_L$

Flamme Laminaire 1D Pulsée

Ce cas test est défini dans la continuité du précédent. On ajoute maintenant un terme réactif dans le guide d'onde monodimensionnel. Nous mettons alors en oeuvre une flamme laminaire monodimensionnelle de méthane (Fig. 6.15). On maintient la flamme dans une position fixe en imposant une vitesse d'entrée égale à la vitesse de flamme laminaire pour une richesse de 0.8 (Eq. 3.22a). De la même manière que précédemment on superpose à l'écoulement moyen stationnaire un forçage acoustique imposé par l'entrée (Tab. 6.2). La fréquence de forçage est choisie pour que sa longueur d'onde associée reste grande devant l'épaisseur de flamme (hypothèse de flamme compacte). L'estimation de cette longueur d'onde n'est pas directe car le milieu est inhomogène avec des gaz brûlés à $2000K$ en aval de la flamme et des gaz frais à $300K$ à l'amont. Pour déterminer la longueur d'onde associée à la fréquence de $400Hz$ on utilise un solveur d'Helmholtz 1D multiéléments (SOUNDTUBE [7]). On modélise le domaine de calcul par deux éléments de section identique accolés. On affecte à chaque élément les propriétés acoustiques (γ , Température etc.) des gaz frais ou brûlés. On impose $u_1 = 0$ à l'entrée de gaz frais et $p_1 = 0$ en sortie. Le premier mode prédit est toujours le mode quart d'onde du domaine. On recherche alors heuristiquement la longueur du domaine pour laquelle on obtient le mode quart d'onde à la fréquence de $400Hz$. On maintient la symétrie du domaine initial, en conservant des éléments de longueur identique. Dans ces conditions, on trouve une longueur de $0.4m$ pour

TAB. 6.3 –

Grandeur	Estimation	Valeur
$max p_1 $	mesure (Fig. 6.17)	10Pa
c_0	$= \sqrt{\gamma r T_0}$	340m/s
$max \rho_1 $	$= \frac{max p_1 }{c_0^2}$	$2 \cdot 10^{-4} kg/m^3$
$\langle \dot{\omega}_{T,0} \rangle$	Eq. 6.65	$3.47 \cdot 10^6 J/m^3/s$

un mode quart d'onde à 400Hz soit une longueur d'onde L_{ac} de 1.6m à comparer à l'épaisseur de la flamme δ_L (Fig. 3.22c) qui pour cette richesse de 0.8 est de $5 \cdot 10^{-4}m$. Dans ce cas de figure $\frac{L_{ac}}{\delta_L} > 3000$.

On note que les flux ne restent pas strictement positifs ou négatifs comme dans cas CL1DST. On attribue ceci au déphasage entre p_1 et \mathbf{u}_1 qui n'est plus rigoureusement égal à $\frac{\pi}{2}$ à cause de la variation de la vitesse du son au passage de la flamme rendant le milieu dispersif. Néanmoins on peut constater, que (comme le cas CL1DST) la quantité d'énergie acoustique introduite par le flux entrant est totalement évacuée via le flux acoustique de sortie (Fig. 6.16b). Le terme source thermo-acoustique s_1 (Fig. 6.16c) est quasi harmonique et en phase avec la somme de flux. Sa moyenne glissante sur une période reste nulle, ainsi le terme source ne montre aucun signe d'interaction avec le champ acoustique. Il n'est pas moteur d'une instabilité. On peut néanmoins se questionner sur son origine. Il est le produit de la pression et du dégagement de chaleur. Si l'amplitude de la pression instationnaire est imposée directement par le forçage, on ne connaît pas a priori celle du dégagement de chaleur. La variation du taux de dégagement de chaleur ne peut être dû à un plissement ou étirement de la flamme du fait de la configuration monodimensionnel. Le taux de dégagement de chaleur ne peut alors varier que sous l'effet de la variation de densité (imposé par le forçage). Nous allons vérifier cette assertion en estimant les ordres de grandeurs de ces variations.

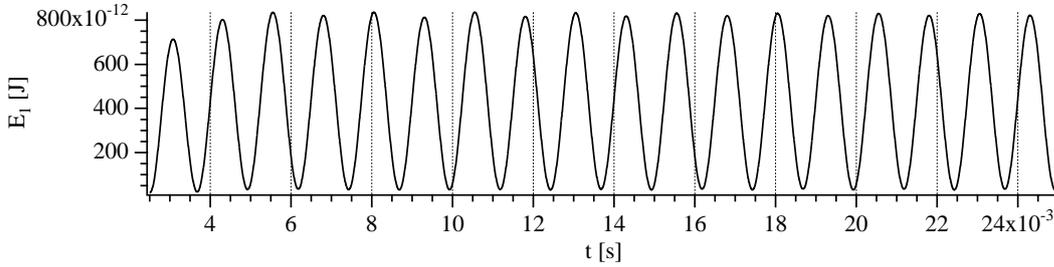
Ce cas test utilise un schéma cinétique à deux étape (CH4-2SCM2 Sec. 3.5.3). La première réaction irréversible consomme la totalité du méthane. Le taux de consommation du méthane est alors directement proportionnel à l'avancement de la première réaction. On peut donc estimer le dégagement de chaleur connaissant l'avancement de la réaction et la chaleur massique de combustion du méthane \mathcal{Q} ($\mathcal{Q} = 510^7 J/kg/s$) :

$$\dot{\omega}_T = \mathcal{Q} W_{CH_4} \left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{W_{CH_4}} \right)^{1.1} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{0.9} A_1 e^{-\frac{E_{a1}}{RT}} \quad (6.56)$$

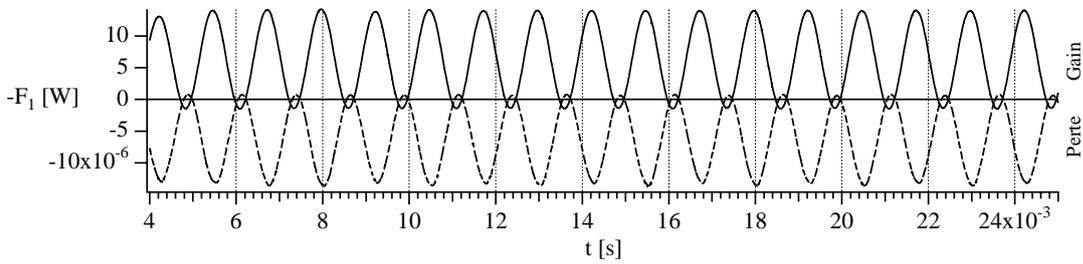
$$= \mathcal{Q} \rho^2 \mathcal{A} \quad (6.57)$$

où $\mathcal{A} = W_{CH_4} \left(\frac{Y_{CH_4}}{W_{CH_4}} \right)^{1.1} \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{0.9} A_1 e^{-\frac{E_{a1}}{RT}}$ Pour simplifier cette expression on

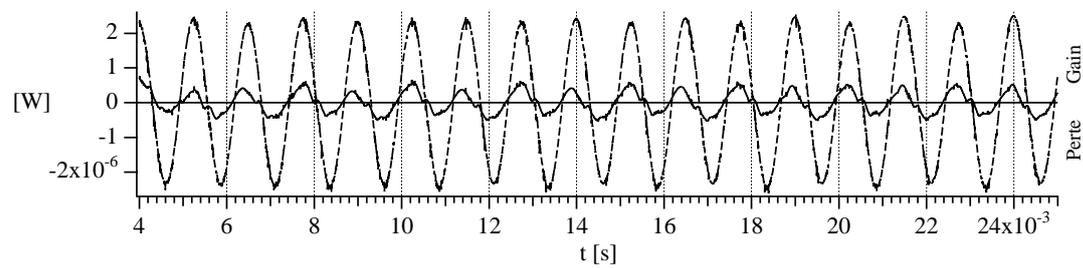
(a) Energie acoustique



(b) Flux acoustiques



(c) Somme des flux et source thermo-acoustique



(d) Fermeture du BEA

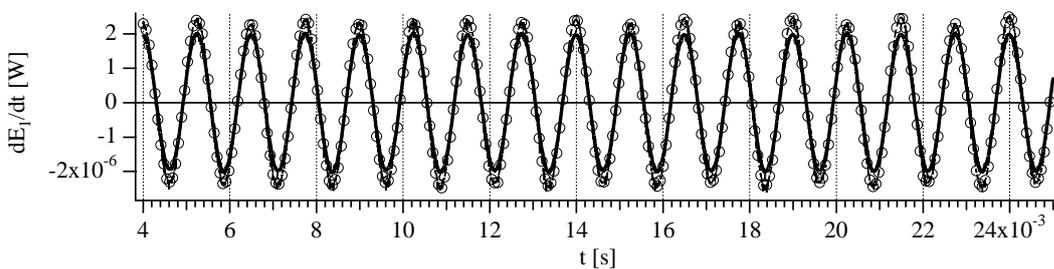


FIG. 6.16 – Cas test F1DPulse : Evolution temporel des termes du BEA. (a) Energie acoustique totale : — E_1 . (b) Détails des flux acoustiques ($-F_1$) : — Flux d'entrée, ---- Flux de sortie. (c) Termes acoustiques ($-F_1$ et S_1) : — S_1 , ---- $-F_1$. (d) Fermeture du BEA : — $\frac{d}{dt}E_1$, --o-- Somme des flux acoustiques $-F_1$.

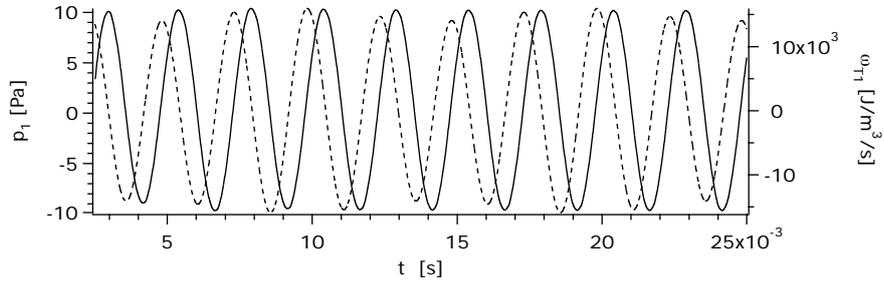


FIG. 6.17 – Comparaison du signal de pression moyenne $\langle p_1 \rangle$ (—) et du signal de dégagement de chaleur instationnaire moyen $\langle \dot{\omega}_{T,1} \rangle$ (- - - -).

linéarise le terme quadratique ($\frac{\rho_1}{\rho_0} \ll 1$) :

$$\rho = (\rho_0 + \rho_1)^2 \quad (6.58)$$

$$= \rho_0^2 \left(1 + \frac{\rho_1}{\rho_0} \right)^2 \quad (6.59)$$

$$\simeq \rho_0^2 \left(1 + \frac{2\rho_1}{\rho_0} \right) \quad (6.60)$$

$$(6.61)$$

On a alors :

$$\dot{\omega}_T \simeq \mathcal{Q} \rho_0^2 \left(1 + \frac{2\rho_1}{\rho_0} \right) \mathcal{A} \quad (6.62)$$

L'expression du dégagement de chaleur non perturbé donne avec Eq. 6.57 :

$$\dot{\omega}_{T,0} = \mathcal{Q} \rho_0^2 \mathcal{A} \quad (6.63)$$

Ce qui permet d'évaluer le rapport :

$$\frac{\dot{\omega}_T}{\dot{\omega}_{T,0}} = 1 + 2 \frac{\rho_1}{\rho_0} \quad (6.64)$$

En décomposant $\dot{\omega}_T = \dot{\omega}_{T,0} + \dot{\omega}_{T,1}$, on obtient par identification :

$$\dot{\omega}_{T,1} = 2\dot{\omega}_{T,0} \frac{\rho_1}{\rho_0} \quad (6.65)$$

La longueur d'onde associée au forçage étant très grande devant les dimension du domaine, on peut considérer p_1 constant dans le domaine. En conséquence, le rapport $\frac{\rho_0}{\rho_1}$ est alors aussi constant en espace puisque :

$$\frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{p_1}{\rho_0 c_o^2} \quad (6.66)$$

On peut donc appliquer l'opérateur de moyenne spatiale $\langle \rangle^5$ sur Eq. 6.65 :

$$\langle \dot{\omega}_{T,1} \rangle = 2 \langle \dot{\omega}_{T,0} \rangle \frac{\rho_1}{\rho_0} \quad (6.67)$$

On peut alors estimer l'amplitude de la perturbation sur $\dot{\omega}_{T,1}$ avec les mesures ou estimations de la table 6.3 :

$$\max|\dot{\omega}_{T,1}| = 2 \langle \dot{\omega}_{T,0} \rangle \frac{\max|\rho_1|}{\rho_0} \quad (6.68)$$

$$\simeq 12300 J/m^3/s \quad (6.69)$$

Cette valeur est du même ordre et même assez proche de la valeur mesurée ($\simeq 15000 J/m^3/s$) sur le calcul (Fig. 6.17). Ceci confirme alors que l'instantanéité du dégagement de chaleur est due à la fluctuation acoustique sur la densité imposée par le forçage. L'objectif de ce cas test est atteint puisqu'on observe la fermeture du BEA avec une précision satisfaisante sur la Fig. 6.16d.

⁵ $\langle f \rangle = \frac{1}{V} \int_V f dV$

Chapitre 7

LES and acoustic analysis of combustion instability

Article à paraître dans AIAA Journal : *Special Issue on Combustion Modelling and LES : Development and Validation Needs for Gas Turbine Combustors*.

LES and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor

Cet article est issu de la collaboration de deux groupes travaillant initialement sur deux aspects distincts des instabilités thermo-acoustiques. Le premier groupe met en oeuvre un calcul LES réactif afin de simuler l'écoulement réactif instationnaire d'un brûleur de laboratoire. L'approche instationnaire permet de capturer la naissance et la croissance d'une instabilité thermo-acoustique. Les données issues de ces calculs permettent ensuite de vérifier sur cette expérience numérique la fermeture du bilan d'énergie acoustique développé en Sec. 6.3. Le second groupe utilise une approche spectrale pour l'étude des instabilités. Un solveur d'Helmholtz 3D [7] permet de déterminer les modes propres de la configuration. Ce solveur possède de nombreux raffinements afin d'augmenter sa précision. Il est en effet capable de prendre en compte les effets des impédances réelles des limites ouvertes du domaine. Il est en outre aussi capable de prendre en compte (ou non) l'influence de la flamme dans sa prédiction des modes. Il offre alors non seulement la capacité de prédire la forme et la fréquence des modes propres mais aussi leur taux d'amplification. C'est à dire qu'il offre la capacité de savoir, parmi tous les modes prédits lesquels seront amplifiés ou amortis. Néanmoins ces capacités sont tributaires de l'obtention de données fiables que ce soit pour les impédances aux limites que pour la modélisation de la fonction de transfert de flamme. La complémentarité des deux approches, apparaît alors clairement. Les

données extraites des calculs instationnaire, ayant déjà mis en évidence une instabilité d'un système, vont pouvoir alimenter les entrées du solveur acoustique. Ce jeu de données permet en outre de valider l'approche spectrale, car elle doit concorder avec les observations du calcul LES c'est à dire prédire un taux d'amplification positif pour le mode en question. Dans le sens inverse, l'analyse issue des résultats du solveur acoustique va nous permettre de déterminer parmi deux modes de forme et de fréquence proche (tous deux potentiellement instables) lequel correspond effectivement à l'instabilité rencontrée.

Pour ces travaux, je tiens à remercier les co-auteurs Laurent Benoît, Franck Nicoud, et Thierry Poinsoot pour leur collaboration active et constructive à ce travail.

