



Simulations numériques d'écoulements réactifs massivement décollés par une approche hybride RANS/LES

Bruno Sainte-Rose

► To cite this version:

Bruno Sainte-Rose. Simulations numériques d'écoulements réactifs massivement décollés par une approche hybride RANS/LES. Autre. Ecole Centrale Paris, 2010. Français. ⟨NNT : 2010ECAP0014⟩. ⟨tel-00635538⟩

HAL Id: tel-00635538

<https://theses.hal.science/tel-00635538v1>

Submitted on 25 Oct 2011

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

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



HAL Authorization

THÈSE

présentée par

Bruno SAINTE-ROSE

pour l'obtention du

GRADE de DOCTEUR

Formation doctorale : Energétique

Laboratoire d'accueil : Département d'Energétique Fondamentale et Appliquée

Simulations numériques d'écoulements réactifs massivement décollés par une approche hybride RANS/LES

Soutenue le 11 juin 2010

Composition du jury :	M.	Vincent	GIOVANGIGLI	Président
	Mme.	Bénédicte	CUENOT	Rapporteur
	MM.	Pierre	SAGAUT	Rapporteur
		Sébastien	CANDEL	Examineur
		Jean-Paul	DUSSAUGE	Examineur
		Nicolas	BERTIER	Encadrant
		Sébastien	DECK	Co-encadrant
		Francis	DUPOIRIEUX	Directeur
	Mme.	Sandrine	PALERM	

« Research is what I'm doing when I don't know what I'm doing » .
Wernher von Braun

Remerciements

Cette thèse, fruit d'un travail de trois ans et demi, a été réalisée dans le Département d'Energétique Fondamentale et Appliquée (DEFA) de l'Onera et co-financée par le Centre Nationale d'Etudes Spatiales (CNES).

Au cours de cette période j'ai eu la chance de côtoyer de nombreuses personnes qui ont su me guider, m'aider et m'encourager et je me dois de les remercier.

Ainsi, mes remerciements s'adressent en premier lieu à Francis Hirsinger et Mohammed Habiballah pour leur accueil dans le département.

Je tiens à remercier chaleureusement Nicolas Bertier et Sébastien Deck pour leur excellent encadrement. Il m'ont fait profiter de leur grande expérience en simulation numérique, particulièrement en énergétique pour Nicolas et en aérodynamique pour Sébastien. Sur un plan personnel, j'ai énormément apprécié leur dynamisme, leur sympathie et leur optimisme à toute épreuve. Nicolas a fait preuve d'une exceptionnelle disponibilité malgré les nombreuses sollicitations dont il est victime ! Sébastien a toujours su me réserver le meilleur accueil dans le bois de Meudon et me donner un coup de « pulse » à l'occasion. Je leur souhaite également beaucoup de bonheur dans leurs nouvelles responsabilités familiales acquises pendant ma thèse (mention double pour Sébastien). Je remercie Francis Dupoirieux qui a dirigé cette thèse et m'a fait partager son large panel de connaissances sur de nombreux sujets d'énergétiques. Des bancs de Centrale au Paris-Versailles, j'ai eu la chance de le connaître et de l'apprécier depuis plusieurs années.

Je remercie également le CNES qui a financé cette thèse et particulièrement Sandrine Palerm qui a suivi l'évolution de mes recherches et participé à mon jury.

Je remercie sincèrement Vincent Giovangigli pour avoir assuré la présidence de mon jury, Bénédicte Cuenot et Pierre Sagaut pour avoir analysé avec minutie mon manuscrit en tant que rapporteurs, et Jean-Paul Dussauge pour avoir participé au jury en tant qu'examinateur. J'adresse un remerciement particulier à Sébastien Candel, d'abord, pour m'avoir initié à la mécanique des fluides, mais également pour m'avoir honoré de sa participation au jury.

Je remercie tout le personnel du DEFA pour m'avoir accueilli dans une atmosphère toujours chaleureuse. Ils m'ont offert un environnement et une ambiance de travail de grande qualité. J'ai une pensée particulière pour Daniel Gaffié, chef de la feuue unité MCTM que je remercie pour son amitié de sportif ! Je salue également Gérard Ordonneau pour l'éclairage qu'il a su m'apporter sur les expériences ATAC mais également en combustion cryotechnique. J'ai une pensée pour mes anciens co-bureaux Adrien Grynagier, Pauline Vervisch, Julien Savre, Vincent Freyssengeas et Yann Moule qui ont dû me supporter pour le meilleur et pour le pire. Une mention particulière pour Julien pour notre mutuel soutien au cours de la rédaction et les grands moments passés de Bruxelles à Vienne en passant par Hartford. Je remercie également François Chedevergne qui m'a fait partagé sa connaissance de la turbulence et Pascale Gilbank pour avoir supporter mes craquages audio-visuels. Je remercie également Philippe Grenard et Dominique Scherrer pour m'avoir souvent aidé au cours de mes développements. Un grand merci également à Angelo Murrone, Lionel Tessé, Paul Kuentzmann, Aurélie Nicole, Philippe Novelli, Guy Lauriot, Thierry Courvoisier et Emmanuel Montreuil. Je tiens enfin à remercier Danielle Noël qui a assuré la reproduction de ce manuscrit.

Mais l'Onera est riche d'autres départements. Je tiens donc à remercier Bernard Courbet et Denis Dutoya

pour m'avoir initié aux joies du codage dans CEDRE ainsi qu'à François Vuillot, Anthoine Biancherin, Philippe Chevalier, Marc Errera du DSNA et Guillaume Turpin de la société de calculs Andheo. Je tiens à remercier également Frédéric Grisch du DMPH pour son aide dans l'exploitation des résultats d'ATAC ainsi que Philippe Reijasse du DAFE dans le cadre du programme ATAC.

J'adresse aussi mes remerciements aux personnes que j'ai eu l'occasion de côtoyer dans le cadre de l'association des doctorants EChO et qui ont su contribuer à la réussite de nos actions à savoir Florin Paun de DCV, Nicole Landré, Isabelle Sellenave, Cynthia Lang, Marion Verny, Edouard Moulins, Philippe Pla de la Dircom, Joëlle Dumas et Nathalie Guillochon de la DRH.

Un grand merci à mes amis doctorants et docteurs Grégory Delattre, Mathieu Hautier, Jean-Michel Roche, Guillaume Depommier, Benoît Fayard, Thomas Vandellos, Josselyn Touzeau, Jean-Baptiste Dargaud pour les "EChOman" ainsi que Luc-Henry Dorey, Florian Guillou, Magali Dupuy, Line Denat, Mathieu Ourliac, Bertrand Noël, Sébastien Reichstadt, Aurélien Vattré, Lionel Marcin, Pierre-Elie Weiss, Fabien Gand, Mathieu Pamiès, Jacques Riou, Antoine Dumont.

Enfin, le plus gros remerciement revient aux membres de ma famille qui m'ont toujours soutenu : je pense à ma mère Danielle et mon père Charles pour la force que je retire de leur amour, à ma grand-mère Irène, qui a toujours été à mes côtés depuis mon départ de Martinique. Mes pensées vont aussi à ma grand-mère Anna. Je remercie également mon oncle Claude et mon cousin Sacha pour leur soutien à distance. Une dernière pensée au Capitaine George Chalonec, pour son amitié, sa confiance et son courage. Je vous aime.

Table des matières

Introduction	xv
I Modèles physiques et numériques	1
1 Modèles physiques de base	3
1.1 Les équations de Navier-Stokes pour l'aérothermochimie	4
1.1.1 Equations de conservation	4
1.1.2 Loi d'état et relations de comportement	5
1.2 La turbulence et sa modélisation	7
1.2.1 Un problème multi - échelle	7
1.2.2 Equations filtrées	10
1.2.3 Fermeture des équations	11
1.2.4 Modélisation de la viscosité turbulente	12
2 La combustion turbulente et sa modélisation	13
2.1 La combustion laminaire	14
2.1.1 Généralités	14
2.1.2 La combustion laminaire prémélangée	15
2.1.3 La flamme laminaire de diffusion	17
2.2 Phénoménologie des interactions flamme/turbulence	19
2.2.1 Flammes turbulentes prémélangées	19
2.2.2 Flammes turbulentes non prémélangées	21
2.3 Diagrammes pour la combustion turbulente numérique	23
2.3.1 Généralités	23
2.3.2 Mise en application en RANS ou en LES	24
2.4 Modélisation de la combustion turbulente	26
2.4.1 Cinétique chimique	26
2.4.2 Modèle de flamme épaissie pour la LES	26
3 Une approche hybride RANS/LES : la DDES	31
3.1 La couche limite en simulation numérique	32
3.1.1 Approche stationnaire de la couche limite	32
3.1.2 Phénoménologie instationnaire de la couche limite	34
3.1.3 Prise en compte de la turbulence pariétale en simulation numérique	34
3.2 Présentation de la DDES	35
3.2.1 Justification théorique	35
3.2.2 De la DES97 à la DDES	36
3.2.3 Autres approches instationnaires prenant en compte la turbulence pariétale	38
3.2.4 Classification des modèles	40
3.3 Implantation d'une approche DDES dans le code CEDRE	40
3.3.1 Rappels sur le modèle RANS $k - \omega$ SST	40
3.3.2 Utilisation du modèle $k - \omega$ SST pour la DES	42