Charles E. Martin¹ , Laurent Benoit² Franck Nicoud³ and Thierry Poinsoot⁴ .

Abstract

This paper presents the analysis of self-excited combustion instabilities encountered in a lab-scale, swirl-stabilized combustion system. The instability is successfully captured by reactive Large Eddy Simulation (LES) and analyzed by using a global acoustic energy equation. This energy equation shows how the source term due to combustion (equivalent to the Rayleigh criterion) is balanced by the acoustic fluxes at the boundaries when reaching the limit cycle. Additionally, an Helmholtz-equation solver including flame-acoustics interaction modelling is used to predict the stability characteristics of the system. Feeding the flame-transfer function from the LES into this solver allows to predict an amplification rate for each mode. The unstable mode encountered in the LES compares well with the mode of the highest amplification factor in the Helmholtz-equation solver, in terms of mode shape as well as in frequency.

¹PhD student, CERFACS, CFD team.

²PhD student, CERFACS, CFD team.

³Professor, Université Montpellier II and CNRS.

⁴Research director IMF Toulouse, INP de Toulouse and CNRS. Associate fellow AIAA.

Nomenclature

$[\hat{P}]$ Column vector of size N associated to an eigenmode

$[A]$ Square matrix of size N

\mathcal{E}_1 Instantaneous global acoustic energy term, J

\mathcal{F}_1 Instantaneous global acoustic fluxes, W

\mathcal{S}_1 Instantaneous global Rayleigh term, W

\mathbf{u} Velocity vector, m/s

c Sound velocity, m/s

D_k k^{th} species diffusion coefficient, m^2/s

E Efficiency function

e_1 Acoustic energy, J/m^3

E_a Activation Energy, cal/mol

F Flame thickening factor

f Frequency, Hz

i Square root of -1

N Number of nodes of the grid

n Magnitude of the Flame Transfer Function, Pa/m

p Pressure, Pa

R Perfect gas constant, $cal/mol/K$

S_c^k k^{th} species Schmidt number

T Temperature, K

t Time, s

Y_k k^{th} species mass fraction

Z Local reduced acoustic impedance

- \mathbf{n} Outward normalized normal vector
- δ_L^0 Flame thermal thickness, m
- γ Polytropic coefficient
- ν Cinematic viscosity, Pa/s
- ω Pulsation, rd/s
- ω_k k^{th} species reaction rate, $mol/m^3/s$
- ϕ Phase of the Flame Transfer Function
- $\dot{\omega}_T$ Unsteady heat release, J/m^3
- ρ Mass density, kg/m^3
- τ Time delay of the $n - \tau$ model, s
- s_L^0 Laminar flame speed, m/s
- s_T Turbulent flame speed, m/s

Subscripts

- 0 Steady part
- 1 Fluctuating part
- L Laminar
- ref Related to the reference point of the $n - \tau$ model

Superscripts

- $\hat{}$ Fourier transformed
- th Thickened quantity

7.1 Introduction

Combustion oscillations are frequently encountered during the development of many combustion chambers for gas turbines.¹⁻⁴ These oscillations cannot be predicted at the design stage and correcting actions can be extremely costly at later stages. Testing burners in simplified combustion chambers is a common method to verify their stability but is also an ambiguous approach because most experimentalists know that a given burner can produce unstable combustion in one chamber and not in another. Methods providing stability analysis before any tests are therefore requested.

Large Eddy Simulations are an obvious choice for such studies : they are powerful tools to study the dynamics of turbulent flames (see recent books on

turbulent combustion^{4,5}). Multiple recent papers have demonstrated the power of these methods.^{6–12} However, an important limitation of LES is its cost : the intrinsic nature of LES (full three-dimensional resolution of the unsteady Navier Stokes equations) makes it very expensive, even on today’s computers. Moreover, even when they confirm that a combustor is unstable, LES does not say why and how to control it. Therefore, tools are needed to analyze LES results but also provide capacities for optimization and control of thermoacoustic oscillations in chambers.

A proper framework to analyse combustion stability is the wave equation in a reacting flow.⁴ Such an equation is complex to derive because most assumptions used in classical acoustics must be revisited in a multi-species, non-isothermal, reacting gas. For low Mach numbers, an approximate equation controlling the propagation of pressure perturbations in a reacting flow is :

$$\begin{aligned} \rho_0 c_0^2 \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_0} \nabla p_1 \right) - \frac{\partial^2}{\partial t^2} p_1 = \\ -(\gamma - 1) \frac{\partial \dot{\omega}_{T1}}{\partial t} - \rho_0 c_0^2 \nabla \mathbf{u}_1 : \nabla \mathbf{u}_1 \end{aligned} \quad (7.1)$$

where the subscript 0 refers to mean quantities and the subscript 1 to small perturbations. $\dot{\omega}_{T1}$ is the local unsteady heat release. c_0 and ρ_0 are respectively the sound speed and the density which can change locally because of changes in temperature and composition due to chemical reactions. These reactions are also the source of the additional RHS source term $(\gamma - 1) \partial \dot{\omega}_{T1} / \partial t$ which is responsible for combustion noise and instabilities. This equation does not assume a constant polytropic coefficient γ and thus differs slightly from the one derived in a previous work (Eq. 1.1 in Ref¹³). This approach is better suited to reacting flows where γ can change by 30% from fresh to burnt gases. Eq. 7.1 is difficult to use directly in practice and multiple methods have been proposed to solve it.^{3,14–17} This paper presents a method where Eq. 7.1 is used together with LES :

- First an acoustic solver based on a Helmholtz equation is developed to provide all acoustic modes of a combustion chamber. In this approach, Eq. 7.1 is solved in the frequency domain by assuming sinusoidal oscillations. This solver uses information given by the LES on the mean temperature field and the flame transfer function.
- Second, a new analysis tool to analyze the budget of acoustic energy in a reacting flow is described. This integral form of Eq. 7.1 is a generalization of the well-known Rayleigh criterion^{4,18} which allows an evaluation of all terms of the acoustic energy equation in the LES.

The first objective of the present work is to couple these three tools (LES, Helmholtz solver and acoustic energy budget) and show how they can be combined to understand combustion instabilities. This exercise will be performed on a staged swirled combustion chamber installed at Ecole Centrale de Paris. In

this device, the outlet boundary condition will be changed in the LES from non-reflecting to perfectly reflecting (pressure node) to demonstrate the effect of this condition on the burner unsteady activity and prove that the three tools used throughout the paper provide reasonable explanations for this phenomenon.

The presentation starts with a description of the acoustic energy equation. The LES tool characteristics are recalled before presenting the Helmholtz tool. The configuration is then described before the presentation of the results. Stable and unstable regimes evidenced by LES are discussed. In this last case, a scenario where the combustion instability grows, reaches a limit cycle and then decays is studied. This control of the instability is obtained by changing the outlet boundary condition and the budget of acoustic energy during the whole evolution is used to analyze the instability, the mechanisms controlling its limit cycle amplitude and its decay. Finally, the Helmholtz solver results are presented : the flame transfer function measurement methodology is described and applied to obtain the frequency as well as the growth rate of the combustor eigenmodes. It is then verified that the most unstable mode matches the LES observations.

7.2 Acoustic energy equation

The total acoustic energy equation is an integral form of the wave equation (Eq. 7.1) which is quite useful to understand basic mechanisms of combustion instabilities. This equation cannot be used to predict unstable modes like the Helmholtz solver, but is a powerful method to analyze the results of an LES as done here. The conservation equation for the acoustic energy $e_1 = \frac{1}{2}\rho_0 u_1^2 + \frac{1}{2}p_1^2/(\rho_0 c_0^2)$ can be written :⁴

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} = s_1 - \nabla \cdot (p_1 \mathbf{u}_1) \quad \text{with } s_1 = \frac{(\gamma - 1)}{\gamma p_0} p_1 \dot{\omega}_{T1} \quad (7.2)$$

If integrated over the whole volume V of the combustor bounded by the surface A , it yields :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V e_1 dV &= \int_V s_1 dV - \int_A p_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} dA \\ \text{or } \frac{d}{dt} \mathcal{E}_1 &= \mathcal{S}_1 - \mathcal{F}_1 \end{aligned} \quad (7.3)$$

where \mathbf{n} is the surface normal vector. This surface consists of walls or of inlet/outlet sections.

In Eq. 7.3, all terms are time dependent. The RHS source term \mathcal{S}_1 corresponds to the Rayleigh criterion¹⁸ : it measures the correlation between unsteady pressure p_1 and unsteady heat release $\dot{\omega}_{T1}$ averaged over the whole chamber. It can act as a source or a sink term for the acoustic energy. The other RHS term \mathcal{F}_1 is

less studied because it is impossible to measure experimentally. It is an acoustic flux integrated on all the boundaries. Walls have zero contribution in this term because the velocity perturbations $\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}$ vanish on walls. However, \mathcal{F}_1 may be large on inlets and outlets where it is usually a loss term. Eq. 7.2 is therefore a generalization of the Rayleigh criterion : the total acoustic energy in the chamber \mathcal{E}_1 will grow if the acoustic gain term \mathcal{S}_1 is larger than the acoustic losses \mathcal{F}_1 . The magnitudes and relative importance of the two terms \mathcal{S}_1 and \mathcal{F}_1 are controversial issues in the field of combustion instabilities. For example, one important question is to know whether acoustic losses are important or not in the determination of limit cycles. For these limit cycles, the acoustic energy \mathcal{E}_1 must remain constant over a period of oscillations and Eq. 7.2 shows that such a cycle can be reached for two situations :

- The limit cycle may be *combustion controlled* : if the acoustic losses are small ($\mathcal{F}_1 = 0$), the pressure and heat release signals may adjust to give $\mathcal{S}_1 \simeq 0$. The limit cycle is reached when this phase shift leads to a zero Rayleigh term \mathcal{S}_1 as observed in certain experiments. Physically, this is often obtained when the heat release oscillations saturate (because the minimum reaction rate reaches zero at some instant of the cycle) or when the phase between pressure and heat release changes so that combustion itself controls the limit cycle amplitude.
- The limit cycle may be *acoustically controlled* : the source term \mathcal{S}_1 may be large (pressure and heat release are oscillating in phase) but the acoustic losses \mathcal{F}_1 are too large and compensate \mathcal{S}_1 . In this case, the final amplitude of oscillation is controlled by the acoustic impedances of outlets and inlets.

Clearly, these two solutions lead to very different approaches of combustion instabilities : if the limit cycle is combustion controlled, the acoustic behavior of inlets and outlets has a limited effect on the stability ; if it is acoustically controlled, acoustic impedances of inlets and outlets become essential elements of any method (experimental or numerical). In the present study, the LES results are post-processed to measure all terms of Eq. 7.2 and determine whether the unstable mode is combustion or acoustically controlled.

7.3 Large Eddy Simulations for reacting flows in complex geometries

7.3.1 Numerical methods for compressible reacting LES

Most academic LES are often limited to fairly simple geometries for obvious reasons of cost and complexity reduction. In many cases, experiments are designed using simple two-dimensional shapes^{6,19,20} or axisymmetrical configurations^{21,22} and simple regimes (low speed flows, fully premixed or fully non-premixed flames) to allow research to focus on the physics of the LES (subgrid scale models,

flame/turbulence interaction model), and more generally, to demonstrate the validity of the LES concept in academic cases. This approach is clearly adequate in terms of modelling development, but it can also be misleading in various aspects when it comes to deal with complex flames in complex geometries, especially in real gas turbines for which specific problems arise :

- Real geometries cannot be meshed easily and rapidly with structured or block-structured meshes : up to now, most LES of reacting flows have been performed in combustion chambers where structured meshes were sufficient to describe the geometry. This is no longer the case in gas turbines and this brings additional difficulties. Indeed, on structured meshes, building high-order spatial schemes (typically 4th to 6th order in space) is easy and provides very precise numerical methods.^{23–25} For complex geometries such structured meshes must be replaced by unstructured grids, on which constructing high-order schemes is a more difficult task.
- Unstructured meshes also raise a variety of new problems in terms of subgrid scale filtering : defining filter sizes on a highly anisotropic irregular grid is another open research issue.^{26–29} Many LES models, developed and tuned on regular hexahedral grids, may perform poorly on the low-quality unstructured grids required to mesh real combustion chambers. For example, the filtered structure model²⁴ is difficult to extend to unstructured grids.
- LES validation is often performed in laboratory low-speed unconfined flames, in which acoustics do not play a role and the Mach number remains small so that acoustics and compressibility effects can be omitted from the equations.^{10,21} In most real flames (for example in gas turbines), the Mach number can reach high values and acoustics are important so that taking compressibility effects into account becomes mandatory. This leads to a significantly heavier computational task : since acoustic waves propagate faster than the flow, the time step becomes smaller and the boundary conditions must handle acoustic wave reflections.⁴ Being able to preserve computational speed on a large number of processors then also becomes an issue simply to obtain a result in a finite time.
- At the present time, it is impossible to perform a true LES everywhere in the flow and it will remain so for a long time. For example, the flow between vanes in swirled burners, inside the ducts feeding dilution jets or through multiperforated plates would require too many grid points. Compromises must be sought to offer (at least) robustness in places where the grid is not sufficient to resolve the unsteady flow.

In the present work, the full compressible Navier Stokes equations are solved on hybrid (structured and unstructured) grids in a code called AVBP. Subgrid stresses are described by the WALE model.³⁰ The flame/turbulence interaction is modeled by the Thickened Flame (TF) model.^{6,31} The numerical scheme is explicit in time and provides third-order spatial and third-order time accuracy.³¹

7.3.2 Thickened Flame (TF) model and chemical scheme

For this study, the standard TF model³¹ is used : in this model, preexponential constants and transport coefficients are both modified to offer thicker reaction zones that can be resolved on LES meshes. The fundamental property justifying this approach has been put forward by Butler and O'Rourke³² by considering the balance equation for the k-species mass fraction Y_k in a one-dimensional flame of thermal thickness δ_L^0 and speed s_L^0 :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k(Y_j, T) \quad (7.4)$$

Modifying this equation to have :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_k^{th}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k^{th}}{\partial x_i} = \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho F D_k \frac{\partial Y_k^{th}}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{F} \dot{\omega}_k(Y_j^{th}, T^{th}) \end{aligned} \quad (7.5)$$

leads to a ‘‘thickened’’ flame equation where F is the thickening factor and superscript th stands for thickened quantities. Introducing the variable changes $X_i = x_i/F$; $\Theta = t/F$ leads to :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_k^{th}}{\partial \Theta} + \frac{\partial \rho u_i Y_k^{th}}{\partial X_i} = \\ \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k^{th}}{\partial X_i} \right) + \dot{\omega}_k(Y_j^{th}, T^{th}) \end{aligned} \quad (7.6)$$

which has the same solution as Eq. 7.4 and propagates the flame front at the same speed s_L^0 . However, $Y_k^{th}(\mathbf{x}, t) = Y_k(\mathbf{x}/F, t/F)$ shows that the flame is thickened by a factor F . The thickened flame thickness is $\delta_L^{th} = F\delta_L^0$. Choosing sufficiently large values of F allows to obtain a thickened flame which can be resolved on the LES mesh. Typically, if n is the number of mesh points within the flame front (n is of the order of 5 to 10) and Δx the mesh size, the resolved flame thickness δ_L^{th} is $n\Delta x$ so that F must be $F = n\Delta x/s_L^0$. Note that F is not an additional parameter of the model but is imposed by the previous relation as soon as the mesh is created. In the framework of LES, this approach has multiple advantages : when the flame is a laminar premixed front, the TF model propagates it, in the limit of an infinitely thin front, at the laminar flame speed exactly like in a G equation approach. However, this flame propagation is due to the combination of diffusive and reactive terms which can also act independently so that quenching (near walls for example) or ignition may be simulated. Fully compressible equations may also be used as required to study combustion instabilities.

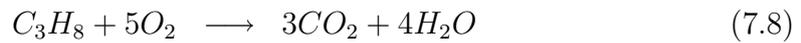
The thickening modification of the flame front also leads to a modified interaction between the turbulent flow and the flame : subgrid scale wrinkling must

be reintroduced. This effect can be studied and parametrized using an efficiency function E derived from DNS results.^{31,33,34} This efficiency function measures the subgrid scale wrinkling as a function of the local subgrid turbulent velocity u'_{Δ_e} and the filter width Δ_e . In practice, the diffusion coefficient D_k is replaced by $EF D_k$ and the preexponential constant A by $A E/F$ so that the conservation equation for species k is :

$$\frac{\partial \rho Y_k^{th}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k^{th}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho E F D_k \frac{\partial Y_k^{th}}{\partial x_i} \right) + \frac{E}{F} \dot{\omega}_k (Y_j^{th}, T^{th}) \quad (7.7)$$

Such an equation propagates the turbulent flame at a turbulent speed $s_T = E s_L^0$, while keeping a thickness $\delta_L^{th} = F \delta_L^0$. In laminar regions, E goes to unity, and Eq. 7.7 simply propagates the front at the laminar flame speed s_L^0 . The subgrid scale wrinkling function E was obtained from the initial model of Ref. ³¹ as a function of the local filter size Δ_e , the local subgrid scale turbulent velocity u'_{Δ_e} , the laminar flame speed s_L^0 , the laminar and the flame thicknesses δ_L^0 and δ_L^{th} .

The TF model uses finite rate chemistry : here the configuration corresponds to a lean premixed flame so that a one-step Arrhenius kinetics is sufficient. This one-step scheme (called 1sCM1) has been fitted with a genetic algorithm based tool on a laminar flame structure. The reference mechanism used to fit 1sCM1 is the Peters propane scheme.³⁵ 1sCM1 takes into account five species (C_3H_8, O_2, CO_2, H_2O and N_2) :



The rate of the single step reaction is given by :

$$q = A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}} \right)^{n_{C_3H_8}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{n_{O_2}} \exp \left(- \frac{E_a}{RT} \right) \quad (7.9)$$

where the rate parameters are provided in Table 7.1.

The diffusion coefficient D_k of species k is obtained as $D_k = \nu / S_c^k$ where ν is the viscosity and S_c^k the fixed Schmidt number of species k . The Schmidt number values used in the present simulations are given in Table 7.1, and correspond to the PREMIX values measured in the burnt gases. The Prandtl number is set to 0.68. With this parameter set, the agreement between flame profiles obtained using AVBP or PREMIX with the same chemical scheme is good. The agreement between the Peters and the 1sCM1 schemes in terms of laminar flame speed is satisfactory for the lean to stoichiometric mixtures. Note that other formulations are available for LES of partially premixed turbulent flows.^{5,11} To study combustion/acoustics coupling, however the TF model offers the best compromise. First the G equation is usually implemented in low mach number codes which do not

TAB. 7.1 – Rate constants and Schmidt numbers for the 1sCM1 scheme : the activation energy is in cal/moles and the preexponential constants in cgs units.

Chemical rate constants				
A	$n^{C_3H_8}$	n^{O_2}	E_a	
3.29E10	0.856	0.503	31526	
Schmidt numbers				
C_3H_8	O_2	CO_2	H_2O	N_2
1.241	0.728	0.941	0.537	0.690

solve for acoustics while acoustics are fully represented in the TF model. Second, The TF approach has been now validated in multiple complex geometry swirled burners^{12,36} making it a proper basis for the present study.

7.4 Acoustic solver for the Helmholtz equation

The acoustic tool used in this study, called AVSP, solves the eigenvalue problem associated to the wave Eq. 7.1. When dealing with thermo-acoustic instabilities, it is usual to model the geometry of the combustor by a network of 1D or 2D axisymmetric acoustic elements where a simplified form of Eq. 7.1 can be solved.^{4,15,37–39} Jump relations are used to connect all these elements and the amplitude of the forward and backward acoustic waves are determined so that the boundary conditions are satisfied. The main drawback of this approach is that the geometrical details of a combustor cannot be accounted for and only the first "equivalent" longitudinal or orthoradial modes are sought for. In the acoustic solver, a finite element strategy is used to discretize the exact geometry of the combustor so that no assumption is made a priori regarding the shape of the modes. This feature gives the Helmholtz solver the potential to test the effect of geometrical changes on the stability of the whole system.

Eq. 7.1 is solved in the frequency domain by assuming harmonic variations at frequency $f = \omega/(2\pi)$ for pressure, velocity and local heat release perturbations :

$$\begin{aligned}
 p_1 &= \Re \left(\hat{P}(\mathbf{x}) \exp(-i\omega t) \right) \\
 \mathbf{u}_1 &= \Re \left(\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{x}) \exp(-i\omega t) \right) \\
 \dot{\omega}_{T1} &= \Re \left(\hat{\Omega}_T \exp(-i\omega t) \right)
 \end{aligned} \tag{7.10}$$

Introducing Eq. 7.10 into Eq. 7.1 and neglecting the turbulent noise $\gamma p_0 \nabla \mathbf{u}_1 : \nabla \mathbf{u}_1$ in front of the combustion term $(\gamma - 1) \partial \dot{\omega}_{T1} / \partial t$ leads to a modified form of the

Helmholtz equation :

$$\rho_0 c_0^2 \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_0} \nabla \hat{P} \right) + \omega^2 \hat{P} = i\omega(\gamma - 1) \hat{\Omega}_T \quad (7.11)$$

where the unknown quantities are the complex amplitude \hat{P} of the pressure oscillation at frequency f and pulsation ω . Note that $\hat{\Omega}_T$, the amplitude of the heat release perturbation is also unknown and must be modeled. This is obviously the difficult part of the modeling and it remains an open research issue today. In the present work, the simplest linear approach initially proposed by Crocco¹⁴ was chosen as a first step. A direct extension of the standard $n - \tau$ model^{4,14,40} was used to write : $\hat{\omega}_{T1} \propto n u_1(x_{\text{ref}}, t - \tau)$ (u_1 is the axial velocity fluctuations). In 1D approaches, the interaction index n and time delay τ are two parameters describing the acoustic behaviour of a compact flame located at the axial position x_{ref} . In the Helmholtz solver, where the geometry of the combustor is fully described, the flame is distributed and the interaction index and time delay depend on space. These data can be extracted from LES results by post-processing either a self-excited or a forced oscillating regime. Once measured in LES, the fields $n(\mathbf{x}, \omega)$ and $\tau(\mathbf{x}, \omega)$ are used to model the unsteady heat release in Eq. 7.11 as :

$$\hat{\Omega}_T = n(\mathbf{x}, \omega) \exp(i\omega\tau(\mathbf{x}, \omega)) \hat{U}(\mathbf{x}_{\text{ref}}) \cdot \mathbf{n}_{\text{ref}}. \quad (7.12)$$

The linearized momentum Euler equation $\hat{U} = \nabla \hat{P} / i\omega\rho$ can be used to relate $\hat{\Omega}_T$ to \hat{P} and close Eq. 7.11.

Three types of boundary conditions can be prescribed for Eq. 7.11 (where \mathbf{n} is the outward unit normal vector to the boundary) :

- Dirichlet condition which imposes $\hat{P} = 0$, on fully reflecting outlets,
- Neumann condition which imposes $\nabla \hat{P} \cdot \mathbf{n} = 0$, on fully rigid walls or reflecting inlets,
- Robin condition which imposes $cZ \nabla \hat{P} \cdot \mathbf{n} = i\omega \hat{P}$, on general boundaries, where Z is the local reduced complex impedance $Z = \hat{P} / \rho_0 c_0 \hat{U} \cdot \mathbf{n}$

In this study, the reduced boundary impedance Z has been obtained using Eq. 7.16 as described later.

Knowing the boundary impedance Z , the sound speed c_0 and the density ρ_0 distribution, the flame response ($n(\mathbf{x}, \omega)$, $\tau(\mathbf{x}, \omega)$), and assuming that Z does not depend on ω ⁵, a Galerkin finite element method is used to transform Eq. 7.11 into a non-linear eigenvalue problem of size N (the number of nodes in the finite element grid used to discretize the geometry) of the form :

$$[A][\hat{P}] + \omega[B][\hat{P}] + \omega^2[C][\hat{P}] = [D(\omega)][\hat{P}] \quad (7.13)$$

where $[\hat{P}]$ stands for the column vector containing the eigenmode at pulsation ω , and $[A]$, $[B]$, $[C]$ are square matrices depending only on the discretized geometry

⁵The same result holds if $1/Z = 1/Z_0 + Z_1\omega + Z_2/\omega$, where Z_0 , Z_1 and Z_2 are complex valued constants.

of the combustor. If the impedances Z change with ω , Eq. 7.13 can be solved iteratively and independently for each eigenmode, by using a Z value adapted to each eigenfrequency. $[D(\omega)]$ is the unsteady contribution of the flame and depends on the pulsation through the combustion term $n(\mathbf{x}, \omega) \exp(i\omega\tau(\mathbf{x}, \omega))$. No efficient numerical method exists to solve this non-linear eigenvalue problem. However, in the case where the unsteady flame response is neglected, viz. $[D(\omega)] = 0$, Eq. 7.13 simplifies into a quadratic eigenvalue problem depending only on ω and ω^2 . A variable transformation can then be used to obtain an equivalent linear eigenvalue problem of size $2 \times N$.⁴¹ Several numerical methods can then be used to assess the eigenmodes. Direct methods (e.g. QR-based) are exact and have the advantage to provide all the eigenmodes. However, they can be expensive to solve for large problems ($N > 10^3$). Since only the first few frequencies are usually of interest from a physical point of view, it is more appropriate to use an iterative method which can be applied for large problems ($N > 10^5$) without difficulty. In the Helmholtz solver, we are using a parallel implementation of the Arnoldi method⁴², which enables to solve complex problems of size $N \simeq 20000$ in a few minutes.

Setting $[D(\omega)] = 0$ 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 acoustically active element. The boundary conditions are also accounted for and this approximation can provide relevant information on the shape and real frequency of the first few modes of the combustor. However, since there is no coupling between the acoustics and the flame, there is no hope to discriminate between stable and unstable modes, which is the ultimate objective of this study. Assuming that the unsteady flame response creates a small perturbation of the modes, a linear expansion technique can be developed to assess the imaginary part of ω , hence the stability of the perturbed modes.^{43,44} Another path has been followed in this study in order to handle cases where the unsteady response of the flame changes the modes significantly and when the linear expansion is not justified. The non-linear eigenvalue problem Eq. 7.13 is then solved iteratively, the k^{th} iteration consisting in solving the quadratic eigenvalue problem in ω_k defined as :

$$([A] - [D(\omega_{k-1})]) [\hat{P}] + \omega_k [B] [\hat{P}] + \omega_k^2 [C] [\hat{P}] = 0 \quad (7.14)$$

A natural initialization is to set $[D(\omega_0)] = 0$ so that the computation of the modes without combustion is in fact the first step of the iteration loop. Usually, less than 5 iterations are enough to converge towards the complex pulsation and associated mode. This linearized approach to describe the stability of the burner in terms of modes has drawbacks but remains one of the basic tools to study instabilities :

- The linearization is valid only for small amplitude perturbations, a condition which is obviously not true when limit cycles typical of combustion

instabilities are observed in gas turbines. However, this assumption is valid when the instability grows⁴⁵ and helps to determine the unstable modes : such modes have to appear and grow before they reach a limit cycle and any analysis adapted to this early phase is of interest.

- Most acoustic tools work on linear regimes for which each oscillatory mode is independent of other modes. Many combustion instabilities exhibit non-linear coupling where high-frequency modes couple with low-frequency oscillations.⁴⁶ These were also observed in the experiment of Ref. ¹ in which a 530 Hz mode (often called rumble) was systematically accompanied by a high-frequency mode (called screech) at 3750 Hz. The fact that combustion instabilities involve more than one mode of oscillation is one of the basis of the approach of Culick.⁴⁷ The tool presented above treats each mode individually and cannot simulate such phenomena.
- The description of the coupling between acoustics and combustion in such models is extremely crude. The response of the flame excited by an acoustic wave depends on several physical phenomena such as chemical reactions, species diffusion, vortex shedding, vortex-flame interaction, etc All these phenomena are not neglected in the present study but their cumulative effect is modeled through the global time scale τ and index n .

Despite these limitations, such tools are useful because they provide relevant information about the modes triggered by the acoustic/flame coupling while running fast : for the current configuration, only 8000 grid points were necessary to describe the geometry and obtain the first 4 modes. For comparison, half a million nodes were used to perform the LES. A typical run for solving the quadratic eigenvalue problem of type Eq. 7.14 on this grid lasts 10 min by using 15 processors (R14000 500 MHz IP35) on an SGI O3800 parallel machine. Such a tool can thus be used in the design process of new gas turbines to characterize their thermoacoustic modes. By describing the whole geometry between the compressor and the turbine, including all the injectors dispatched around the combustion chamber, such simulations would give unique information about the swirling modes that sometimes show up in large gas turbines. The difficult and computationally expensive task would be to compute the flame transfer function by performing a LES of the turbulent flame. Such a simulation would be performed by considering an angular sector corresponding to only one injector, saving grid points and CPU resources.

7.5 Configuration

7.5.1 Geometry : a swirled premixed combustor

The methodologies described in the previous sections were tested for a swirled combustor displayed in Fig. 7.1. The configuration is typical of swirled combustor

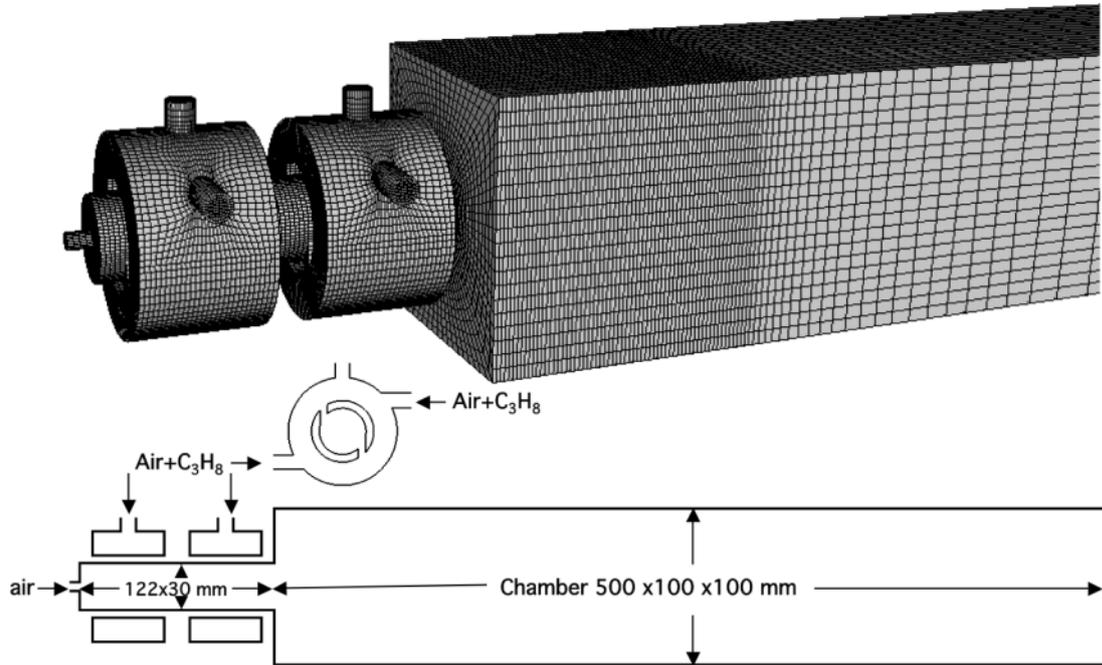


FIG. 7.1 – Configuration : a staged swirled combustor.