3.3.3	Validation sur des couches limites attachées	43
3.4	Champ d'application d'approches hybrides RANS/LES en écoulements réactifs	46
3.4.1	Ecoulements décollés en aval de couches limites attachées	46
3.4.2	Prise en compte des transferts thermiques d'origine convective	48
4	Présentation des méthodes numériques du code CEDRE	49
4.1	Principes de base des méthodes	50
4.1.1	Introduction d'un formalisme compact	50
4.1.2	Formulation volumes finis	51
4.2	Discretisation spatiale	51
4.3	Intégration temporelle	52
4.3.1	Formalisme utilisé et type d'approche suivi	52
4.3.2	Méthodes explicites	52
4.3.3	θ schéma	53
4.3.4	Schéma de Gear	54
II	Flamme de prémélange derrière une marche descendante	57
5	Présentation des simulations numériques de la chambre A3C	59
5.1	La chambre de combustion A3C du LAERTE	60
5.1.1	Description du banc	60
5.1.2	Le foyer A3C : un bon candidat pour valider la DDES en réactif	60
5.1.3	Conditions d'essai	61
5.1.4	Diagnostics disponibles	61
5.2	Domaine de calcul et maillages	62
5.2.1	Domaine de calcul	62
5.2.2	Maillage	63
5.3	Stratégie du calcul	64
5.3.1	Conditions aux limites	64
5.3.2	Paramètres thermodynamiques	65
5.3.3	Position des points de mesure et capteurs numériques	66
6	Simulation de l'écoulement inerte dans la chambre A3C	67
6.1	Présentation des calculs et première validation	68
6.1.1	Calculs réalisés	68
6.1.2	Choix du pas de temps	68
6.1.3	Comportement de la DDES	69
6.2	Analyse des champs moyens	71
6.2.1	Etude de la recirculation moyenne, comparaison avec les mesures	71
6.2.2	Comparaison des profils avec ceux de LDV	72
6.2.3	Analyse de la couche de mélange et de la zone décollée	76
6.3	Etude de la dynamique du décollement	79
6.3.1	Dynamique de la couche de mélange	79
6.3.2	Analyse spectrale de l'écoulement décollé	82
7	Simulation de l'écoulement réactif prémélangé pauvre dans la chambre A3C	85
7.1	Présentation des calculs et premières validations	86
7.1.1	Calculs réalisés	86
7.1.2	Choix du pas de temps	86
7.1.3	Validation de l'approche Dynamic Thickened Flame	87
7.1.4	Validation de la DDES	88
7.2	Analyse de l'écoulement moyen	89
7.2.1	Evolution de la température moyenne et fluctuante dans la chambre	89

7.2.2	Etude des champs de vitesses moyennes	92
7.2.3	Positionnement des calculs sur des diagrammes de combustion turbulente	98
7.3	Dynamique de l'écoulement réactif en aval de la marche	100
7.3.1	Comparaison des approches	100
7.3.2	Analyse spectrale	102
III	Ecoulement réactif surdétendu dans une tuyère	107
8	Article : Numerical simulations and physical analysis of an overexpanded reactive flow	109
8.1	Introduction	111
8.1.1	Context	111
8.1.2	State-of-the art	112
8.1.3	Outline of the paper	113
8.2	Experimental set-up	113
8.3	Numerical methods	115
8.3.1	Turbulence modelling	116
8.3.2	Chemistry model	117
8.3.3	Numerical schemes	118
8.4	Numerical test case	119
8.4.1	Meshing strategy	119
8.4.2	Conditions of the computations	120
8.5	Results and discussion	121
8.5.1	Description of the flow	121
8.5.2	Analysis of the time-averaged aerodynamic flowfield and wall pressure	122
8.5.3	Analysis of the time averaged thermochemical flowfields	125
8.6	Analysis of the flow oscillations	126
8.6.1	Spectral analysis	126
8.6.2	Dynamics of the separated region	130
8.6.3	Analysis of the propagating disturbances	132
8.7	Analysis of the unsteady reacting region	134
8.7.1	Comparison with flowfield visualizations	134
8.7.2	Discussion on the combustion regime	134
8.7.3	Dynamics of the reacting region	135
8.8	Conclusions	137
8.9	Additional considerations	138
8.9.1	Experimental mock-up	138
8.9.2	Numerical tools	138
8.9.3	Additional averaged quantities in the flow field	140
8.9.4	Wall transfers	142
8.9.5	Additional signal processing	144
	Conclusions et perspectives	147
A	Approximations et conventions pour la comparaison entre calculs LES (ou DDES) et mesures	153
A.1	Approximations lors de la comparaison entre calculs et mesures	153
A.2	Conventions utilisées dans cette étude	153
B	Simulations RANS de la tuyère S8Ch	155
B.1	Présentation du cas test physique et numérique	155
B.1.1	La tuyère S8Ch de l'Onera	155
B.1.2	Domaine de calcul et maillage	156

B.1.3	Conditions du calcul	156
B.2	Résultats des calculs RANS	158
B.2.1	Configuration à deux cols	158
B.3	Comparaison des profils de couche limite	158
C	Validation du schéma de Gear sur un tourbillon 2D	161
D	Compléments sur le cas A3C	163
D.1	Coût des calculs instationnaires	163
D.2	Compléments sur le modèle de combustion turbulente	163
D.2.1	Prise en compte de l'interaction chimie-turbulence	163
D.2.2	Paramètres du modèle DTF	164
D.3	Comparaison avec les mesures de la campagne MICAEDI	166
D.3.1	Comparaisons aux mesures PLIF, PIV et microphone	166
D.3.2	Comparaison aux visualisations instantanées de chimie-luminescence OH	168
E	Etude préliminaire en 2D sur la tuyère ATAC	169
E.1	Présentation des maillages et conditions des calculs	169
E.1.1	Domaines de calcul et maillages	169
E.1.2	Conditions aux limites	169
E.1.3	Calculs réalisés	171
E.2	Résultats et discussion	172
E.2.1	Influence de la résolution de la couche limite (calculs CL)	172
E.2.2	Influence de la température pariétale (calculs TP)	173
E.2.3	Influence de l'obstacle sur la dynamique de l'écoulement et sur les champs moyens (calculs O)	174
	Références	175

Nomenclature

Principaux acronymes

A3C	Action Concertée pour les Chambres de Combustion
ATAC	Aérodynamique des Tuyères et Arrières-Corps
CARS	Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy
CEDRE	Calculs d'Ecoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique
CFD	Computational Fluid Dynamics
(D/S/Z)DES	(Delayed/Stimulated/Zonal) Detached Eddy Simulation
DNS	Direct Numerical Simulation
DTF	Dynamic Thickened Flame
ITNFS	Intermittent Turbulent Net Flame Stretch
LDV	Laser Doppler Velocimetry
LES	Large Eddy Simulation
MUSCL	Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws
PDF	Probability Density Function
PIV	Particle Image Velocimetry
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RHS	Right Hand Side
RK	Runge-Kutta
RMS	Root Mean Square
SAS	Scale Adaptive Simulation
SGS	Sub-Grid Scale
SPL	Sound Pressure Level
SST	Shear Stress Transport
TFLES	Thickened Flame for LES
THI	Turbulence Homogène Isotrope

Nombres sans dimension

CFL	Nombre de Courant-Friedrich-Lewy
Da	Nombre de Damkhöler
Ka	Nombre de Karlovitz
M	Nombre de Mach
Pr	Nombre de Prandtl
Sc	Nombre de Schmidt
Re	Nombre de Reynolds

Symboles latins

A, b, E_a	Paramètres de la loi d'Arrhenius
c	Vitesse du son
$c_{p,i}, c_p$	Capacité calorifique massique à pression constante de l'espèce i et de mélange
C_S	Constante du modèle de Smagorinsky
C_μ	Constante du modèle $k - \epsilon$
D_h	Diamètre équivalent
D_i	Coefficient de diffusion de l'espèce i
e, e_t	Energie interne et totale
$f_{DDES}, F_{1/2}$	Fonctions des modèles SST et DDES
F, E	Facteur d'épaississement et d'efficacité (modèle TFLES)
G	Densité spectrale de puissance
G_Δ	Noyau du filtre LES
h	Hauteur de marche
h_i, h	Enthalpie de l'espèce et de mélange
$h_{f,i}^0$	Enthalpie de formation de l'espèce i
$\mathbf{I}$	Matrice identité
$\mathbf{J}$	Matrice jacobienne
$\mathbf{J}_i$	Flux de diffusion de masse de l'espèce i
$\mathbf{J}_t, \mathbf{J}_{et}$	Flux de diffusion thermique total, flux de diffusion d'énergie totale
k	Energie cinétique de la turbulence
$k_{fj}/k_{bj}, k_{eq}$	Vitesse de réaction directe/inverse de la réaction j et constante d'équilibre
$l_t, \mathcal{L}$	Echelle intégrale de la turbulence
$\mathcal{M}_i, \mathcal{M}$	Masse molaire de l'espèce i et de mélange
$\mathbf{n}$	Vecteur normal unitaire
N_e, N_r	Nombre d'espèces, de réactions et d'atomes
p, p_a	Pression et pression atmosphérique
$\mathbf{q}$	Flux de chaleur
$\mathbf{Q}$	Vecteur des quantités conservatives
$\mathcal{Q}$	Critère Q
R	Constante des gaz parfaits
r_i	Constante spécifique des gaz parfaits
$\mathbf{S}$	Partie symétrique du tenseur de gradients de vitesse
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire non étirée
S_t	Vitesse de flamme turbulente
T	Température
$\mathbf{u}$	Vecteur vitesse
u'_l	Fluctuation de vitesse à l'échelle l
$\mathbf{U}$	Vecteur des quantités primitives
$\mathcal{U}_i$	Vitesse de diffusion moléculaire de l'espèce i
$\mathcal{U}$	Vitesse caractéristique
U_e, U_0, U_∞	Vitesse de référence
$\mathbf{\Omega}$	Partie antisymétrique du tenseur de gradients de vitesse
X_i	Fraction molaire de l'espèce i
Y_i	Fraction massique de l'espèce i
z	Fraction de mélange