TAB. 7.2 – Flow parameters for combustion cases.

Total flow rate (kg/s)	Axial flow rate (kg/s)
$22 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-3}$
Equivalence ratio (burner mouth)	Reynolds number
0.8	46700

tion : premixed gases are introduced tangentially into a long cylindrical duct feeding the combustion chamber. The tangential injection creates the swirl required for stabilization. The fuel is propane. The two independent swirler elements allow fuel staging. The staging parameter α is defined as the ratio of fuel flow rate of the first to the second swirler.

The regime studied here corresponds to the parameters given in Table 7.2. The staging of the burners corresponds to $\alpha = 0.3$.

7.5.2 Boundary conditions

Specifying boundary conditions is a critical issue for compressible flows. Here, the NSCBC technique^{4,48} was used at the outlet. The level of reflection of this boundary can be controlled by changing the relaxation coefficient σ of the wave

TAB. 7.3 – Acoustic inlet and outlet boundaries characteristics for the runs REF and LEAK.

Case	LEAK	REF
Inlet σ	1000	1000
Outlet σ	1000	10000
Characteristic	Non-Reflecting	Reflecting
Outlet impedance measured in LES at $380Hz$	X	$0.04 - 0.21i$
Outlet impedance calculated with Eq. 7.16 at $380Hz$	$0.85 - 0.36i$	$0.05 - 0.23i$

correction⁴⁹, which determines the amplitude of the incoming wave L_1 entering the computational domain :

$$L_1 = \sigma(p - p_t) \quad (7.15)$$

where p_t is the prescribed pressure value at infinity. Eq. 7.15 acts on the flow like a spring mechanism with a stiffness σ . The impedance of the boundary is a function of σ and ω which can be obtained analytically⁴⁹ for simple cases :⁶

$$Z = \frac{-i\omega/\sigma}{1 - i\omega/\sigma} \quad (7.16)$$

For small values of σ , Eq. 7.15 keeps the pressure p close to its target value p_t while letting acoustic waves go out at the same time :⁴ the outlet is non- reflecting. When large values of σ are used, the outlet pressure remains strictly equal to p_t and the outlet becomes totally reflecting. Two sets of computation will be shown (Table 7.3). The first one (called LEAK) corresponds to a case where the spring stiffness σ is small so that the outlet is non-reflecting and the acoustic waves are evacuated with very small reflection levels. For the second set (REF), σ is large and the outlet is reflecting (the pressure oscillation is almost zero).

7.6 LES Results

7.6.1 Stable flow

The first computation corresponds to the case where the outlet section is non-reflecting (case LEAK in Table 7.3) : the acoustic feedback is minimized and the

⁶This impedance can be taken into account by the Helmholtz solver under the following form : $1/Z = 1 + i\sigma/\omega$

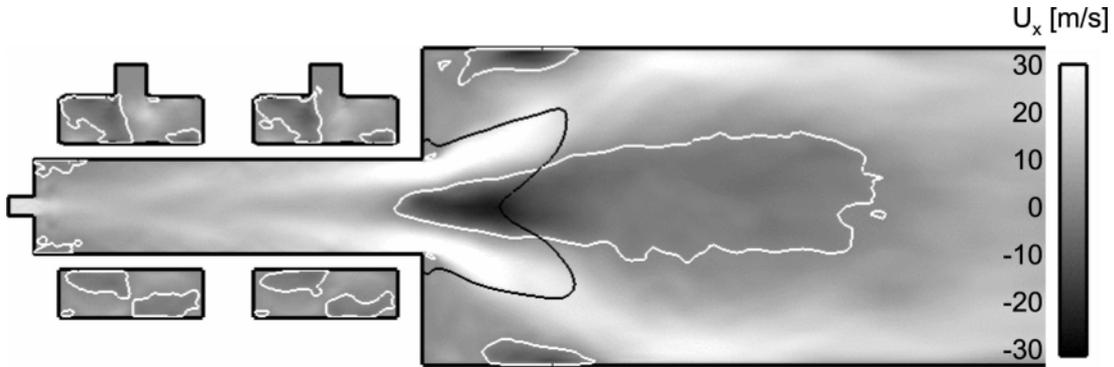


FIG. 7.2 – Mean axial velocity field, white line : iso- $u_x = 0$, black line : iso- $T = 1500$ K for stable combustion.

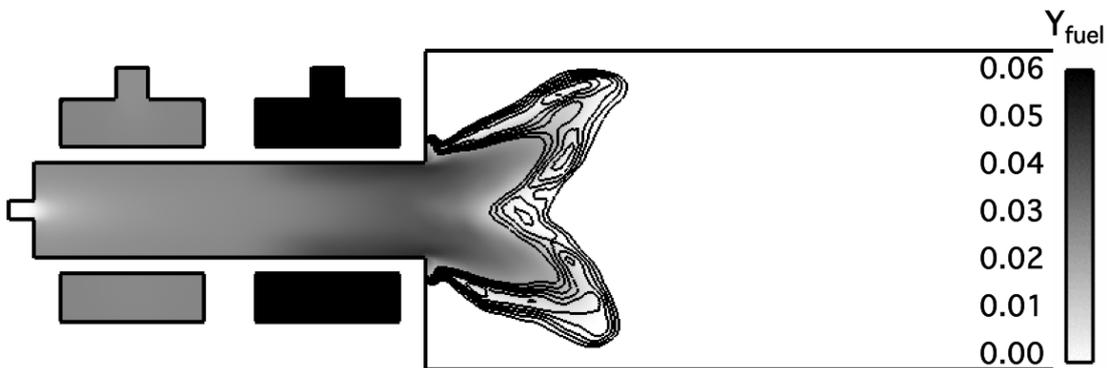


FIG. 7.3 – Mean fuel mass fraction field, black lines : iso-reaction rate for stable combustion.

flame does not exhibit any strong unstable movement. The mean velocity and fuel mass fraction fields are displayed in Fig. 7.2 and Fig. 7.3. As expected, the downstream part of the central recirculation zone is filled by burnt gases and stabilize the turbulent flame.

7.6.2 Instability sequence

LES also reveals that the combustor can exhibit a strong unstable mode when the outlet is acoustically closed (case REF). In this case, soon after ignition, the pressure and the global heat release start oscillating (Fig. 7.4) at 380 Hz. To analyse the behavior of this instability, the following sequence is set up :

- Starting from a stable flame (LEAK), the outlet impedance is changed to become reflecting (case REF) at time $t = 0.127s$ (Fig. 7.4). The oscillation grows and reaches a limit cycle at a frequency of 380 Hz mode.
- At time $t = 0.173s$, the outlet impedance is switched again to a non-reflecting condition (case LEAK) and the instability disappears.

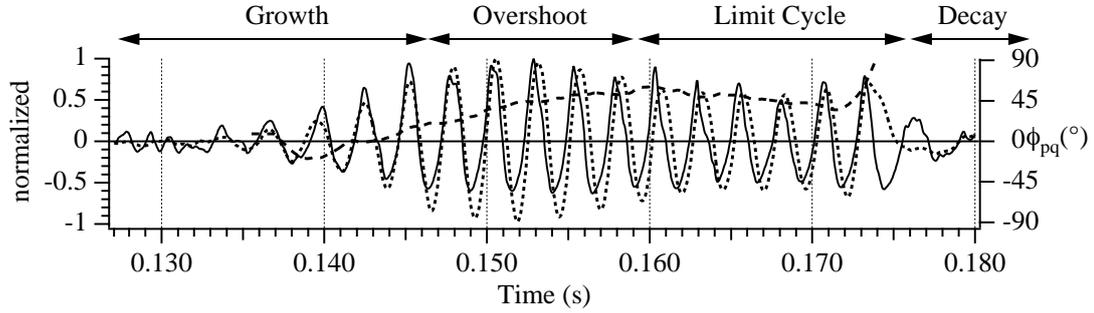


FIG. 7.4 – Mean normalized value of pressure (—) , heat release (·····) and phase angle between pressure and heat release (----).

This scenario provides four phases which are studied sequentially :

- A linear growth between times 0.127s and 0.145s,
- An overshoot phase between 0.145s and 0.160s
- A limit cycle between times 0.160s and 0.173s,
- A decay phase starting at $t = 0.173s$

For each phase, the instability is analyzed in terms of flame shape, flame oscillation and phase between heat release and pressure. Moreover, the acoustic energy equation budget is closed and all terms are analyzed.

7.6.3 Growth phase

Once the outlet boundary is acoustically closed ($t = 0.127s$), the thermoacoustic instability starts. Figure 7.5 displays the time variations of the combustion source term \mathcal{S}_1 , the acoustic losses \mathcal{F}_1 . The total acoustic energy evolution of the chamber \mathcal{E}_1 is shown in Fig. 7.7. Figure 7.6 shows that the budget of Eq. 7.3 is quite well closed by the LES data : the difference $\mathcal{S}_1 - \mathcal{F}_1$ matches the time derivative of \mathcal{E}_1 . This validates both the LES results and the acoustic energy equation 7.3. It is also the first example of such a treatment for a resonating combustor. Since the budget is closed, individual terms can then be analyzed.

First, the phase angle between pressure and heat release is displayed in Fig. 7.4. During the growth phase, it is close to zero and slowly shifting towards $\pi/4$, leading to a strong coupling between pressure and heat release i.e. a positive S_1 term. During the growth phase, the source term S_1 is large and always positive (Fig. 7.5), because the phase angle stays in the $[-\pi/2; \pi/2]$ range. Fig. 7.5 shows that the acoustic losses balance the reacting term S_1 in the acoustic budget equation. The limit cycle is controlled by acoustic losses and not by combustion.

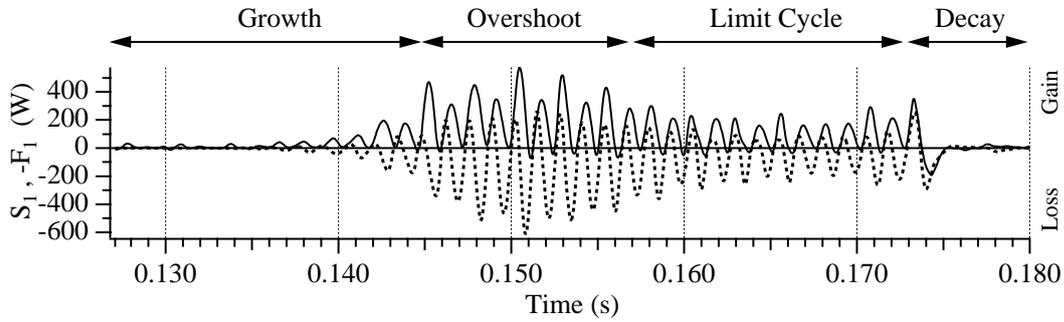


FIG. 7.5 – Rayleigh Criterion \mathcal{S}_1 (—) and acoustic fluxes \mathcal{F}_1 (.....).

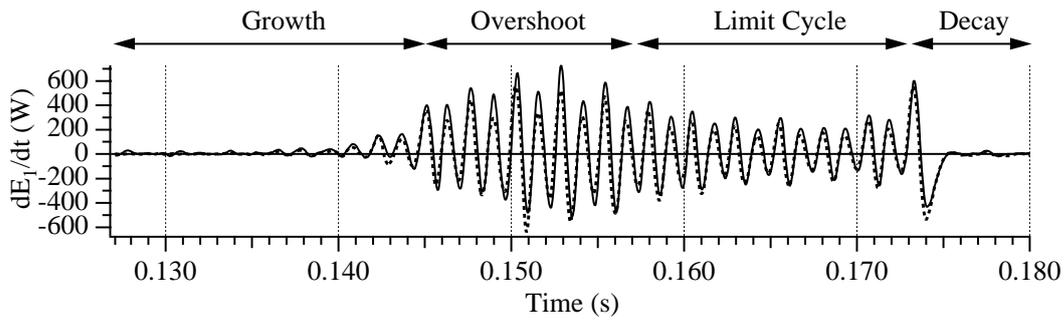


FIG. 7.6 – Comparison of the time derivative of the acoustic energy $\partial\mathcal{E}_1/\partial t$ (.....) and $\mathcal{S}_1 - \mathcal{F}_1$ (—).

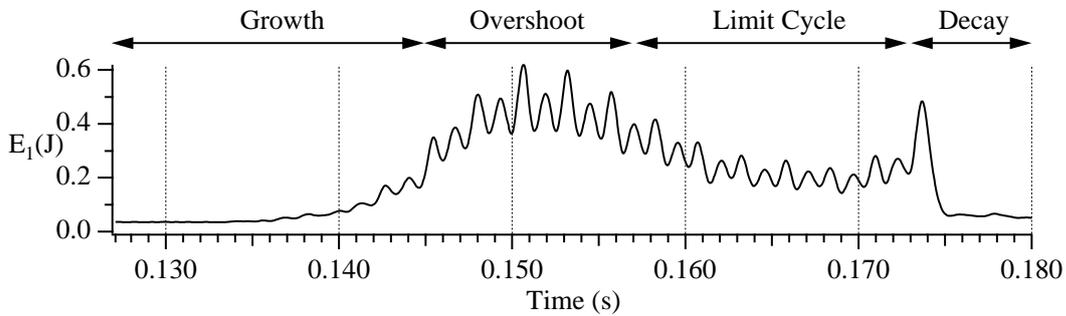


FIG. 7.7 – Evolution of the burner acoustic energy (\mathcal{E}_1).

7.6.4 Overshoot phase and limit cycle

At $t=0.160s$, the instability reaches a limit cycle at 380 Hz. Before reaching this limit cycle, a large overshoot of acoustic energy is observed : this is typical of combustion instabilities and it has been observed experimentally in other systems.^{45,50} Fig. 7.4 shows that, reaching the non-linear zone, the phase difference between pressure and heat release increases from zero to $\pi/4$ in the limit cycle zone. The drift of this phase difference together with increasing acoustic losses lead to the saturation of the instability.

The coupling loop between p_1 and $\dot{\omega}_{T1}$ can be identified from LES as follows. The longitudinal mode induces the formation of a vortex ring at the dump plane. This vortex ring strongly interacts in phase with the flame. Fig. 7.8 illustrates the interaction between the acoustically induced vortex ring and the flame brush. Fig. 7.9 allows to locate LES snapshots in the acoustic period and displays the mean pressure fluctuation p_1 in the flame zone, the heat release fluctuation $\dot{\omega}_{T1}$, and the fluctuation of the mean velocity in the dump plane u_1^{dump} . At instant 1, a vortex ring appears at the dump plane when du_1^{dump}/dt is maximum. The ring structure detaches and is convected through the flame by the mean flow (instants 2, 3 and 4). Between instants 1 and 3, the flow stretches the flame, increasing its area, whereas the flame wrinkling by the vortex ring remains weak. Consequently $\dot{\omega}_{T1}$ increases with a medium slope (Fig. 7.9). Between points 3 and 5 the vortex ring is stretching the flame and $\dot{\omega}_{T1}$ increases faster. Moreover, the vortex ring is gradually destroyed, and its global coherence disappears between instants 4 and 5, at a moment when du_1^{dump}/dt is minimum. At instant 5 some coherent structures are still interacting with the flame, producing (noisy) flame pockets and cusps. After 5, the flame burns out the fresh gases present in the chamber and propagates back to the injection pipe decreasing the overall flame surface and $\dot{\omega}_{T1}$.