Symboles Grecs

δ_L^0	Epaisseur de flamme laminaire non étirée
δ_ω	Epaisseur de vorticit�
Δ	Taille du filtre LES (assimil�e ici � la taille de maille Δx)
Δt	Pas de temps
$\Delta S_j^0, \Delta H_j^0$	Variation d'entropie et d'enthalpie due � la r�action j
χ	Taux de dissipation scalaire
ϵ	Taux de dissipation de la turbulence
η_K	Echelle de Kolmogorov
γ	Coefficient isentropique
Γ	Fonction ITNFS
κ	Constante de von Karman
λ_i, λ	Conductivit� thermique de l'esp�ce i et de m�lange
μ_i, μ	Viscosit� dynamique de l'esp�ce i et de m�lange
ν	Viscosit� cin�matique
ν_i'/ν_i''	Coefficients stoechiom�triques direct/inverse de l'esp�ce i
φ	Richesse
ρ	Masse volumique
τ	Tenseur des contraintes visqueuses
τ_c	Temps caract�ristique chimique
$\tau_t, \tau_l, \tau_\eta$	Temps caract�ristique de la turbulence
θ	Epaisseur de quantit� de mouvement
ω	Pseudo-dissipation turbulente
$\dot{\omega}_i$	Taux de r�action chimique de l'esp�ce i
$\dot{\omega}_T$	Taux de d�gagement de chaleur
Ω	Composante antisym�trique du tenseur de vitesse
Ξ	Facteur de plissement

Indices et exposants

$+$	(en exposant) Variables de paroi
0	(en indice ou en exposant) Grandeurs li�es � une r�f�rence
i	Indice des esp�ces et des directions dans l'espace
j	Autres indices
x, y, z	Indice des directions de l'espace
c	Grandeurs relatives � la variable d'avancement
F, O	Fuel/Oxydant
RMS	Fluctuations RMS (Root Mean Square)
st	Grandeurs prises � la st�ochiometrie
t	(en indice) Grandeurs turbulentes
t	(en exposant) Flux turbulents
u, b	Grandeurs prises dans les gaz frais/br�l�s

Autres notations

Φ, Ψ	Grandeurs scalaires quelconques
Φ, Ψ	Tenseurs quelconques
$\bar{\cdot}$	Opérateur de moyenne ou de filtrage
$\sim$	Opérateur de moyenne ou de filtrage de Favre
$'$	Fluctuations
$''$	Fluctuations au sens de Favre
$\langle \cdot \rangle$	Moyenne d'ensemble

Introduction

Contexte de l'étude

Pour la majorité des foyers utilisés dans le secteur de la propulsion aéronautique et spatiale, la combustion a lieu au sein de zones massivement décollées, loin des parois. Au sein de ces décollements, des zones de recirculation et de fort cisaillement (pouvant être créées par des swirls dans certains cas), permettent d'accrocher ou de stabiliser la flamme. Elles accélèrent également, grâce à la turbulence, le mélange des réactifs pour la combustion non-prémélangée et la chauffe des gaz frais par les gaz brûlés pour la combustion prémélangée.

Avec l'augmentation de la puissance de calcul disponible sur le marché (www.top500.org), la simulation numérique vient de plus en plus en appui aux essais afin de réduire les délais de conception des dispositifs propulsifs. Dans ces systèmes, les écoulements rencontrés sont réactifs, turbulents, et les mécanismes physiques mis en jeu couvrent une très large gamme d'échelles spatio-temporelles. Par conséquent, en simulation numérique, différentes approches ont été développées selon le degré visé de résolution de la physique de l'écoulement.

Lorsque les motoristes cherchent à évaluer des effets globaux liés à la géométrie des foyers et des dispositifs d'alimentation ou à estimer l'influence des points de fonctionnement, la simulation numérique de l'écoulement réactif par la résolution des équations de Navier Stokes moyennées au sens de Reynolds (RANS pour Reynolds Averaged Navier Stokes) est la plupart du temps retenue [62, 89]. De tels calculs nécessitent des maillages relativement grossiers, excepté dans les couches limites où il est nécessaire de mailler plus finement dans la direction perpendiculaire à la paroi. En outre, selon les configurations, il est possible de tirer profit d'éventuelles propriétés de symétrie du problème, ce qui permet d'employer des maillages 2D. Enfin, l'obtention de la solution stationnaire asymptotique convergée nécessite un nombre réduit d'itérations par rapport aux calculs instationnaires. Cependant, ce type de méthode ne donne accès qu'à des grandeurs moyennes qui ne permettent pas de capter toute la physique de l'écoulement par nature instationnaire. De plus, les modèles RANS mettent en jeu des constantes qui sont ajustées suivant le type d'écoulement et qui nuisent à la généralité de la méthode. Ainsi, lorsqu'une analyse plus poussée de la physique de l'écoulement est requise ou lorsque l'on cherche à restituer la dynamique des flammes (étude de l'accrochage, du mélange, des instabilités de combustion), la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) s'avère très performante, y compris pour les écoulements réactifs (Poinsot et Veynante [150]). En effet, la LES permet de résoudre en temps et en espace la dynamique des structures turbulentes dont l'échelle est supérieure à la taille d'un filtre (le plus souvent proportionnel à l'échelle de la maille) tout en modélisant l'action – supposée universelle – des échelles de sous-maille sur les échelles résolues. Ainsi, dans les zones décollées où l'écoulement est piloté par des structures turbulentes à grandes échelles, la taille du maillage nécessaire à la LES reste abordable et son utilisation pour des configurations industrielles (illustrée figure 1) devient possible.

Lorsque l'on cherche à simuler la dynamique pariétale d'un écoulement, la LES demeure cependant trop coûteuse. En effet, les structures turbulentes présentes près des parois sont très fines et ont une forme allongée dans le sens de l'écoulement. Résoudre de telles structures par la LES nécessiterait donc un effort de maillage conséquent, voire prohibitif à Reynolds élevés. Comme le suggèrent Pope [154] ou Sagaut [166] le surcoût lié à la résolution de la turbulence pariétale en LES est son principal défaut. Dans de nombreuses configurations, comme celle présentée figure 1, il n'est pas nécessaire de prendre



FIGURE 1 – Exemple de simulation LES d’une véritable chambre de combustion d’hélicoptère SAFRAN-Turbomeca, réalisée par Boileau et al. [11]

en compte cette zone de l’écoulement, les phénomènes moteurs de l’écoulement ayant lieu loin des parois. Les maillages utilisés dans ces conditions ne permettent en général pas de résoudre la turbulence pariétale.

Néanmoins, il existe un certain nombre d’écoulements réactifs où il est pertinent de chercher à mieux estimer la turbulence près des parois. Par exemple, si l’écoulement présente des couches limites attachées en amont d’une zone décollée (comme l’illustre la figure 2 où le décollement est imposé par la géométrie), on cherchera à mieux évaluer le profil de vitesses au niveau du décollement et ainsi améliorer la résolution de la couche de mélange naissante. Par ailleurs, si l’on cherche à prendre en compte les transferts de chaleur au niveau des parois (notamment pour simuler une température correcte dans un foyer et ainsi mieux prévoir l’apparition de certains polluants), une LES limitée aux zones décollées devient insuffisante (Schmitt *et al.* [178]). Enfin, certains écoulements réactifs présentent des régions décollées provoquées par l’action de gradients de pression adverses sur la couche limite. Cette configuration est rencontrée dans les superstatoréacteurs [31] ou les tuyères de moteurs fusée fonctionnant en régime de surdétente [82]. Dans ces conditions, une bonne modélisation du comportement des couches limites attachées face à des gradients de pression adverses (notamment au niveau de la couche externe) est cruciale.

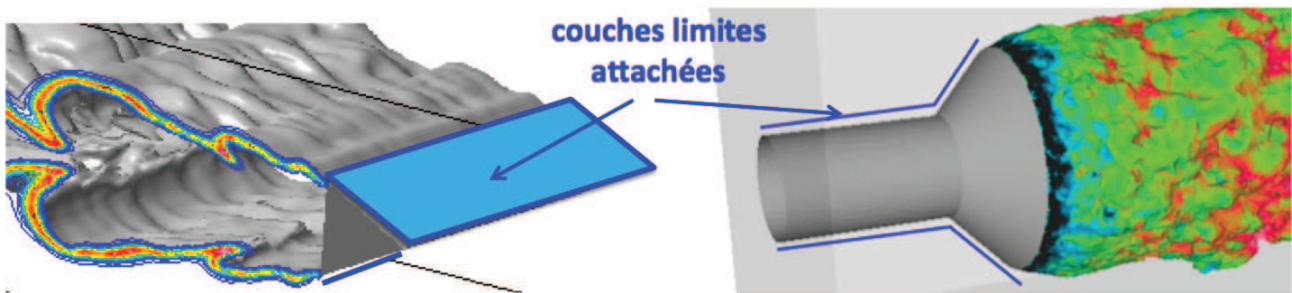


FIGURE 2 – (gauche) Flamme turbulente en aval d’un accroche flamme prismatique (Volvo), extrait de Fureby [67], (droite) flamme turbulente en aval d’un barreau cylindrique avec embout conique extrait de la thèse de Savre [175]

Pour améliorer ce comportement de la LES près des parois, deux axes de recherche ont été suivis : l’amélioration des modèles de sous-maille, comme l’approche Wall Adapted Local Eddy-viscosity (WALE) [129] souvent utilisée en combustion, et le développement de modèles proche paroi pour la LES (Wall-law Models for LES – WMLES – en anglais) dont le passage en revue est fait par Piomelli [140]. Parmi les approches citées par Piomelli, les méthodes hybrides RANS/LES sont des solutions de bon « rapport qualité/coût » : elles consistent à traiter les couches limites attachées et les transferts pariétaux par une approche RANS qui bénéficie de modèles bas-Reynolds performants et à traiter le reste de l’écoulement en LES. Ce type d’approche, dont la plus connue est la Detached Eddy Simulation (DES) (Spalart [188]), bénéficie d’une dizaine d’années de développement et est actuellement mature pour de

nombreuses applications en aérodynamique sur des configurations complexes. De plus, contrairement aux autres approches WMLES, le modèle RANS permet de restituer le comportement de la couche limite face à des gradients de pression adverses comme c'est le cas dans une interaction onde de choc-couche limite par exemple. Néanmoins, pour des écoulements réactifs, l'approche a rarement été utilisée. L'objectif suivi au cours de cette thèse est donc d'évaluer une approche hybride RANS/LES, la Delayed Detached Eddy Simulation (DDES), appliquée à deux cas d'écoulements réactifs massivement décollés. Pour ce faire, la démarche employée est la suivante : dans un premier temps, la DDES est implantée dans le code d'énergétique CEDRE¹ de l'Onera. Cette approche est ensuite appliquée à l'étude d'un cas géométriquement simple de marche descendante pour un régime de combustion prémélangé pauvre à faible Mach. Enfin, un cas de tuyère supersonique surdétendue en milieu réactif fait l'objet d'une simulation numérique lourde par cette approche et les résultats obtenus sont analysés.