7.6.5 Decay phase

The decay phase is triggered by the sudden change in the acoustic outlet boundary condition switching to non-reflecting (LEAK) at $t = 0.173s$. The phase angle $\phi_{p\omega}$ between pressure and heat release increases by a large amount : $\phi_{p\omega} > \pi/2$ at $t = 0.174s$ i.e $1.2ms$ after relaxing outlet pressure (Fig. 7.4). At this time \mathcal{S}_1 becomes globally negative for the first time and the instability is rapidly damped. The acoustic losses actually become positive (gain term) during this last oscillation but the instability *engine* is broken and the Rayleigh term \mathcal{S}_1 becomes negative during a half cycle ($0.173 < t < 0.175$ ms on Fig. 7.5) leading to the immediate decay of all unstable activity.

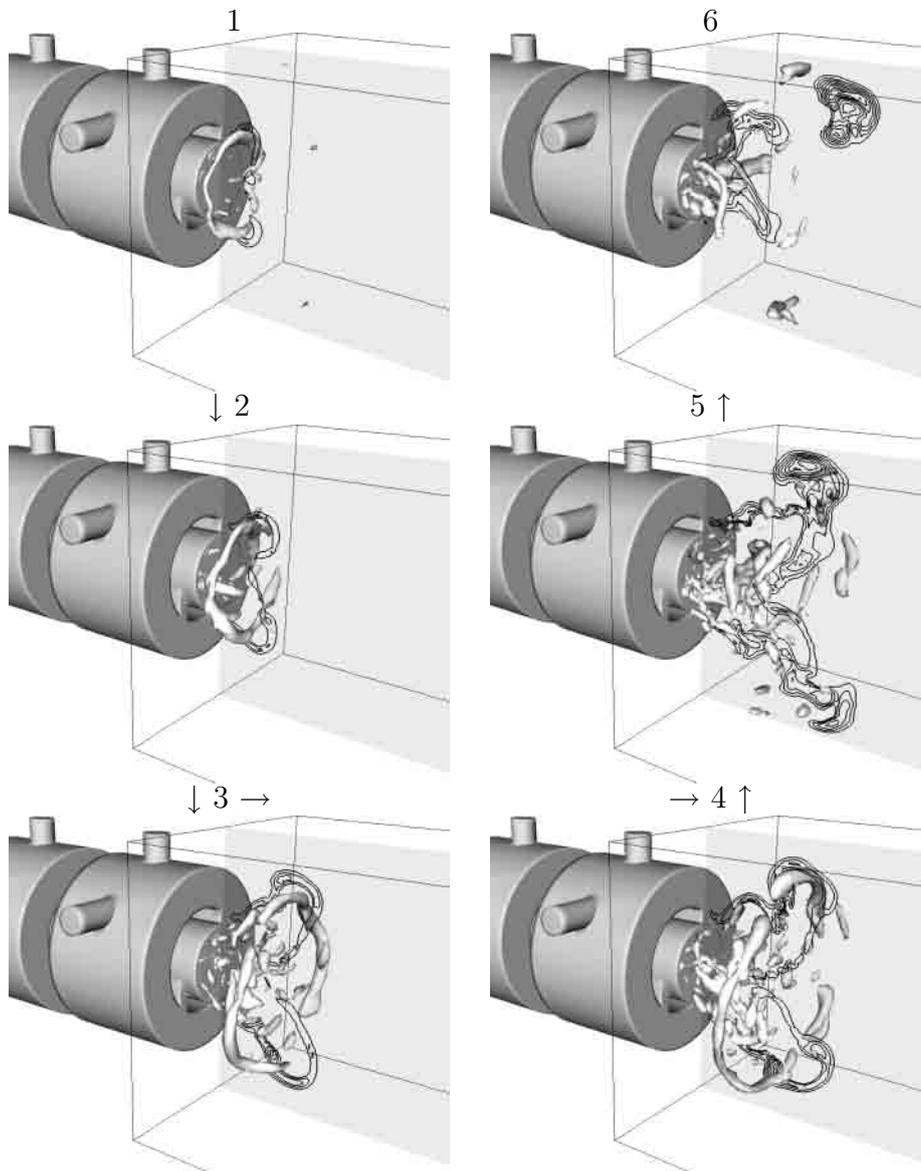


FIG. 7.8 – Vortex ring shedding at six instants (Fig. 7.9) during the limit cycle, isosurface : Q vortex criterion ; black lines : iso-reaction rate in the burner central plane.

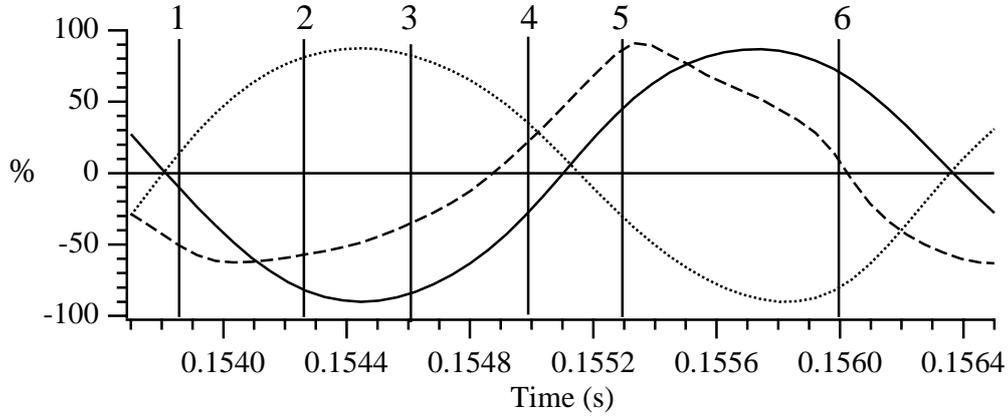


FIG. 7.9 – Time signals during the limit cycle and snapshots corresponding to the previous figure : pressure (—), inlet velocity (.....) and total heat release (----).

7.7 Acoustic Analysis results

This section describes the results obtained with the Helmholtz solver for the configuration of Fig. 7.1. The impedances are calculated from Eq. 7.16 using the value of σ given in Table 7.3. Eq. 7.16 shows that, for a fixed σ coefficient, the impedance is a function of the pulsation ω . To verify that Eq. 7.16 is sufficiently accurate, Table 7.3 gives the value of the impedance at 380 Hz (which is the frequency of the first mode observed in the LES) predicted by Eq. 7.16 and measured in the LES. For these computations, the flame transfer function is needed. In the present work, n and τ are obtained by post-processing LES results as described in the following section. These results are then used to predict the frequency and growth rates of all modes using the Helmholtz equation (Eq. 7.11) and to compare them to the LES results of the previous section.

7.7.1 Measurement of the flame transfer function (FTF)

The key mechanism to predict combustion instabilities in Helmholtz codes is the flame transfer function. In the model chosen in this study (Eq. 7.12), the heat release fluctuations are related to the velocity fluctuations at a reference point through the magnitude n and the phase ϕ of the FTF defined as :

$$n(\mathbf{x}, \omega) = \left| \frac{\hat{\Omega}_T(\mathbf{x})}{\hat{U}(\mathbf{x}_{\text{ref}}) \cdot \mathbf{n}_{\text{ref}}} \right| \quad (7.17)$$

$$\phi(\mathbf{x}, \omega) = \omega\tau(\mathbf{x}, \omega) = \arg\left(\frac{\hat{\Omega}_T(\mathbf{x})}{\hat{U}(\mathbf{x}_{\text{ref}}) \cdot \mathbf{n}_{\text{ref}}}\right) \quad (7.18)$$

Since the flame is more prone to interact with longitudinal oscillations, the reference normal vector \mathbf{n}_{ref} is set colinear to the axial direction so that the scalar product $\hat{U}(\mathbf{x}_{\text{ref}}) \cdot \mathbf{n}_{\text{ref}}$ corresponds to the axial velocity fluctuation at the reference point. This point is located following the Crocco approach¹⁴, that is to say in the fresh gas near the inlet combustor. As shown in Fig. 7.2, a recirculation zone located at the entrance of the dump combustor is induced by the swirling flow. Consequently, the reference point is located upstream of this zone⁷ at 113mm from the inlet of the device (Fig. 7.10) .

Flame transfer functions are usually measured for the whole combustor^{39,51,52} or by zones⁵³. In the present approach, n and ϕ must be obtained locally at each point of the combustor and this can be done by analyzing snapshot series from LES. Moreover, the frequency dependence of these parameters should be taken into account. To do so, it is assumed that FTF depends mostly on the real part of the frequency and not of the growth rate of the mode. Thus, at each subset k of the algorithm (Eq. 7.14), the FTF parameters are evaluated at $\Re(\omega_k/(2\pi))$, the first guess corresponds to the eigenmodes determined without active flame (n is set to zero everywhere).⁸ From a practical point of view, n and ϕ can be extracted from LES results by Fourier processing the local heat release and the unsteady velocity at the reference point and using Eq. 7.17 and 7.18. Two methodologies can be considered for such an analysis :

- Use a stable regime and force the flow (usually by introducing acoustic waves through the inlet.^{39,40,54})
- Or use a self-excited regime.

The choice of the methodology raises other fundamental issues which are still open today :

- Assuming that Eq. 7.12 is valid for both forced and self-excited cases, both methodologies are expected to provide the same n and ϕ fields. This is a theoretical argument which has not been checked yet and is left for further work.
- The possible dependence of the transfer function on the acoustics wave amplitude raises an additional difficulty. If n and τ depend on the wave amplitude, then both methodologies have drawbacks : the forcing method will provide different n and τ fields when the forcing amplitude changes while the self-excited method uses a non-linear limit cycle to evaluate n and τ .

These questions are beyond the scope of the present study. Here the fields of n and τ were measured by post-processing the self-excited regime between $t = 0.145s$ and $t = 0.177s$ in Fig. 7.4. Results given in the next section prove the validity of this method but further studies are obviously needed. The resulting

⁷Other positions in the vicinity of this location have been tested leading to very similar results with the Helmholtz solver.

⁸Further studies are needed to assess this assumption used to practical reasons.

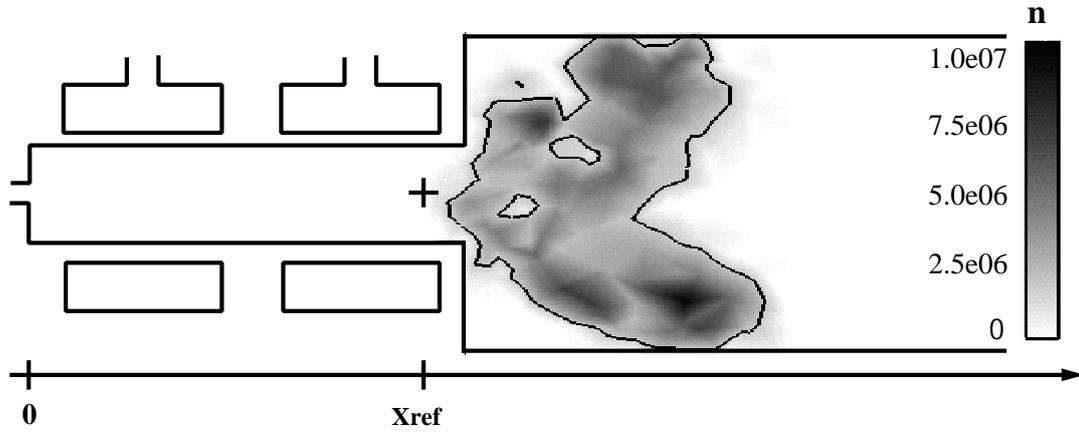


FIG. 7.10 – Flame transfer function magnitude (n parameter) field in the central plane evaluated at $f = 432$ Hz, black line : iso- $n = 2.5 \cdot 10^6 \text{ Pa} \cdot \text{m}^{-1}$, black cross : reference point location.

flame transfer function parameters, displayed only within the flame zone (when $n \geq 2.5 \times 10^6 \text{ Pa} \cdot \text{m}^{-1}$), are shown in Fig. 7.10 and 7.11.

7.7.2 Helmholtz solver results

Using the mean fields given by LES, the Helmholtz solver is applied to obtain the thermoacoustic eigenmodes of the burner. This tool can be run using either a non-active flame (i.e. setting n to zero everywhere) or an active flame (using the post-processed n and ϕ fields displayed). Moreover, the impedance values are determined from the LES boundary conditions settings (Table 7.3).

First, when the outlet impedance corresponds to the LEAK case, the Helmholtz solver predicts that all modes are damped. This confirms the LES result of Fig. 7.2 for which no acoustic mode was found for this regime.

Second, when the outlet impedance corresponds to the REF case, Table 7.4 presents the modes which are obtained for both the non-active and the active flames. These four modes in the REF case are all longitudinal except in the vicinity of the swirler : the structure of the modes in the central plane of the burner is displayed in Fig. 7.12, while a one dimensional cut of the RMS pressure field is given in Fig. 7.13. The real frequencies of the active and non-active cases are very similar : typically, taking into account the active effect of the flame shifts the eigenmode frequency by a few percent. However the effect on the growth rate is more dramatic : all modes computed with the non-active flame are damped while the modes computed with an active flame are excited for modes 2, 3 and 4. The fastest growing mode is mode 2 at 432 Hz which is close to the mode observed in the LES (380 Hz). To verify that the mode 2 obtained by the Helmholtz solver is indeed the mode appearing in the LES, Fig. 7.14 compares the

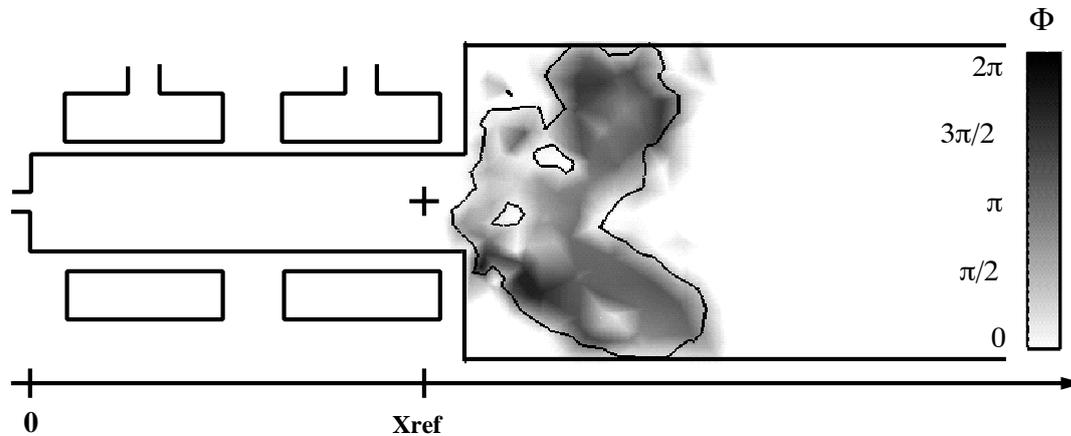


FIG. 7.11 – Flame transfer function phase (ϕ parameter) field in the central plane evaluated at $f = 432$ Hz, black line : iso- $n = 2.5 \cdot 10^6 \text{ Pa} \cdot \text{m}^{-1}$, black cross : reference point location.

$|\hat{P}|$ profiles on the axis and confirms the good agreement of LES and Helmholtz solver. The difference between the frequency observed in the LES (380 Hz) and the frequency predicted by the Helmholtz solver (432 Hz) is probably due to the zero Mach number approximation for the Helmholtz solver.