Plan détaillé du mémoire

Ce mémoire s'articule autour de trois parties :

- Dans la première partie, les modèles physiques de base utilisés pour traiter les écoulements turbulents sont d'abord présentés (chapitre 1). Puis, la phénoménologie de la combustion et de l'interaction entre la combustion et la turbulence est décrite succinctement. Les modèles utilisés dans ce travail sont également décrits (chapitre 2). Au chapitre 3, les fondements théoriques ainsi que les principes généraux des approches hybrides RANS/LES, en particulier de la DES, sont exposés. L'accent est mis sur l'implantation et la validation dans le code CEDRE de la DDES, qui constitue l'une des approches hybrides RANS/LES les plus récentes. En fin de chapitre, une étude bibliographique de cas d'écoulements réactifs où l'utilisation de la DDES peut s'avérer pertinente est également proposée. Enfin, au chapitre 4, les méthodes numériques employées dans le code CEDRE sont brièvement présentées, la méthode d'intégration temporelle de Gear implantée dans le cadre de la thèse y étant un peu plus détaillée.
- La seconde partie porte sur le premier cas d'application de la DDES à savoir l'écoulement massivement décollé en aval de la marche A3C de l'Onera, sur laquelle de nombreuses mesures ont été réalisées en inerte et en réactif. La géométrie ainsi que les conditions de calcul sont d'abord présentées (chapitre 5). Puis, au chapitre 6, les résultats obtenus avec les trois modèles (RANS, LES, DDES) utilisés pour la simulation de l'écoulement inerte sont confrontés à la base de données expérimentales. L'influence de la résolution du maillage, du mode de protection de la couche limite et de l'intégration temporelle sont mises en avant dans un contexte de validation de la DDES. Enfin, au chapitre 7, les trois approches sont appliquées à la simulation d'écoulement réactif méthane-air prémélangé et confrontées aux mesures. L'influence de la caractérisation acoustique de la section de sortie est mise en évidence pour les calculs DDES.
- Dans la troisième partie du mémoire, la simulation numérique d'un écoulement réactif surdétendu dans une tuyère en aval d'un moteur fusée est réalisée. Cette partie, rédigée en anglais, constitue la version longue d'un article soumis dans un journal à comité de lecture. La tuyère plane ATAC du banc MASCOTTE, étudiée à l'Onera, est d'abord décrite et replacée dans le contexte de l'étude des charges latérales et thermiques des tuyères de lanceur. Des simulations numériques DDES et RANS sont réalisées et permettent de quantifier l'apport de la DDES sur ce cas particulièrement instationnaire. La dynamique de l'écoulement est ensuite analysée par des méthodes avancées de traitement du signal. Une caractérisation de la zone réactive est enfin proposée.

1. Calculs d'Écoulements (Diphasiques) Réactifs pour l'Energétique

Première partie

Modèles physiques et numériques

Chapitre 1

Modèles physiques de base

Table des matières

1.1	Les équations de Navier-Stokes pour l'aérothermochimie	4
1.1.1	Equations de conservation	4
	Conservation de la masse totale	4
	Conservation des espèces	4
	Equation de la quantité de mouvement	5
1.1.2	Loi d'état et relations de comportement	5
	Loi d'état des gaz parfaits	5
	Propriétés physiques	6
1.2	La turbulence et sa modélisation	7
1.2.1	Un problème multi - échelle	7
	La théorie de Kolmogorov	7
	Approche DNS	8
	Approche RANS	9
	Approche LES	10
1.2.2	Equations filtrées	10
1.2.3	Fermeture des équations	11
1.2.4	Modélisation de la viscosité turbulente	12

Dans ce premier chapitre, les équations de Navier-Stokes pour l'aérothermochimie sont d'abord rappelées. Les trois grandes familles d'approches utilisées en CFD pour prendre en compte les écoulements turbulents (DNS, LES et RANS) sont également présentées ainsi que les équations filtrées résolues par le code CEDRE. Les modèles de base utilisés dans cette étude pour la fermeture de ces équations sont enfin décrits.

In this first chapter, the Navier-Stokes equations for aerothermochemistry are recalled. The three main family of approaches used in CFD to tackle the simulation of turbulent flows (DNS, LES, RANS) are also presented along with the filtered equations solved by the CEDRE code. The basic closure models used in this study are finally described.

1.1 Les équations de Navier-Stokes pour l'aérothermochimie

On se place dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Tout volume élémentaire de fluide peut alors être caractérisé par des grandeurs thermodynamiques macroscopiques comme la pression, la température, la masse volumique. Le comportement du mélange gazeux réactif est alors régi par les équations de Navier-Stokes qui sont dérivés des principes de conservation de la masse totale, des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

1.1.1 Equations de conservation

Conservation de la masse totale

Le principe de conservation de la masse permet d'écrire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1.1)$$

où ρ désigne la masse volumique du fluide et $\mathbf{u}$ le vecteur vitesse.

Conservation des espèces

Les écoulements considérés sont multi-espèces et réactifs. Ainsi pour un gaz constitué de N_e espèces, on peut écrire N_e équations de transports d'espèces dont la somme permet de retrouver l'équation de conservation de la masse totale 1.1 :

$$\rho \frac{DY_i}{Dt} = \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot (\mathbf{J}_i) + \rho \dot{\omega}_i, \quad (1.2)$$

où Y_i et $\dot{\omega}_i$ correspondent respectivement à la fraction massique et au taux de production / destruction de l'espèce i . On note $\mathbf{J}_i$ le flux de diffusion massique de l'espèce i dans le mélange, qui peut s'exprimer comme :

$$\mathbf{J}_i = \rho \mathbf{U}_i Y_i, \quad (1.3)$$

où $\mathbf{U}_i$ est la vitesse de diffusion de l'espèce i .

Equation de la quantité de mouvement

D'après la loi de Newton, la quantité de mouvement d'un système varie suivant les forces qui lui sont appliquées :

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) + \mathbf{S}_{qdm}, \quad (1.4)$$

où p est la pression, $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses et $\mathbf{S}_{qdm}$ le terme source correspondant aux forces volumiques (gravité, forces électromagnétiques ...). Ce terme source peut s'écrire :

$$\mathbf{S}_{qdm} = \rho \sum_{i=1}^{N_e} Y_i \mathbf{f}_i, \quad (1.5)$$

avec $\mathbf{f}_i$ correspondant aux forces volumiques appliquées à l'espèce i . Dans le cadre de notre étude ces forces de volume seront cependant négligées.

Equation de l'énergie totale

On définit l'énergie interne du mélange comme :

$$e = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i h_i^0 - \frac{RT_0}{\mathcal{M}} + \underbrace{\int_{T_0}^T c_v dT}_{e_s}. \quad (1.6)$$

On remarque que, par convention dans le code CEDRE, le terme $-RT_0/\mathcal{M}$ est regroupée avec la partie chimique de l'énergie.

La conservation de l'énergie totale ($e_t = e + \frac{1}{2}\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$) s'écrit alors sous la forme :

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{u}) = \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) \mathbf{u}] - \nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t} + \mathbf{S}_{e_t}, \quad (1.7)$$

où $\mathbf{J}_{e_t}$ le flux d'énergie totale s'exprime comme :

$$\mathbf{J}_{e_t} = \sum_{i=1}^{N_e} h_i \mathbf{J}_i + \mathbf{q}, \quad (1.8)$$

et le terme source d'énergie :

$$\mathbf{S}_{e_t} = \mathbf{S}_{h_t} = \mathbf{S}_{qdm} \cdot (\mathbf{u} + \mathbf{u}_i) + S_{rad} + \dots, \quad (1.9)$$

les forces de volume étant négligées, leur travail l'est également. Le terme source de rayonnement S_{rad} qui peut s'avérer crucial dans certaines applications, sera également négligé dans le cadre de ce travail.

1.1.2 Loi d'état et relations de comportement

Loi d'état des gaz parfaits

Pour un gaz parfait, la masse volumique est liée aux grandeurs primitives p et T par la relation suivante :

$$\rho = \frac{p\mathcal{M}}{RT}, \quad (1.10)$$

où $\mathcal{M}$ est la masse molaire du mélange :

$$\mathcal{M} = \sum_{i=1}^{N_e} X_i \mathcal{M}_i, \quad (1.11)$$

avec X_i la fraction molaire de l'espèce i et $\mathcal{M}_i$ sa masse molaire. La relation entre X_i et la fraction massique Y_i est la suivante :

$$Y_i = \frac{X_i \mathcal{M}_i}{\mathcal{M}}. \quad (1.12)$$

Propriétés physiques

On considère que les fluides étudiés ont un **comportement Newtonien** ce qui permet de relier linéairement le tenseur des contraintes visqueuses au gradient de vitesse $\nabla \mathbf{u}$:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] + \eta \nabla \cdot (\mathbf{u}), \quad (1.13)$$

où μ est la viscosité dynamique reliée à la viscosité cinématique ν par la relation $\mu = \rho\nu$. Le second coefficient de viscosité η est obtenu par **la relation de Stokes** :

$$\eta = -\frac{2}{3}\mu. \quad (1.14)$$

Dans le cadre de notre étude, les viscosités d'espèces sont calculées selon **une loi de Sutherland** :

$$\mu_i(T) = \mu_i^0 \frac{T_i^0 + T_i^1}{T + T_i^1} \left(\frac{T}{T_i^0} \right)^{1,5}, \quad (1.15)$$

T_i^0 , T_i^1 et μ_i^0 sont les coefficients de la loi, sachant que μ_i^0 représente la viscosité de l'espèce i à la température T_i^0 . La viscosité de mélange est ensuite obtenue suivant :

$$\mu = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i \mu_i. \quad (1.16)$$

Les flux de diffusion thermique et moléculaire sont respectivement donnés par les **lois de Fourier et de Fick** :

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad \text{et} \quad \mathbf{J}_i = -\rho D_i \nabla Y_i. \quad (1.17)$$

La conductivité thermique de mélange λ est évaluée à partir de la conductivité thermique de chaque espèce via une moyenne arithmétique, pondérée par la viscosité :

$$\lambda = \mu \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\lambda_i}{\mu_i} Y_i. \quad (1.18)$$

Les conductivités thermiques des espèces, λ_i , sont évaluées en considérant des nombres de Prandtl constants : $\lambda_i = \mu_i c_{p,i} / Pr_i$. De la même manière, les coefficients de diffusion moléculaire d'espèces sont exprimés à partir de nombres de Schmidt constants : $D_i = \nu / Sc_i$. Le principe de conservation de la masse impose une contrainte supplémentaire sur les flux de diffusion moléculaire :

$$\sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{J}_i = 0. \quad (1.19)$$

Sachant que cette condition peut ne pas être respectée lors de l'utilisation de nombres de Schmidt différents pour chaque espèce, on ne résout en réalité que $N_e - 1$ équations sur les espèces. La masse totale est ensuite conservée en fixant la masse de la dernière espèce (souvent N_2) suivant :

$$Y_{N_e} = 1 - \sum_{i=1}^{N_e-1} Y_i. \quad (1.20)$$

La capacité calorifique à pression constante de chaque espèce est évaluée à partir de polynômes de degré 7 :

$$c_{p,i} = \sum_{k=0}^7 a_{i,k} \left(\frac{T}{1000} \right)^k. \quad (1.21)$$

1.2 La turbulence et sa modélisation

L'objectif de cette section est d'introduire les trois familles d'approche utilisées pour aborder la simulation numérique de la turbulence.

1.2.1 Un problème multi - échelle

La coexistence de structures turbulentes d'échelles variées au sein d'un écoulement turbulent est illustrée figure 1.1 représentant une couche de mélange étudiée par Brown et Roshko [16]. Ces échelles sont comprises entre l'échelle intégrale $\mathcal{L}$ (taille des plus grosses structures de l'écoulement où l'énergie turbulente est produite, liée à la géométrie du problème) et l'échelle de Kolmogorov η_K (taille de tourbillons où l'énergie turbulente est dissipée par effets visqueux). L'objet de ce mémoire n'étant pas de faire une description exhaustive de la turbulence, le lecteur est invité à consulter les références [154, 6, 112] pour une analyse plus approfondie.

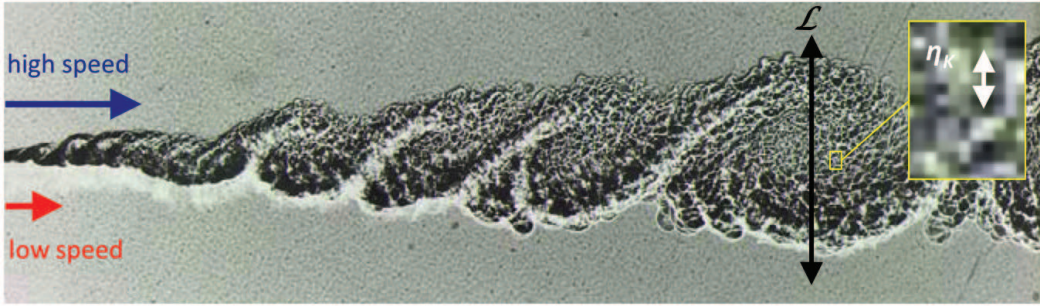


FIGURE 1.1 – Couche de mélange obtenue par Brown et Roshko [16], les échelles $\mathcal{L}$ et η_K sont mises en évidence

La théorie de Kolmogorov

La théorie classique dite de la « cascade », introduite par Richardson et reprise par Kolmogorov, est illustrée par la figure 1.2. On peut y distinguer trois zones. La première, dite « énergétique », où il y a production d'énergie cinétique turbulente grâce aux grosses structures dont la taille est liée à la géométrie du problème ; la seconde, dite « inertielle », où le transfert d'énergie vers les plus petites échelles revêt un caractère universel caractérisé par une décroissance avec une pente de $-5/3$ et enfin une troisième zone dissipative où l'énergie est dissipée sous forme de chaleur. On notera que l'étendu de ce spectre varie avec le nombre de Reynolds lié à l'échelle intégrale. Rappelons que le nombre de Reynolds lié à une longueur L défini comme

$$Re_L = \frac{UL}{\nu}, \quad (1.22)$$

où U est une vitesse caractéristique de l'écoulement, permet de comparer les efforts inertiels aux efforts visqueux subis localement par le fluide. L'échelle de dissipation de Kolmogorov est d'autant plus petite que le nombre de Reynolds est grand.

Des considérations dimensionnelles permettent d'écrire que :

$$\frac{\mathcal{L}}{\eta_K} = \mathcal{O}(Re_{\mathcal{L}}) \quad (1.23)$$

Parallèlement à cette cascade directe, des études récentes ont révélé l'existence d'une cascade d'énergie inverse, où de l'énergie provenant des petites échelles est transférée vers les grandes. L'intensité de ce phénomène est, au maximum, deux fois moindre et correspond phénoménologiquement aux processus d'appariement et d'enroulement tourbillonnaires.

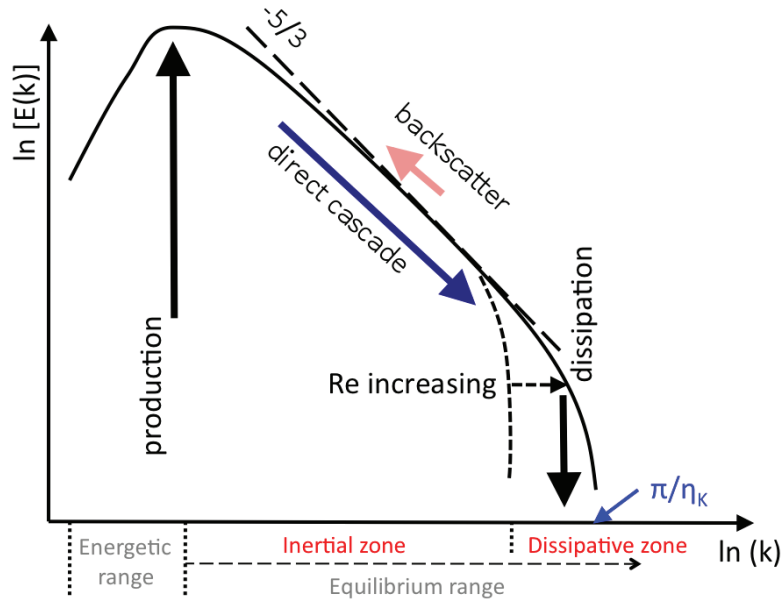


FIGURE 1.2 – Spectre d'énergie cinétique turbulente $E(k)$, mise en évidence des différentes régions

La résolution numérique d'écoulements turbulents requiert donc la prise en compte de l'ensemble de ce spectre d'échelles turbulentes en temps et en espace. Pour ce faire, il existe trois principales méthodes : la simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation ou DNS en anglais) où toutes les échelles spatio-temporelles de l'écoulement sont résolues ; la simulation aux grandes échelles (Large Eddy Simulation ou LES en anglais) où l'on ne résout que les échelles turbulentes plus grande qu'une taille de filtre, l'action dissipative des échelles plus petites que la taille de filtre Δ étant modélisée et enfin l'approche des équations de Navier Stokes moyennées au sens de Reynolds (Reynolds Averaged Navier Stokes ou RANS en anglais) où l'ensemble du spectre est modélisé et l'écoulement obtenu correspond à une moyenne temporelle. La figure 1.3 illustre l'évolution en un point de l'espace d'une variable de l'écoulement dans le temps selon les différentes approches. La position sur le spectre des échelles résolues et modélisées est également illustrée au niveau de la cascade énergétique à la figure 1.4.

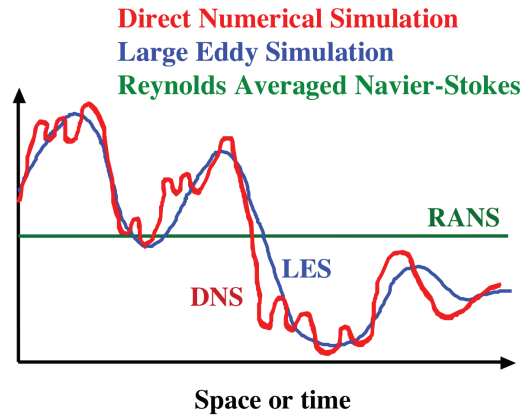


FIGURE 1.3 – Évolution temporelle d'une variable quelconque en un point de l'espace pour les différentes approches DNS, LES et RANS

Approche DNS

En DNS, les équations de Navier-Stokes sont **directement résolues**. Le maillage considéré doit par conséquent être capable de discrétiser l'ensemble des échelles turbulentes en espace (de $\mathcal{L}$ jusqu'à η_K) et le pas de temps utilisé doit être suffisamment petit pour en décrire la dynamique. On peut estimer