7.8 Conclusions

Three tools have been used to analyse flame / acoustics coupling mechanisms in a staged swirled combustor : full compressible LES, Helmholtz analysis and budget of acoustic energy. The two latter methods are based on the wave equation in reacting flows. They use LES results but provide essential new elements : the Helmholtz results allow to predict the stability of the combustor and the exact identification of modes appearing during the instability, while the budget of acoustic energy demonstrates that the Rayleigh criterion is not the only or even the largest term in the acoustic energy equation : acoustic losses at the outlet of the combustor contribute significantly to the budget of acoustic energy and determine the levels of oscillation amplitudes as well as their appearance.

More generally, this study confirms the need of coupling classical CFD (here LES) and acoustic analysis to understand combustion instabilities. It also demonstrates the crucial effect of acoustic boundary conditions on the stability of combustors. This has a practical implication : the stability of a given combustion chamber is controlled by acoustic impedances upstream and downstream of the combustor. Removing a combustor section from a full gas turbine to install it in a laboratory set-up, obviously becomes very dangerous to study the stability of the burner. Indeed, the combustion may prove to be stable in one case and unstable

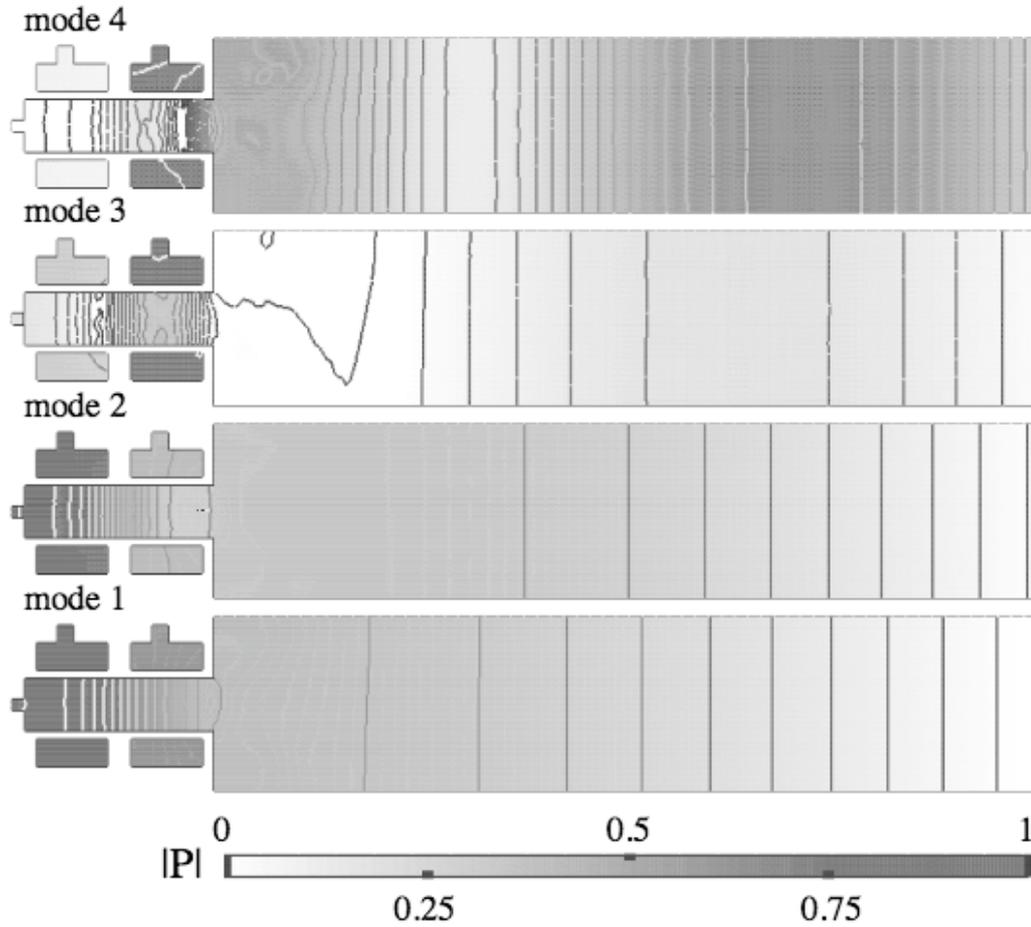


FIG. 7.12 – Acoustic pressure modulus for the first four modes calculated by the Helmholtz solver with active acoustic flame in the REF case, $|\hat{P}|$ iso-lines .

TAB. 7.4 – Helmholtz solver results : real part of the frequencies (F) and growth rates (α) of the first four modes predicted by the acoustic solver with and without acoustics/flame coupling.

Mode	no active flame		active flame	
	F [Hz]	α [rd.s ⁻¹]	F [Hz]	α [rd.s ⁻¹]
1	312	-48	334	-588
2	431	-32	432	600
3	841	-4.5	825	6
4	1140	-63	1116	363

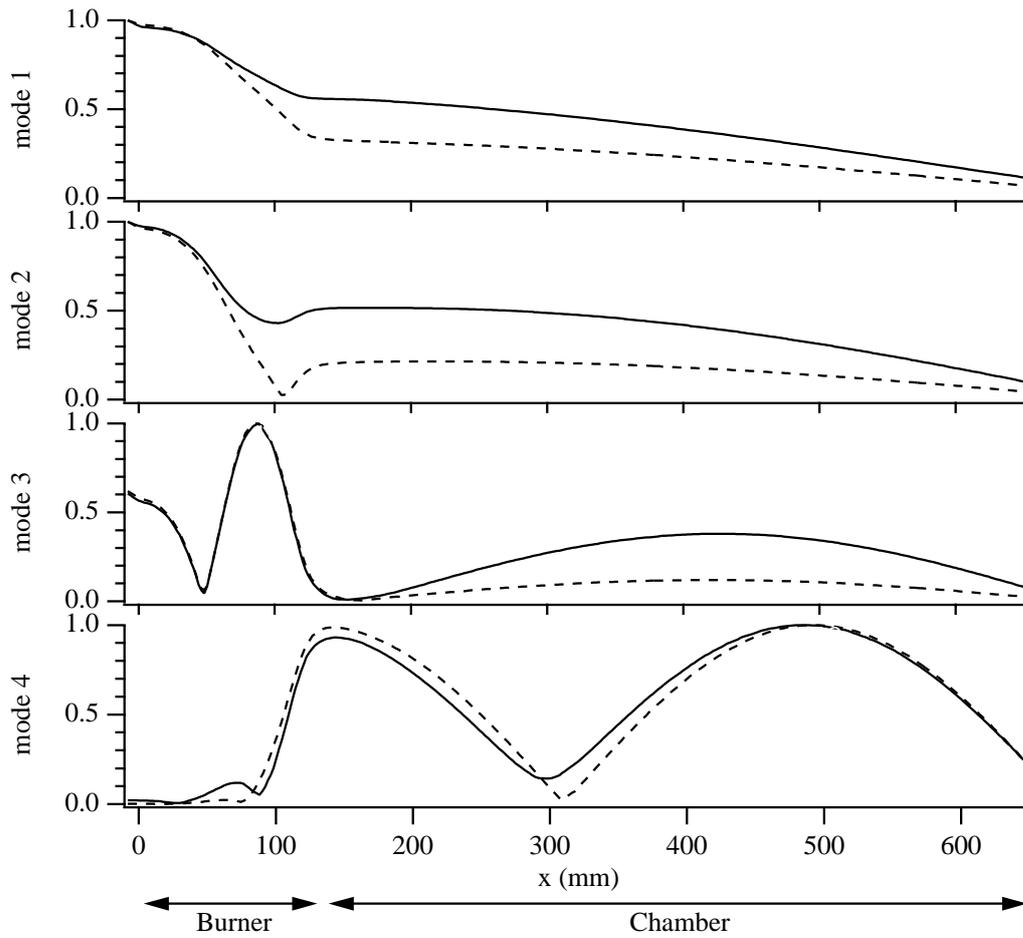


FIG. 7.13 – Longitudinal structure of the first four modes obtained from the Helmholtz solver : Normalized p_1^{rms} evolution along burner axis with acoustics/flame coupling (—) and without (----).

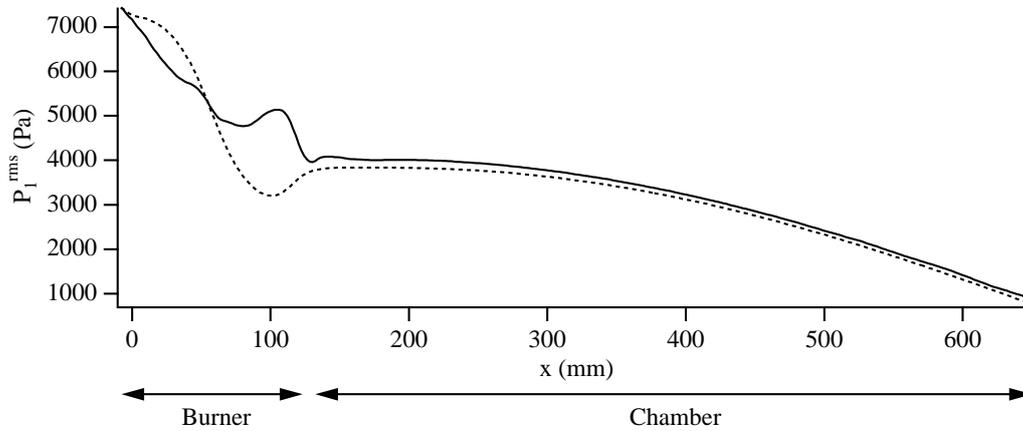


FIG. 7.14 – Comparison of LES (—) and acoustic (----) solvers : RMS pressure fluctuations p_1^{rms} along burner axis.

in the other one. This result calls for the development of more coupled acoustics analysis of the whole turbine.

Acknowledgments

Certain numerical simulations have been conducted on the computers of the CINES and IDRIS french national computing centers. Simulations have been supported partly by ALSTOM POWER and by the EC program (WP2) FUELCHIEF.

7.9 References

- ¹Poinsot, T., Trounev, A., Veynante, D., Candel, S., and Esposito, E., "Vortex driven acoustically coupled combustion instabilities," *J. Fluid Mech.*, Vol. 177, 1987, pp. 265-292.
- ²Candel, S. "Combustion instabilities coupled by pressure waves and their active control.," *24th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992.
- ³Crighton, D. G., Dowling, A., Ffowcs Williams, J. E., Heckl, M., and Leppington, F., *Modern methods in analytical acoustics*, Springer Verlag, 1992.
- ⁴Poinsot, T. and Veynante, D., *Theoretical and numerical combustion-2nd Edition*, R.T. Edwards, 2005.
- ⁵Peters, N., *Turbulent combustion*, Cambridge University Press, 2000.
- ⁶Angelberger, C., Egolfopoulos, F., and Veynante, D., "Large Eddy Simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities," *Flow Turb. and Combustion*, Vol. 65, 2, 2000, pp. 205-220.

- ⁷Caraeni, D., Bergström, C., and Fuchs, L., "Modeling of Liquid Fuel Injection, Evaporation and Mixing in a Gas Turbine Burner Using Large Eddy Simulation," *Flow Turb. and Combustion*, Vol. 65, 2000, pp. 223-244.
- ⁸Colin, O. and Rudgyard, M., "Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations," *J. Comput. Phys.*, Vol. 162, 2, 2000, pp. 338-371.
- ⁹DesJardin, P. E. and Frankel, S. H., "Two dimensional Large Eddy Simulation of soot formation in the near field of a strongly radiating nonpremixed acetylene-air jet flame," *Combust. Flame*, Vol. 119, 1/2, 1999, pp. 121-133.
- ¹⁰Pierce, C. D. and Moin, P., "Progress-variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion," *J. Fluid Mech.*, Vol. 504, 2004, pp. 73-97.
- ¹¹Pitsch, H. and Duchamp de la Geneste, L., "Large Eddy Simulation of Premixed Turbulent Combustion using a level-set approach," *Proc of the Comb. Institute*, Vol. 29, 2002, pp. 2001-2008.
- ¹²Selle, L., Lartigue, G., Poinso, T., Koch, R., Schildmacher, K. U., Krebs, W., Prade, B., Kaufmann, P., and Veynante, D., "Compressible Large-Eddy Simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes," *Combust. Flame*, Vol. 137, 4, 2004, pp. 489-505.
- ¹³Martin, C., Benoit, L., Nicoud, F., and Poinso, T., Analysis of acoustic energy and modes in a turbulent swirled combustor. *Proc of the Summer Program*, Stanford, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2004, pp. 377-394.
- ¹⁴Crocco, L. "Research on combustion instability in liquid propellant rockets," *12th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1969.
- ¹⁵Stow, S. R. and Dowling, A. P. "Thermoacoustic oscillations in an annular combustor," *ASME Paper*, New Orleans, Louisiana, 2001.
- ¹⁶Culick, F. E. C., "Combustion instabilities in liquid-fueled propulsion systems-an overview," *AGARD*, Vol. 72B, 1988, pp. 1-73.
- ¹⁷Dowling, A. P., "The calculation of thermoacoustic oscillations," *J. Sound Vibration*, Vol. 180, 4, 1995, pp. 557-581.
- ¹⁸Rayleigh, L., "The explanation of certain acoustic phenomena," *Nature*, Vol. July 18, 1878, pp. 319-321.
- ¹⁹Légier, J.-P., Poinso, T., and Veynante, D. "Dynamically thickened flame Large Eddy Simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion," *Summer Program 2000*, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000.
- ²⁰Duchamp de Lageneste, L. and Pitsch, H. "Progress in large eddy simulation of premixed and partially premixed turbulent combustion," *Annual Research Briefs*, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2001.
- ²¹Kempf, A., Forkel, H., Chen, J.-Y., Sadiki, A., and Janicka, J., "Large-eddy simulation of a counterflow configuration with and without combustion," *Proc. of the Combustion Institute*, Vol. 28, 2000, pp. 35-40.
- ²²Pitsch, H. and Steiner, H., "Large Eddy Simulation of a Turbulent Piloted Methane/Air Diffusion Flame (Sandia Flame D)," *Phys. Fluids*, Vol. 12, 2000, pp.

2541-2554.

²³Lele, S., "Compact finite difference schemes with spectral like resolution," *J. Comput. Phys.*, Vol. 103, 1992, pp. 16-42.

²⁴Ducros, F., Comte, P., and Lesieur, M., "Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate," *J. Fluid Mech.*, Vol. 326, 1996, pp. 1-36.

²⁵Gamet, L., Ducros, F., Nicoud, F., and Poinso, T., "Compact Finite Difference Schemes on Non-Uniform Meshes. Application to Direct Numerical Simulations of Compressible Flows.," *Int. J. for Num. Meth. in Fluids*, Vol. 29, 2, 1999, pp. 159-191.

²⁶Sagaut, P., *Large Eddy Simulation for incompressible flows*, Springer-Verlag, 2000.

²⁷Scotti, A., Meneveau, C., and Lilly, D. K., "Generalized Smagorinski model for anisotropic grids," *Phys. Fluids*, Vol. 5, 9, 1993, pp. 2306-2308.

²⁸Scotti, A., Meneveau, C., and Fatica, M., "Generalized Smagorinski model for anisotropic grids," *Phys. Fluids*, Vol. 9, 6, 1997, pp. 1856-1858.

²⁹Vasilyev, O. V., Lund, T. S., and Moin, P., "A general class of commutative filters for LES in complex geometries," *J. Comput. Phys.*, Vol. 146, 1998, pp. 82-104.

³⁰Nicoud, F. and Ducros, F., "Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient," *Flow Turb. and Combustion*, Vol. 62, 3, 1999, pp. 183-200.

³¹Colin, O., Ducros, F., Veynante, D., and Poinso, T., "A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion," *Phys. Fluids*, Vol. 12, 7, 2000, pp. 1843-1863.