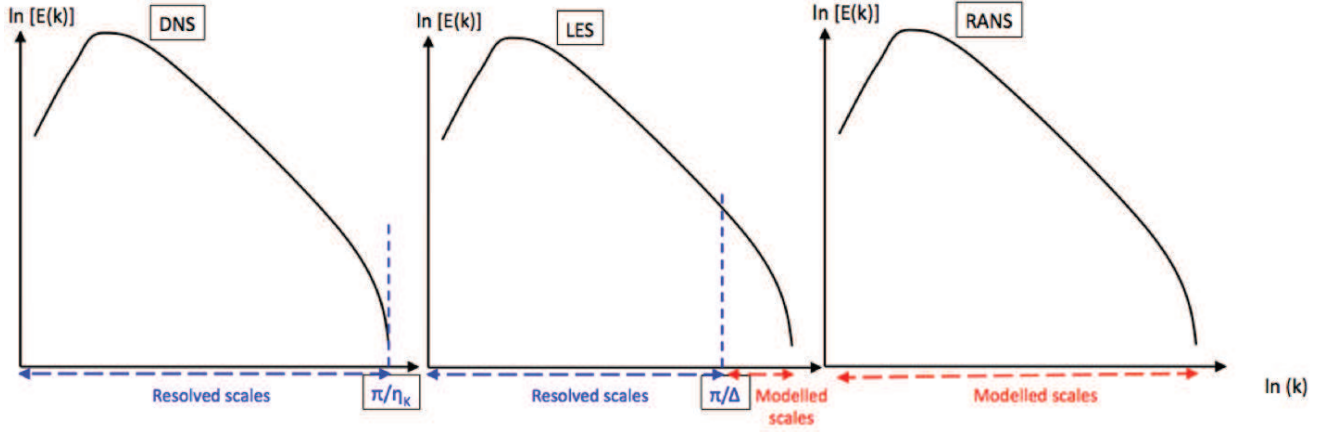


FIGURE 1.4 – Cascade énergétique pour les trois approches DNS, LES et RANS

que le nombre de points nécessaires à résoudre un écoulement dont la taille caractéristique est $\mathcal{L}$ est en $\mathcal{O}(Re_{\mathcal{L}}^{9/4})$ pour de la turbulence homogène isotrope (THI). Il s'en suit que pour des raisons de coût de calcul, cette approche est principalement utilisée pour caractériser les phénomènes fondamentaux rencontrés dans les écoulements turbulents à faibles nombres de Reynolds (éclatement tourbillonnaire, THI, dynamique des tourbillons pariétaux), une revue des différentes problématiques abordées en DNS est proposée par Moin et Mahesh [121]. Il faut noter que l'augmentation de la puissance de calcul permet un nombre croissant de calculs DNS de configurations complexes à nombres de Reynolds modérés (voir le récent calcul de Moureau *et al* [123]).

Approche RANS

L'approche RANS consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes auxquelles on applique une **moyenne statistique d'ensemble** assimilée à une moyenne temporelle grâce à l'hypothèse d'ergodicité (Tennekes et Lumley [195]). Cette opération peut être interprétée comme une opération de filtrage, ce qui facilite l'introduction de notations communes pouvant être employées à la fois en RANS et en LES. Au sens RANS, toute valeur instantanée d'une grandeur quelconque Ψ fluctuant au sein d'un écoulement turbulent, peut être décomposée en la somme de sa moyenne temporelle et de ses fluctuations autour de cette moyenne :

$$\Psi = \overline{\Psi} + \Psi'. \quad (1.24)$$

Les codes de CFD pour les écoulements compressibles utilisent plus couramment une moyenne pondérée par la masse volumique, appelée moyenne de Favre :

$$\tilde{\Psi} = \frac{\overline{\rho\Psi}}{\overline{\rho}}. \quad (1.25)$$

Les fluctuations associées à une moyenne de Favre sont notées Ψ'' , et telles que :

$$\Psi = \tilde{\Psi} + \Psi''. \quad (1.26)$$

L'opérateur de filtrage RANS vérifie les propriétés de linéarité, de projectivité, de conservativité des constantes, et de commutativité par rapport aux dérivées spatiales et temporelles. De ces propriétés découlent les relations suivantes utilisées lors du développement des équations de Navier-Stokes moyennées :

$$\overline{\overline{\Psi}} = \overline{\Psi} \quad \text{et} \quad \overline{\Psi'} = 0. \quad (1.27)$$

Approche LES

Au sens LES, les grandeurs sont **filtrées dans l'espace physique** par rapport à un filtre passe haut. Une partie du spectre de la turbulence, associée aux grandes structures tourbillonnaires, est alors résolue et une partie, correspondant aux petites structures, reste non résolue. Le modèle de sous-maille a ainsi pour fonction de modéliser les interactions entre les petites échelles de la turbulence et les grandes échelles. D'un point de vue mathématique, si l'on note G_Δ le noyau du filtre, l'opération de filtrage d'une grandeur Ψ dans l'espace spectral est obtenue par convolution [166] :

$$\bar{\Psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) G_\Delta(x - x') dx'. \quad (1.28)$$

En pratique, dans un code de CFD tel que CEDRE, le filtre est imposé dans l'espace physique à la fois par le maillage et par le schéma numérique. Le but de l'opération de filtrage résultant reste de permettre la résolution de la majorité du spectre d'énergie cinétique turbulente (portée par les plus grosses structures). De façon analogue au RANS, on utilise fréquemment un filtrage de Favre pondéré par la masse volumique (les notations restent les mêmes qu'en RANS). Le filtrage LES perd la propriété de projectivité. De ce fait, les conditions (1.27) ne sont plus vérifiées :

$$\bar{\bar{\Psi}} \neq \bar{\Psi} \quad \text{et} \quad \bar{\Psi}' \neq 0. \quad (1.29)$$

Il s'ensuit que le filtrage des équations de Navier-Stokes au sens LES introduit des termes supplémentaires par comparaison aux équations RANS. Ces termes doivent être pris en compte dans les **modèles de sous-maille** (modèles SGS pour « Sub Grid Scale model »).

1.2.2 Equations filtrées

Les équations de Navier-Stokes filtrées résolues par CEDRE s'écrivent :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0, \quad (1.30)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i) + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{J}}_i) - \tilde{\omega}_i = RHS_S, \quad (1.31)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) - \bar{\mathbf{S}}_{qdm} = RHS_M, \quad (1.32)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot [(\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{u}}] + \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}}_{e_t} - \bar{\mathbf{S}}_{e_t} = RHS_E. \quad (1.33)$$

Ces équations sont fermées par la loi des gaz parfaits filtrée :

$$\bar{p} = \frac{\bar{\rho} R \tilde{T}}{M(\tilde{T})}. \quad (1.34)$$

Les membres de droite intervenant dans ces équations sont fermés par les modèles de turbulence. Ils peuvent s'écrire :

$$RHS_S = -\nabla \cdot [\bar{\rho} (\widetilde{\mathbf{u} Y_i} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i)], \quad (1.35)$$

$$RHS_M = -\nabla \cdot [\bar{\rho} (\widetilde{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}})], \quad (1.36)$$

$$RHS_E = -\nabla \cdot [\bar{\rho} e_t \mathbf{u} - (\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{u}} - \bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{u}} + (\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{u}}]. \quad (1.37)$$

Les flux de diffusion filtrés sont obtenus par les mêmes approximations que pour les termes non filtrés (équation 1.17) :

$$\bar{\mathbf{J}}_i \approx -\bar{\rho} D_i(\tilde{T}) \nabla \tilde{Y}_i, \quad (1.38)$$

$$\bar{\mathbf{J}}_{e_t} \approx \sum_{i=1}^{N_e} \bar{h}_i \bar{\mathbf{J}}_i + \bar{\mathbf{q}}, \quad (1.39)$$

où $\bar{q}$, le flux de chaleur filtré est évalué comme :

$$\bar{q} \approx -\lambda \left(\tilde{T} \right) \nabla \tilde{T}. \quad (1.40)$$

Il en est de même pour le tenseur des contraintes visqueuses filtré (conformément à l'équation 1.13) :

$$\bar{\tau} \approx \mu \left(\tilde{T} \right) \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right]. \quad (1.41)$$

Du fait de la non linéarité des flux de diffusion et des contraintes visqueuses, les expressions exactes de ces flux filtrés comportent en réalité des termes supplémentaires qui n'apparaissent pas ici. Les coefficients de ces lois (diffusion moléculaire, viscosité dynamique et conductivité thermique) sont évalués ici directement à partir de la valeur filtrée de la température.

Le terme $\tilde{\omega}_i$ de production / destruction d'espèces filtré fait l'objet d'une modélisation spécifique qui est traitée dans le chapitre 2 sur la combustion turbulente.

1.2.3 Fermeture des équations

Dans le paragraphe précédent les termes du second membre $RHS_{S,M,E}$ restent à modéliser :

- Dans le terme RHS_M , la grandeur $\bar{\rho} \left(\widetilde{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}} \right)$, que l'on peut noter τ^t , représente les contraintes turbulentes. En RANS, ce tenseur se réduit au **tenseur de Reynolds** :

$$\tau^t = -\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' \mathbf{u}''}. \quad (1.42)$$

En revanche, au sens LES, le tenseur des contraintes de sous-maille comporte des termes supplémentaires induits par la non projectivité du filtre :

$$\tau^t = -\underbrace{\bar{\rho} \left(\widetilde{\mathbf{u} \mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}} \right)}_L - \underbrace{\bar{\rho} \left(\widetilde{\mathbf{u} \mathbf{u}''} + \widetilde{\mathbf{u}'' \mathbf{u}} \right)}_C - \underbrace{\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}'' \mathbf{u}''}}_R. \quad (1.43)$$

En plus du tenseur de Reynolds représentant les interactions entre les échelles de sous-maille, apparaissent deux nouveaux tenseurs : le tenseur de Léonard L associé aux interactions entre les grandes échelles résolues, et le tenseur croisé C représentant les interactions entre les petites échelles de sous-maille et les grandes échelles résolues. La modélisation du tenseur des contraintes turbulentes doit prendre en compte l'existence de cette décomposition triple. Toutefois, les modèles généralement utilisés ne s'intéressent qu'à la modélisation du seul tenseur de Reynolds.

Dans CEDRE, que l'on se trouve dans un contexte RANS ou LES, le tenseur τ^t s'exprime suivant l'**hypothèse de viscosité turbulente de Boussinesq**. On écrit alors :

$$\tau^t = \mu_t \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right] - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \mathbf{I}, \quad (1.44)$$

k représente l'énergie cinétique de la turbulence et μ_t le coefficient de viscosité turbulente. En général, la partie isotrope du tenseur n'est pas toujours prise en compte en LES. Le coefficient de viscosité turbulente doit être modélisé afin de pouvoir évaluer le tenseur τ^t , les modèles utilisés dans le code CEDRE sont décrits à la section 1.2.4.