³²Butler, T. D. and O'Rourke, P. J. "A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows," *16th Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, 1977.

³³Angelberger, C., Veynante, D., Egolfopoulos, F., and Poinso, T. "Large Eddy Simulations of combustion instabilities in premixed flames," *Summer Program*, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.

³⁴Charlette, F., Veynante, D., and Meneveau, C., "A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests," *Combust. Flame*, Vol. 131, 2002, pp. 159-180.

³⁵Peters, N. and Rogg, B., *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* Heidelberg, Springer Verlag, 1993.

³⁶Roux, S., Lartigue, G., Poinso, T., Meier, U., and Berat, c., "Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis, and large eddy simulations," *Combust. Flame*, Vol. 141, 1, 2005, pp. 40-54.

³⁷Paschereit, C. O., Flohr, P., and Schuermans, B. "Prediction of combustion oscillations in gas turbine combustors.," *39th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.*, Reno, NV, 2001.

³⁸Krueger, U., Hueren, J., Hoffmann, S., Krebs, W., Flohr, P., and Bohn, D.

- "Prediction and measurements of thermoacoustic improvements in gas turbines with annular combustion systems," *ASME TURBO EXPO 2000*, 2000.
- ³⁹Polifke, W., Poncet, A., Paschereit, C. O., and Doebbeling, K., "Reconstruction of acoustic transfer matrices by instationary computational fluid dynamics," *J. Sound Vibration*, Vol. 245, 3, 2001, pp. 483-510.
- ⁴⁰Kaufmann, A., Nicoud, F., and Poinso, T., "Flow forcing techniques for numerical simulation of combustion instabilities," *Combust. Flame*, Vol. 131, 2002, pp. 371-385.
- ⁴¹Chatelin, F., *Eigenvalues of matrices*, J. Wiley, 1993.
- ⁴²Lehoucq, R., Maschoff, K., Sorensen, D., and Yang, C., "ARPACK Homepage", 1996, <http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK>
- ⁴³Nicoud, F. and Benoit, L., "Global tools for thermo-acoustic instabilities in gas turbines," *Bulletin of the American Physical Society*, Vol. 48, 10, 2003, pp. 240-241.
- ⁴⁴Benoit, L. and Nicoud, F. "Numerical assessment of thermo-acoustic instabilities in gas turbines," *ICFD Conference of numerical methods for fluid dynamics.*, Oxford, University of Oxford, 2004.
- ⁴⁵Poinso, T., Veynante, D., Bourienne, F., Candel, S., Esposito, E., and Surjet, J. "Initiation and suppression of combustion instabilities by active control," *22nd Symp. (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988.
- ⁴⁶Rogers, D. E. and Marble, F. E., "A mechanism for high frequency oscillations in ramjet combustors and afterburners," *Jet Propulsion*, Vol. 26, 1956, pp. 456-462.
- ⁴⁷Yang, V. and Culick, F. E. C., "Analysis of low-frequency combustion instabilities in a laboratory ramjet combustor," *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 45, 1986, pp. 1-25.
- ⁴⁸Poinso, T. and Lele, S., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows," *J. Comput. Phys.*, Vol. 101, 1, 1992, pp. 104-129.
- ⁴⁹Selle, L., Nicoud, F., and Poinso, T., "The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators," *AIAA Journal*, Vol. 42, 5, 2004, pp. 958-964.
- ⁵⁰Lang, W., Poinso, T., and Candel, S., "Active control of combustion instability," *Combust. Flame*, Vol. 70, 1987, pp. 281-289.
- ⁵¹Flohr, P., Paschereit, C. O., and Belluci, V. "Steady CFD Analysis for Gas Turbine Burner Transfer Functions," *41st AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, AIAA, 2003.
- ⁵²Pankiewitz, C., Fischer, A., Hirsch, C., and Sattelmayer, T. "Computation of Transfer Matrices for Gas Turbine Combustors Including Acoustics/Flame Interaction," *9th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference & Exhibit*, Hilton Head, SC, USA, 2003.
- ⁵³Varoquie, B., Legier, J., Lacas, F., Veynante, D., and Poinso, T., "Experimental analysis and large eddy simulation to determine the response of non-premixed flame submitted to acoustic forcing," *Proc. of the Combustion Institute*, Vol. 29,

2002, pp. 1965-1970.

⁵⁴Ducruix, S. and Candel, S., "External flow modulation in computational fluid dynamics," *AIAA Journal* , Vol. 42, 8, 2004, pp. 1550-1558.

Conclusion

Ce travail de thèse s'est concentré sur le développement d'outils numériques et de méthodes d'études des instabilités de combustion dans les brûleurs de turbine à gaz. La mise en oeuvre d'outils de simulation aux grandes échelles dans des configurations complexes ainsi que de solveurs acoustiques a permis d'étudier les caractéristiques de l'instabilité d'un brûleur expérimental fonctionnant en mode prémélangé. La mise en oeuvre de calcul réactif nécessite néanmoins une prise en compte précise des phénomènes réactifs dans les flammes :

Optimisation de la cinétique chimique

Une part du travail réalisé ici concerne la mise au point d'un outil d'optimisation des schémas cinétiques réduits utilisés dans les calculs réactifs. Cet outil se base sur une approche génétique pour optimiser le jeu de paramètres définissant la cinétique. Cet outil a montré sa capacité opérationnelle à produire des cinétiques chimiques multi-étapes adaptées aux conditions opératoires. Il participe ainsi à garantir une bonne précision dans la modélisation des réactions chimiques dans les simulations aux grandes échelles.

La principale évolution de cet outil devrait d'abord porter sur la diminution du temps de restitution. L'utilisation d'un algorithme génétique générationnel permet une parallélisation aisée de la phase d'évaluation, qui reste la plus coûteuse en temps de calcul. Enfin, l'optimisation actuelle vise à reproduire les propriétés globales de flamme laminaires, mais toute évolution reste possible pour se baser sur d'autre structure de flamme (diffusion) ou modèle de combustion simplifié (allumage, réacteur prémélangé etc.)

Etude des instabilités de combustion et bilan d'énergie acoustique

L'étude de l'instabilité du brûleur expérimental a été réalisée principalement à l'aide de calcul LES. Après validation de l'aérodynamique interne sans combustion, les simulations réactives instationnaires ont été menées. Dans un premier temps, on a maintenu le brûleur dans un mode de combustion stable. Puis, en modifiant la condition limite de sortie, on accède à un mode de combustion

instable. Ceci a permis la capture d'une séquence instable incluant une phase de croissance, un cycle limite et un amortissement. La caractérisation des modes acoustiques du brûleur a été entreprise à l'aide un code acoustique, permettant de déterminer l'ensemble des modes acoustiques du brûleur. Néanmoins, en prédisant deux modes proches tant en forme qu'en fréquence, il ne permet pas d'associer catégoriquement un de ces modes au mode s'exprimant dans la LES. Seule la prise en compte des effets de la combustion dans le code acoustique, a permis de déterminer le mode responsable de l'instabilité. La LES prouve là, sa capacité à fournir les fonctions de transfert de flamme aux solveurs thermo-acoustiques.

Les données instationnaires de la LES ont permis en outre d'appliquer une approche énergétique de l'étude d'instabilité de combustion. Les développements théoriques antérieurs portant sur le bilan de l'énergie acoustique dans les milieux réactifs a été repris. Ce bilan permet de mesurer les termes promoteurs ou amortisseurs de l'instabilité, et ainsi de définir un critère de stabilité des systèmes de combustion. Les données collectées ont permis de valider cette approche en permettant la fermeture du bilan d'énergie acoustique proposé.

Les prolongations exploitant le bilan d'énergie acoustique sont nombreuses. En effet, les hypothèses simplificatrices menant au bilan d'énergie utilisé ici, semblent dans certains cas être trop restrictives. Il est alors intéressant de prendre en compte les effets de convection ou de dissipation comme la fermeture du bilan d'énergie sur le brûleur EV7 semble le suggérer[125]. Une évaluation comparée des termes négligés peut être riche d'enseignements. Pour faciliter cette tâche, il est alors nécessaire de se doter d'un outil de post traitement précis et efficace, capable de traiter rapidement une grande quantité de données.

Bibliographie

- [1] A.Y. Abdalla, D. Bradley, S.B. Chin, and C. Lam. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Oxidation communications*, 4 :113–130, 1983.
- [2] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinso. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In Center for Turbulence Research, editor, *Summer Program*, pages 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.
- [3] J.E. Baker. Reducing bias and inefficiency in the selection algorithm. In *Proceedings of the second international conference on genetic algorithms*, pages 14–21, Hillsdale, NJ, 1987.
- [4] P. Barr, J. Keller, T. Bramlette, C. Westbrook, and Dec J. Pulse combustor modeling demonstration of the importance of characteristic times (associated with acoustics, fluid mixing, chemical kinetics). *Combust. Flame*, 82 :252–262, 1990.
- [5] P. Baudouin. *Design of a film cooled MEMS micro Turbine*. Phd thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2001.
- [6] M. Baum, T. J. Poinso, and D. Thévenin. Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows. *J. Comput. Phys.*, 116 :247–261, 1994.
- [7] L. Benoit. *Prédictions des instabilités thermoacoustiques dans les turbines à gaz*. Thèse de doctorat, UNIVERSITE DE MONTPELLIER II, 2005.
- [8] G. Bloxsidge, A. Dowling, N. Hooper, and P. Langhorne. Active control of reheat buzz. *AIAA Journal*, 26 :783–790, 1988.
- [9] K.N.C. Bray, M. Champion, and P.A. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In R. Borghi and S.N.B. Murthy, editors, *Turbulent Reactive Flows*, volume 40, pages 541–563. Lecture notes in engineering, Springer Verlag, 1989.
- [10] H. Buchner. Coherent flow structures in turbulent swirl flames as drivers for combustion instabilities. In *In Proceedings of the International Colloquium on Combustion and Noise Control*, Cranfield University, 2003.
- [11] T.D. Butler and P.J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1503 – 1515. The Combustion Institute, 1977.

- [12] S. Candel. Combustion instabilities coupled by pressure waves and their active control. In *24th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1277–1296. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992.
- [13] S. Candel. Combustion dynamics and control : progress and challenges. In *29th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1–28. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2002.
- [14] S. Candel and T. Poinsot. A tutorial on acoustics. Technical Report Cours de l'Ecole Centrale Paris, 1988.
- [15] CFD-Team. Avbp handbook, 2005.
- [16] B.T.. Chu. On the energy transfer to small disturbances in fluid flow (part i). *Acta Mechanica*, pages 215–234, 1965.
- [17] P. Clavin. Premixed combustion and gas dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, pages 321–352, 1994.
- [18] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* , 12(7) :1843–1863, 2000.
- [19] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.* , 162(2) :338–371, 2000.
- [20] L. Crocco. Theoretical studies on liquid propellant rocket instability. In *10th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1101–1128. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1965.
- [21] L. Crocco and S.I. Cheng. *Theory of combustion instability in liquid propellant rocket motors*, volume Agardograph No 8. Butterworths Science, 1956.
- [22] F. E. C. Culick. Stability of longitudinal oscillations with pressure and velocity coupling in a solid propellant rocket. *Combust. Sci. Tech.* , 2 :179–201, 1970.
- [23] F.E.C Culick. Non linear behavior of acoustic waves in combustion chambers. *Astronautica Acta*, 3 :714–757, 1976.
- [24] F.E.C Culick. Combustion instabilities in liquid-fueled propulsion systems—an overview. *AGARD*, 72B :1–73, 1988.
- [25] F.E.C Culick and C. Yang. An overview of combustion instabilities in liquid propellant rocket. *AIAA Progress in astronautics and aeronautics*, 169 :3–37, 1995.
- [26] K.A. DeJong. *An Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems*. PhD thesis, University of Michigan, 1976.
- [27] N. Dioc. *Etude expérimentale des mécanismes d'instabilité dans un brûleur a combustion étagée - Application aux turbines à gaz*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris, 2005.

- [28] L. Duchamp de lageneste and H. Pitsch. A level set approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. Technical report, Center for Turbulence Research, Stanford Univ., 2000.
- [29] S. Ducruix and S. Candel. External flow modulation in computational fluid dynamics. *AIAA Journal*, 42(8) :1550–1558, 2004.
- [30] S. Ducruix, D. Durox, and S. Candel. Theoretical and experimental determinations of the transfer function of a laminar premixed flame. In *28th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 765–773. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000.
- [31] J. Eckstein, E. Freitag, C. Hirsch, and T. Sattelmayer. Experimental study on the role of entropy waves in low frequency oscillations for a diffusion burner. In *In Proceedings of ASME Turbo Expo*, Vienna, Austria, 2004.
- [32] L. Elliott, D.B. Ingham, A.G. Kyne, N.S. Mera, M. Pourkashanian, and C.W. Wilson. Genetic algorithm for optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms. *Progress in Energ. and Comb. Science*, 30 :297–328, 2004.
- [33] B. Engquist and A. Majda. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. *Math. Comput.*, 31(139) :629–651, 1977.
- [34] C.M. Fonseca and P.J. Fleming. Genetic algorithms for multiobjective optimization : formulation, discussion and generalization. In CA Forrest, Kauffman San Mateo, editor, *Proc. 5th Int. Conf. on Genetic Algorithms*, pages 416–423, Urbana-Champaign, IL, 1993.
- [35] C.M. Fonseca and P.J. Fleming. An overview of evolutionary algorithms in multiobjective optimization. *Evolutionary Computation*, 3(1) :1–16, 1995.
- [36] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3(7) :1760 – 1765, 1991.
- [37] A. Giauque, L. Selle, T. Poinso, H. Buchner, P. Kaufman, and W. Krebs. System identification of large-scale swirled partially premixed combustor. *J. Turbulence*, page submitted, 2005.
- [38] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulation using flame prolongation of ildm with differential diffusion. In *28th Symp. (Int.) on Combustion*, volume 28, pages 1901–1908. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000.
- [39] M. Giles. Non-reflecting boundary conditions for euler equation calculations. *AIAA Journal*, 28(12) :2050–2058, 1990.
- [40] P. Glarborg, R.J. Kee, J.F. Grcar, and J.A. Miller. A fortran program for modeling well stirred reactors. Technical Report SAND86-8209, Sandia National Laboratories, 1986.
- [41] D.E. Goldberg. *Genetic Algorithms in search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Inc., Menlo Park, CA, 1985.

- [42] D.E. Goldberg, K. Deb, and B. Korb. Do not worry, be messy. In R. Belew and L. Booker, editors, *Proceedings of the fourth international conference on genetic algorithm*, pages 24–30, San Mateo, CA, 1991. Morgan Kaufman.
- [43] E. Gutmark, T. Parr, D. Hanson-Parr, and K. Schadow. On the lean blowout limit of premixed flames. In AIAA 89-0154, editor, *27th Aerospace Sciences Meeting*, Reno, 1989.
- [44] S.D. Harris, L. Elliott, D.B. Ingham, M. Pourkashanian, and C.W. Wilson. The optimisation of rate parameters for chemical kinetic modelling of combustion using genetic algorithms. *Computer methods in applied mechanical engineering*, 190 :1065–1090, 2000.
- [45] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and R.B. Byrd. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969.
- [46] J.H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975.
- [47] Y. Huang, H.G. Sung, S.Y. Hsieh, and V. Yang. Large eddy simulation of combustion dynamics of lean-premixed swirl-stabilized combustor. *J. Prop. Power*, 19(5) :782–794, 2003.
- [48] S. Hubbard and A.P. Dowling. Acoustic instabilities in premix burners. In *4th AIAA/CEAS aeroacoustics conference*, volume 98-2272, Toulouse, France, 1998.
- [49] K.J. Hughes, T. Turányi, A. Clague, and M.J. Pilling. Development and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane. *Int.J.Chem.Kinet.*, 33 :513–538, 2001.
- [50] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In AIAA paper 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981.
- [51] Y. Jin, T. Okabe, and B. Sendoff. Adapting weighted aggregation for multi-objective evolution strategies. In *First International Conference On Evolutionary Multi-criterion Optimization*, Lecture notes in Computer Science, pages 96–110. Deb, K., Zurich, 2001.
- [52] W. P. Jones and R. P. Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame*, 73 :222–233, 1988.
- [53] T. Just. Multichannel reactions in combustion. *Proc. of the Combustion Institute*, 25 :687–704, 1994.
- [54] R. J. Kee, J. F. Grear, M. Smooke, and J. A. Miller. Premix : A fortran program for modeling steady laminar one-dimensional flames. Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.

- [55] R. J. Kee, J. A. Miller, and T. H. Jefferson. Chemkin : A general-purpose, problem-independent, transportable, fortran chemical-kinetics code package. Technical Report SAND80-8003, Sandia National Laboratories, 1980.
- [56] R.J. Kee, F.M. Rupley, and J.A. Miller. Chemkin-ii : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Technical Report SAND89-8009B, Sandia National Laboratories, 1989.
- [57] J.J. Keller and K. Saito. Measurements of the combusting flow in a pulse combustor. *Combust. Sci. Tech.* , 53 :137–163, 1987.
- [58] J.O. Keller, L. Vaneveld, D. Korschelt, G.L. Hubbard, A.F. Ghoniem, J.W. Daily, and A.K. Oppenheim. Mechanism of instabilities in turbulent combustion leading to flashback. *AIAA Journal*, 20 :254–262, 1981.
- [59] W.W. Kim, S. Menon, and H.C. Mongia. Large-eddy simulation of a gas turbine combustor. *Combust. sci. technol.*, 143(1-6) :25–62, 1999.
- [60] K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.
- [61] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique Théorique - Tome 6 : Mécanique des Fluides*. Ed. Librairie du Globe- Editions MIR, 1984.
- [62] G. Lartigue. *Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2004.
- [63] J.-Ph. L egier. *Simulations num eriques des instabilit es de combustion dans les foyers a eronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001.
- [64] J.-Ph. L egier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000*, pages 157–168, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000.
- [65] P. LeHelley. *Etude theorique et experimentale des instabilites de combustion et de leur controle dans un bruleur premelange*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 1994.
- [66] S. Lele. Compact finite difference schemes with spectral like resolution. *J. Comput. Phys.* , 103 :16–42, 1992.
- [67] S.C. Li, B. Varatharajan, and F.A. Williams. The chemistry of jp-10 ignition. *AIAA Journal*, 39(12) :2351–2356, 2001.
- [68] T. Lieuwen and B.T. Zinn. The role of equivalence ratio oscillations in driving combustion instabilities in low nox gas turbines. *Proc. of the Combustion Institute*, 27 :1809–1816, 1998.
- [69] T. C. Lieuwen and J.H. Cho. Modeling the response of premixed flames due to mixture ratio perturbations. In *ASME Turbo Expo 2003*, Atlanta, Georgia , U.S.A., 2003.

- [70] O. Lucca-Negro and T. O'Doherty. Vortex breakdown : a review. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 27 :431–481, 2001.
- [71] A.E. Lutz, R.J. Kee, and J.A. Miller. Senkin : A fortran program for predicting homogeneous gas phase kinetics with sensitivity analysis. Technical Report SAND87-8248, Sandia National Laboratories, 1991.
- [72] U. Maas and S.B. Pope. Simplifying chemical kinetics - intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame* , 88 :239–264, 1992.
- [73] K. Mahesh, G. Constantinescu, and P. Moin. A numerical method for large-eddy simulation in complex geometries. *J. Comput. Phys.* , 197 :215–240, 2004.
- [74] F.E.C. Marble and S. Candel. Acoustic disturbance form gaz non-uniformiies convected through a nozzle. *J. Sound Vibration* , 55(2) :225–243, 1977.
- [75] C. Martin. Eporck user guide v1.8. Technical Report TR/CFD/04/84, CERFACS, 2004.
- [76] C. Martin, L. Benoit, F. Nicoud, and T. Poinso. Analysis of acoustic energy and modes in a turbulent swirled combustor. In *Proc of the Summer Program*, pages 377–394, Stanford, 2004. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [77] C. Martin, L. Benoit, Y. Sommerer, F. Nicoud, and T. Poinso. Les and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal*, page In Press, 2005.
- [78] J. Matyas. Random optimization. *Automation and Remote Control*, 26 :244–251, 1965.
- [79] C. Meneveau and T. Poinso. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame* , 86 :311–332, 1991.
- [80] Z. Michalevich. Evolutionary algorithms for constrained parameter optimization problems. *Evolutionary Computation*, 4(1) :1–32, 1996.
- [81] Z. Michalevich. *Genetic Algorithm + Data Structures = Evolution Programs*. Springer Verlag, Berlin, 1996.
- [82] Mitsuo, Yokokawa, Ken'ichi, Itakura, Atsuya Uno, Ishihara, Yukio, and Kaneda. 16.4-tflops direct numerical simulation of turbulence by a fourier spectral method on the earth simulator. In *Conference on High Performance Networking and Computing*, pages 1–17, Baltimore, Maryland, 2002. IEEE Computer Society Press.
- [83] R. Mohanraj, Y. Neumeir, and B.T. Zinn. Combustor model for simulation of combustion instabilities and their active control. *J. Prop. Power* , 16(3) :485–491, 2000.

- [84] P. Moin. Large eddy simulation of multi-phase turbulent flows in realistic combustors. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 4 :237–240, 2004.
- [85] V. Moureau. Evaluation de codes moteur pour des applications. Technical Report IFP-Etude L169001, Institut Français du Pétrole, 2003.
- [86] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinsot. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.* , 202(2) :710–736, 2005.
- [87] V. Moureau, O. V. Vasilyev, C. Angelberger, and T. Poinsot. Commutation errors in large eddy simulation on moving grid : application to piston engine flows. In *Proc of the Summer Program*, pages 157–168, Stanford, 2004. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- [88] J.A. Nelder and R. Mead. A simplex method for function optimization. *Computer Journal*, 7 :308–313, 1965.
- [89] F. Nicoud. Defining wave amplitude in characteristic boundary conditions. *J. Comput. Phys.* , 149(N°2) :pp 418–422, 1998.
- [90] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion* , 62(3) :183–200, 1999.
- [91] C. Nottin. *Large Eddy Simulation of combustion instabilities*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 2000.
- [92] J. Olinger and A. Sundstrom. Theoretical and practical aspects of some initial boundary value problems in fluid dynamics. *SIAM J. Appl. Math.*, 35 :419–446, 1978.
- [93] S. Pascaud, M. Boileau, B. Cuenot, and T. Poinsot. Large eddy simulation of turbulent spray combustion in aeronautical gas turbines. In *ECCOMAS Thematic Conference on computational combustion*, Lisbon, Portugal, 2005.
- [94] S. Pascaud, M. Boileau, B. Cuenot, and T. Poinsot. Les of turbulent spray combustion in aeronautical gas turbines. In *ECOMAS*, Lisbon, Portugal, 2005.
- [95] C.O. Paschereit. Passive combustion control applied to premixed burners. *AIAA Paper*, 2002.
- [96] C.O. Paschereit and E. Gutmark. Control of thermoacoustic instabilities in a premixed combustor by fuel modulation. In *AIAA Paper 99-0711*, editor, *37th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 1999.
- [97] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *J. Fluid Mech.* , 384 :107 – 132, 1999.
- [98] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.

- [99] N. Peters and B. Rogg. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer Verlag, Heidelberg, 1993.
- [100] H. Pitsch and L. Duchamp de la Geneste. Large eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level-set approach. *Proc of the Comb. Institute*, 29 :2001–2008, 2002.
- [101] T. Poinso, W. Lang, F. Bourienne, S. Candel, and E. Esposito. Suppression of combustion instabilities by active control. *J. Prop. Power* , 5 :14–20, 1989.
- [102] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* , 101(1) :104–129, 1992.
- [103] T. Poinso, A. Trouve, D. Veynante, S. Candel, and E. Esposito. Vortex driven acoustically coupled combustion instabilities. *J. Fluid Mech.* , 177 :265–292, 1987.
- [104] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2001.
- [105] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion-2nd Edition*. R.T. Edwards, 2005.
- [106] W. Polifke, Weiqun G., and K. Doebbeling. Optimization of rate coefficients for simplified reaction mechanisms with genetic algorithms. *Combust. Flame* , 135 :113–119, 1998.
- [107] W. Polifke, C.O. Paschereit, and K. Doebbeling. Constructive and destructive interference of acoustic and entropy waves in premixed combustor with choked exit. *Int. J. of Acoustics and Vibration*, 6(3) :135–146, 2001.
- [108] S.B. Pope. Computations of turbulent combustion : progress and challenges. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 591–612. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [109] S.B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combust. Theory and Modelling* , (1) :41–63, 1997.
- [110] E. A. Powell and B.T Zinn. Theoretical investigation of non-linear three dimensional instabilities in liquid rockets with real nozzles. *Acta Astronautica*, 1 :1051–1073, 1974.
- [111] W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky, and W. Vetterling. *Numerical Recipes in C*.
- [112] A. Putnam and W. Dennis. A study of burner oscillations of the organ-pipe type. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 75 :15–28, 1953.
- [113] L. Rayleigh. The explanation of certain acoustic phenomena. *Nature*, July 18 :319–321, 1878.

- [114] P. Rebuffet. *Aérodynamique expérimentale*. Dunod, Paris, 1950.
- [115] D.E. Rogers and F.E. Marble. A mechanism for high frequency oscillations in ramjet combustors and afterburners. *Jet Propulsion*, 26 :456–462, 1956.
- [116] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinsot, U. Meier, and c. Berat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis, and large eddy simulations. *Combust. Flame*, 141(1) :40–54, 2005.
- [117] M. Rudgyard, D. Lecomber, and T. Schonfeld. Coupl+ : Progress towards an integrated parallel pde solving. In *2th Conference (Int.) on Parallel CFD 2000*, volume Chapter 5, Trondheim, Norway, 2000. Elsevier Science.
- [118] M. Rudgyard, T. Shconfléd, and I. D’Ast. A parallel library for cfd and other grid-based applications. In *HPCN Europe 96*, page 358–364, Brussels, 1996.
- [119] D. H. Rudy and J. C. Strikwerda. Boundary conditions for subsonic compressible navier stokes calculations. *Comput. Fluids*, 9 :327–338, 1981.
- [120] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for incompressible flows*. Scientific computation series. Springer-Verlag, 2000.
- [121] K.C. Schadow and E. Gutmark. Combustion instability related to vortex shedding in dump combustor and their passive control. *Progress in Energy and Combust. Science*, 18 :117–132, 1992.
- [122] J.D. Schaffer. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. In J.J. Greffentette, editor, *Proc. 1st Int. Conf. on Genetic Algorithms*, Pittsburgh, PA, 1985.
- [123] Schlichting. *Boundary layer theory*. McGraw-Hill, New York, 1955.
- [124] P. Schmitt. *Simulation aux grandes échelles de la combustion étagée dans les turbines à gaz et son interaction stabilité-polluants-thermique*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.
- [125] P. Schmitt, T. Poinsot, B. Schuermans, and K. P. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *J. Fluid Mech.*, (submitted), 2005.
- [126] P. Schmitt, B. Schuermans, K. P. Geigle, and T. Poinsot. Effects of radiation, wall heat loss and effusion cooling on flame stabilisation and pollutant prediction in les of gas turbine combustion. In *ECCOMAS thematic conference on computational combustion*, Lisbon, Portugal, 2005.
- [127] T. Schuller. *Mécanismes de Couplage dans les Interactions Acoustique-Combustion*. Thèse docteur ingénieur, Ecole Centrale de Paris, 2003.
- [128] A. Scotti, C. Meneveau, and M. Fatica. Generalized Smagorinski model for anisotropic grids. *Phys. Fluids*, 9(6) :1856–1858, 1997.

- [129] L. Selle. *Simulation aux grandes échelles des couplages acoustique / combustion dans les turbines à gaz*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2004.
- [130] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, P. Kaufman, W. Krebs, and D. Veynante. Large eddy simulation of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 333–344. Center for Turbulence Research, 2002.
- [131] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame* , 137(4) :489–505, 2004.
- [132] L. Selle, F. Nicoud, and T. Poinsot. The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators. *AIAA Journal* , 42(5) :958–964, 2004.
- [133] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weath Rev.*, 91 :99–164, 1963.
- [134] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Jr. Gardiner, V.V. Lissianski, and Z. Qin. Gri-mech 3.0, 2000.
- [135] M.D. Smooke. *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*. Berlin, springer-verlag edition, 1991.
- [136] W.C. Strahle. On combustion generated noise. *J. Fluid Mech.* , 49(2) :399–414, 1971.
- [137] J. C. Strikwerda. Initial boundary value problem for incompletely parabolic systems. *Commun. Pure Appl. Math.*, 30 :797, 1977.
- [138] D.R. Stull and H. Prophet. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Technical Report NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.
- [139] W. Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *Phil. Mag.*, 36(5) :507–531, 1893.
- [140] L. Thobois. *Intérêt et faisabilité de la simulation aux grandes échelles dans les moteurs automobiles*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- [141] K.W. Thompson. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.* , 68 :1–24, 1987.
- [142] A. Trounev and T. Poinsot. The evolution equation for the flame surface density. *J. Fluid Mech.* , 278 :1–31, 1994.
- [143] K. Truffin. *Simulation aux grandes échelles et identification acoustique des turbines à gaz en régime partiellement prémélangé*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.

- [144] B. Varoquie and C. Martin. Large eddy simulation of auto-ignition in gas turbines with sequential combustion. Technical Report CR/CFD/04/19, CERFACS, 2004.
- [145] O. V. Vasilyev, T.S. Lund, and P. Moin. A general class of commutative filters for LES in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 146 :82–104, 1998.
- [146] L. Vervisch, E. Bidaux, K. N. C. Bray, and W. Kollmann. Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches. *Phys. Fluids A*, (7) :2496, 1995.
- [147] R. Vichnevetsky and John B. Bowles. *Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations*. SIAM Studies in Applied Mechanics, Philadelphia, 1982. ISBN 0-89871-181-9.
- [148] C. Westbrook and F. Dryer. Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Tech.*, 27 :31–43, 1981.
- [149] F.M. White. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill, New-York, 1991.
- [150] D. Whitley and S. Rana. Representation, search and genetic algorithms. In *Proceedings of the 14th National Conference on Artificial Intelligence*, 1997.
- [151] F.A. Williams. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.
- [152] K. Xiao, D. Schmidt, and U. Maas. Pdf simulation of turbulent non-premixed CH₄/H₂-air flames using automatically reduced chemical kinetics. In *27th Symposium (Int.) on Combustion*, volume 2, page pp. 1073–1080. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [153] V. Yang and F.E.C Culick. Analysis of low-frequency combustion instabilities in a laboratory ramjet combustor. *Combust. Sci. Tech.*, 45 :1–25, 1986.
- [154] Z. Zabinsky. Stochastic methods for practical global optimization. *Journal of Global Optimization*, 13(4) :433 – 444, 1998.
- [155] Y. Zeng-Guang. The filtered Abel transform and its application in combustion diagnostics. Technical Report NASA CR—2003-212121, National Center for Microgravity Research, 2003.
- [156] B.T. Zinn. Pulse combustion : Recent applications and research issues. In *24th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1297–1305. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1992.