- Les flux de diffusion thermique et de masse turbulents doivent également être fermés (termes RHS_E et RHS_S). Les fermetures apportées à ces termes sont identiques en RANS et en LES et sont également fondées sur l'**hypothèse de gradient** :

$$\bar{\rho} \left(\widetilde{\mathbf{u} Y_i} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i \right) = \mathbf{J}_i^t = -\bar{\rho} D_t \nabla \tilde{Y}_i, \quad (1.45)$$

$$\overline{\rho e_t \mathbf{u}} - (\bar{\tau} - p \mathbf{I}) \mathbf{u} - \bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{u}} + (\bar{\tau} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{q}^t + \sum_{i=1}^{N_e} \bar{h}_i \mathbf{J}_i^t + \tau^t \tilde{\mathbf{u}}, \quad (1.46)$$

avec

$$\mathbf{q}^t = -\lambda_t \nabla \tilde{T}. \quad (1.47)$$

Les coefficients de conductivité thermique et de diffusion turbulents sont évalués respectivement à partir de nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents constants. On a ainsi : $\lambda_t = \mu_t c_p / Pr_t$ et $D_t = \nu_t / Sc_t$.

1.2.4 Modélisation de la viscosité turbulente

Il existe dans la littérature de très nombreuses approches permettant de fermer le terme ν_t dans l'équation 1.44 que ce soit en RANS ou en LES. Pour le code CEDRE et dans le cadre de cette étude, les approches utilisées en RANS ou LES sont les suivantes :

- en RANS, les modèles à deux équations $k - \varepsilon$ [106, 95] et $k - \omega$ SST sont utilisés. Nous rappelons que ε est le taux de dissipation turbulente, et ω une pseudo-dissipation (homogène à s^{-1}). La viscosité turbulente ν_t valant :

$$\frac{C_\mu k^2}{\varepsilon}, \quad \text{pour le modèle } k - \varepsilon, \quad (1.48)$$

$$\frac{k}{\omega}, \quad \text{pour le modèle SST}, \quad (1.49)$$

où la constante C_μ vaut en général 0,09.

Les équations détaillées du modèle $k - \varepsilon$ sont explicitées à la référence [131], le modèle $k - \omega$ SST étant plus longuement abordé à la section 3.3 ;

- en LES, c'est le modèle de Smagorinsky [185] qui a été utilisé pour évaluer la viscosité sous-maille :

$$\mu_t = \bar{\rho} \left(C_S \hat{\Delta} \right)^2 \sqrt{2 \tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}}, \quad (1.50)$$

où $\tilde{\mathbf{S}}$ est la partie symétrique du tenseur des gradients de vitesses filtré à savoir :

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T), \quad (1.51)$$

la constante C_S vaut 0,1 dans nos calculs. La taille du filtre $\hat{\Delta}$ est égal $\min(\Delta; 0, 4d/C_S)$, où d est la distance à la paroi, permet à la viscosité sous-maille de Smagorinsky de s'annuler à la paroi. L'échelle de sous-maille Δ intervenant dans le modèle de Smagorinsky retenu dans CEDRE est le diamètre équivalent défini par :

$$\Delta = D_h = \frac{6V}{\sum_k A_k}, \quad (1.52)$$

où A_k correspondent aux aires des faces de la cellule.

Chapitre 2

La combustion turbulente et sa modélisation

Table des matières

2.1	La combustion laminaire	14
2.1.1	Généralités	14
2.1.2	La combustion laminaire prémélangée	15
	Observations :	15
	Variable d'avancement :	16
	Vitesse et épaisseur de flamme :	16
2.1.3	La flamme laminaire de diffusion	17
	Observations :	17
	Paramètres décrivant la structure de la flamme :	18
2.2	Phénoménologie des interactions flamme/turbulence	19
2.2.1	Flammes turbulentes prémélangées	19
2.2.2	Flammes turbulentes non prémélangées	21
2.3	Diagrammes pour la combustion turbulente numérique	23
2.3.1	Généralités	23
2.3.2	Mise en application en RANS ou en LES	24
2.4	Modélisation de la combustion turbulente	26
2.4.1	Cinétique chimique	26
2.4.2	Modèle de flamme épaissie pour la LES	26
	Modèle de flamme épaissie en laminaire	27
	Modèle TFLES	27
	Modélisation de E	28
	Modèle de flamme épaissie dynamique	29

Dans ce second chapitre, les structures des flammes laminaires de prémélange et des flammes laminaires non-prémélangées sont d'abord décrites. Dans un deuxième temps, les régimes de combustion turbulente rencontrés en fonction du rapport entre les échelles liées à la chimie et celles liées à la turbulence sont expliqués au travers de diagrammes. Puis, la modélisation adoptée dans ces travaux pour décrire ces phénomènes est détaillée. Enfin, les méthodes employées pour caractériser la combustion turbulente en simulation numérique sont enfin présentées.

In this second chapter, the structure of laminar premixed and non premixed flames are first described. In a second time, the turbulent combustion regimes depending on the ratio between chemical scales and turbulence scales are explained thanks to diagrams. Then, the modelling employed in this work is detailed. Finally, the methods used to turbulent combustion in numerical simulation are presented.

2.1 La combustion laminaire

Les deux premières sections de ce chapitre s'appuient sur un travail de synthèse réalisé par Savre au cours de sa thèse [175]. Dans le cadre de cette étude, nous nous intéressons uniquement à des flammes laminaires non étirées et ne traitons que les flammes de prémélange et de diffusion. L'effet de l'étirement et de la courbure ainsi que la phénoménologie des flammes partiellement prémélangées sont passés en revue à la référence [175].

Le développement de modèles permettant de prendre en compte les différents régimes de combustion rencontrés dans les foyers aérospatiaux nécessite de faire la distinction entre flammes prémélangées et flammes non prémélangées. Pilotées à petites échelles par des phénomènes identiques (chimie, diffusion moléculaire et thermique), ces deux types de flammes possèdent des structures et des propriétés bien distinctes, ce qui rend l'élaboration d'un modèle de combustion « universel » extrêmement délicat. Les descriptions faites par la suite correspondent à des flammes mettant en jeu la combustion de combustibles légers dans l'air (H_2 et CH_4 essentiellement).

2.1.1 Généralités

La réaction de combustion peut-être décrite de façon globale comme une réaction exothermique entre un oxydant O et un carburant F , engendrant des produits de combustion P . Elle peut être schématisée de manière très simplifiée par le schéma réactionnel global suivant :



où ν'_F et ν'_O correspondent respectivement aux coefficients stœchiométriques du combustible F et de l'oxydant O .

Le coefficient stœchiométrique massique est alors défini comme :

$$s = \frac{\nu'_F \mathcal{M}_F}{\nu'_O \mathcal{M}_O}. \quad (2.2)$$

Le rapport de mélange RM est égal au rapport des masses de combustible m_F et d'oxydant m_O :

$$RM = \frac{m_F}{m_O}. \quad (2.3)$$

La richesse du mélange Φ est égale au ratio entre les rapports de mélange local et stœchiométrique :

$$\Phi = \frac{RM}{RM_s}. \quad (2.4)$$

Si $\Phi < 1$, le mélange contient plus d'oxydant que de combustible, il est dit **pauvre**. Lorsque $\Phi > 1$ le mélange est dit **riche**.

2.1.2 La combustion laminaire prémélangée

Observations :

Dans cette sous-section l'analyse s'effectue pour une flamme 1D, qui se propage dans la direction X . En combustion prémélangée, les réactifs (oxydant et carburant) sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir. Les flammes de prémélange sont caractérisées par l'existence d'un **front de flamme mince** séparant les gaz frais des gaz brûlés comme l'illustre la figure 2.1. Au sein de ce front ont lieu les réactions chimiques permettant la transformation des réactifs en produits. Cette flamme peut être caractérisée par son **épaisseur** notée δ_L^0 (l'indice L se rapporte au cas laminaire, et l'exposant 0 au cas d'une flamme non étirée).

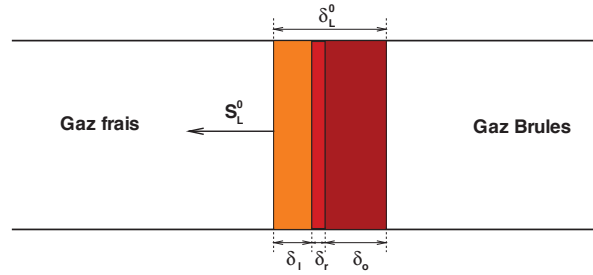


FIGURE 2.1 – Représentation schématique d'une flamme laminaire de prémélange.

Une flamme prémélangée laminaire peut se diviser en trois zones distinctes suivant l'analyse asymptotique de Zel'dovitch/Frank-Kamenetski (Williams [212], Peters et Williams [139]). La figure 2.2, présente les distributions spatiales calculées de CH_4 et de température obtenues pour une flamme méthane/air stœchiométrique 1D.

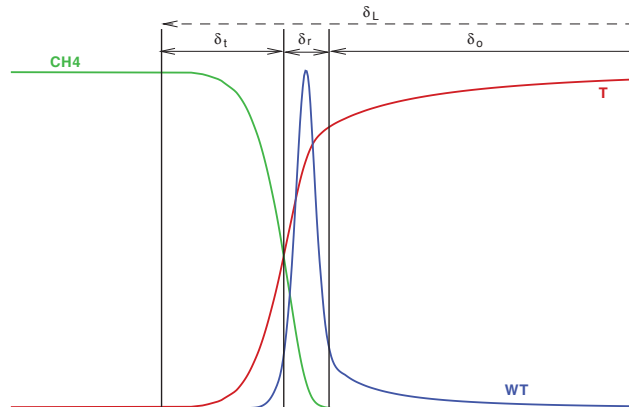


FIGURE 2.2 – Structure interne d'une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique méthane/air.

- La première zone se caractérise par une élévation progressive de la température, alors que les termes de production/disparition chimiques restent nuls. C'est la zone de préchauffage dans laquelle, en raison de l'existence de forts gradients d'espèces et de température favorisant la diffusion thermique et moléculaire, les gaz frais voient leur température s'élever jusqu'à atteindre la température d'inflammation du mélange. L'épaisseur caractéristique δ_l de cette zone est généralement de l'ordre de $0,3\delta_L^0$.
- L'oxydant et le carburant réagissent ensuite au sein de la seconde zone : c'est la zone de réaction. Celle-ci est peu épaisse (son épaisseur δ_r est de l'ordre d'un dixième de l'épaisseur totale du front de flamme) et se caractérise par une élévation brutale de la température et de fortes variations des termes sources chimiques des espèces. C'est dans cette région que le carburant est consommé et que les produits majoritaires de combustion sont formés.
- Dans la troisième zone, les réactions principales sont à l'état d'équilibre partiel, et la température n'augmente que très progressivement. Les produits de combustion sont lentement oxydés, et les réactions élémentaires mises en jeu évoluent avec des temps caractéristiques relativement grands. Cette zone est appelée zone d'oxydation, et son épaisseur est notée δ_o .

Dans le cas d'une combustion pauvre à stœchiométrique, on peut s'attendre à ce que le carburant soit entièrement consommé et qu'une certaine proportion d'oxydant résiduel soit retrouvée dans les gaz brûlés. En revanche, en combustion riche, tout le carburant n'a pas réagi ce qui entraîne la présence d'hydrocarbures imbrûlés dans les gaz chauds.

Au fur et à mesure que les réactifs sont consommés, le front de flamme se déplace, des gaz frais vers les gaz brûlés. On peut donc définir une **vitesse de propagation** du front, appelée vitesse de flamme, et notée S_L^0 . Cette vitesse est directement reliée à la vitesse de consommation du carburant dans la zone de réaction. Cette grandeur, de même que l'épaisseur de la flamme, dépendent de nombreux paramètres de l'écoulement tels que la richesse, la pression, la nature du carburant, les propriétés physico-chimiques...

Variable d'avancement :

La structure interne de la flamme de prémélange peut être décrite par un unique paramètre, appelé variable d'avancement, que l'on notera par la suite c . Plusieurs définitions de cette variable peuvent être proposées [203, 150], avec toutefois la contrainte que c doit varier de façon monotone lorsque l'on progresse des gaz frais vers les gaz brûlés. On peut par exemple écrire [150] :

$$c = \frac{Y_F - Y_F^u}{Y_F^b - Y_F^u} \quad \text{ou} \quad c = \frac{T - T^u}{T^b - T^u}, \quad (2.5)$$

où T est la température et Y_F la fraction massique du carburant. Les indices u et b représentent respectivement les grandeurs prises dans les gaz frais (unburnt) et dans les gaz brûlés (burnt). La variable d'avancement peut être normalisée de telle sorte qu'elle varie entre 0 du côté des gaz frais et 1 du côté des gaz brûlés. De nombreux modèles de combustion dédiés aux flammes prémélangées sont basés sur le transport de cette grandeur.

Vitesse et épaisseur de flamme :

Lorsque l'on se place dans le contexte de flammes planes librement propagatives, la vitesse de consommation est une grandeur globale obtenue par intégration des taux de production de c à travers le front de flamme. Elle est donc unique pour chaque flamme considérée et dépend essentiellement des conditions dans lesquelles se déroule la combustion :

$$\rho_u S_L^0 = -\frac{1}{(c^b - c^u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \dot{\omega}_c dx. \quad (2.6)$$

De façon analogue, différentes définitions peuvent être données pour caractériser l'épaisseur du front de flamme [150]. Les relations établies ici restent toutefois très approchées.

En se plaçant dans le cadre d'une chimie simplifiée, la relation la plus couramment employée est la suivante :

$$\delta_L^0 = \frac{\lambda}{\rho_u c_p S_L^0}. \quad (2.7)$$

Ici, δ_L^0 peut être apparentée à une épaisseur de diffusion. Cette relation sous-estime généralement l'épaisseur réelle de la zone de réaction.

Des relations plus précises peuvent être établies, mais contrairement à (2.7), celles-ci nécessitent la connaissance de l'état après combustion (notamment de la température des gaz brûlés). On trouve par exemple dans [150] une expression de l'épaisseur thermique de la flamme calculée à partir du gradient de température :

$$\delta_L^0 = \frac{T^b - T^u}{\max(|\frac{\partial T}{\partial x}|)}. \quad (2.8)$$

2.1.3 La flamme laminaire de diffusion

Observations :

Pour une flamme de diffusion, l'oxydant et le carburant sont séparés en des zones parfaitement distinctes avant de réagir. La figure 2.3 représente une vue simplifiée d'une flamme de diffusion. Dans ce régime, la combustion est essentiellement pilotée par la diffusion des réactifs l'un dans l'autre. La flamme va se développer à l'interface entre les deux réactifs, à la stœchiométrie. Les produits de combustion sont ensuite évacués par diffusion moléculaire de part et d'autre de la zone de réaction.

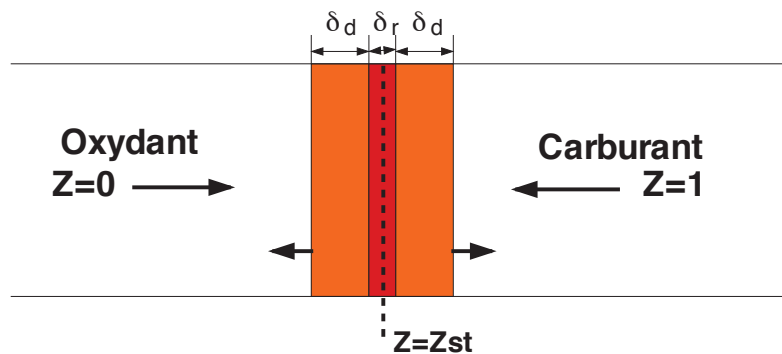


FIGURE 2.3 – Représentation schématique d'une flamme de diffusion laminaire.

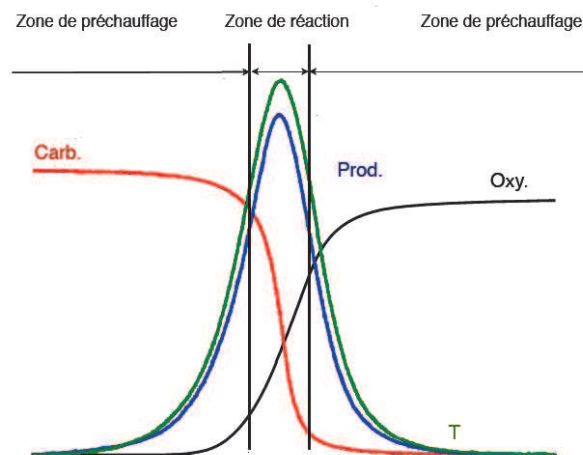


FIGURE 2.4 – Représentation de profils à travers une flamme de diffusion classique.

La flamme de diffusion type, schématisée figures 2.3 et 2.4, met en évidence l'existence de trois zones :

- la première zone, localisée au centre de la flamme, est la zone de réaction. Elle se caractérise par un pic des termes sources chimiques et du dégagement de chaleur : c'est là que se déroulent les réactions chimiques mettant en jeu les réactifs et les produits de combustion principaux. Dans cette zone, le carburant et l'oxydant alimentant la flamme sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir ;
- la seconde région, entourant la zone de réaction, est la zone de diffusion des espèces : là, les réactifs présents de chaque côté de la flamme sont mélangés aux produits de combustion évacués par diffusion moléculaire. Dans cette zone, on note une élévation progressive de la température des gaz, provoquée par la diffusion thermique et la dilution des réactants par les gaz brûlés. Sous l'hypothèse d'équidiffusion, la zone de diffusion des espèces et celle de la température sont superposées et symétriques ;
- pour finir, on trouve de part et d'autre des zones de diffusion les deux écoulements de gaz frais alimentant la flamme en carburant et en oxydant.

Ces observations montrent que les flammes de diffusion résultent de la compétition entre les processus chimiques et la diffusion moléculaire des espèces. La structure de cette flamme est donc contrôlée uniquement par le rapport entre les temps caractéristiques de la chimie et de la diffusion.

Contrairement aux flammes de prémélange, le front de la flamme de diffusion ne se propage pas au sein de l'écoulement mais reste fixé autour de l'iso-surface de mélange stœchiométrique.

Paramètres décrivant la structure de la flamme :

Les flammes de diffusion sont généralement décrites par l'intermédiaire d'un traceur de mélange noté z . Dans le cas d'une chimie simple, typiquement décrite par une réaction chimique unique et irréversible, la fraction de mélange peut être construite simplement à partir des fractions massiques des espèces réactives [212] :

$$s_\varphi = Y_F - \frac{Y_O}{s} = Y_F + \frac{Y_P}{1+s}. \quad (2.9)$$

L'indice O correspond à l'oxydant, F au carburant et P aux produits de combustion. s est le rapport stœchiométrique défini par $s = \nu_O M_O / \nu_F M_F$. La variable de Schwab-Zel'dovich, s_φ , est généralement réduite de manière à ce que z varie entre 0 et 1 [203] :

$$z = \frac{\varphi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{1 + \varphi}, \quad (2.10)$$

où φ est une richesse globale définie à partir des fractions massiques de l'oxydant et du carburant pris dans les zones d'alimentation : $\varphi = s Y_{F,0} / Y_{O,0}$.

Le scalaire z se révèle être un bon traceur pour localiser la flamme de diffusion sachant que la zone de réaction se développe à la stœchiométrie, c'est-à-dire autour de l'iso-surface $z = z_{st}$.

Le taux de dissipation scalaire de z , noté χ , est utilisé pour caractériser la structure de la flamme. χ est défini par :

$$\chi = D \left| \frac{\partial z}{\partial x} \right|^2. \quad (2.11)$$

Cette grandeur permet de quantifier les flux de diffusion de masse à travers les isosurfaces de z .

Il résulte de ces observations que la structure d'une flamme de diffusion peut être caractérisée par seulement deux grandeurs indépendantes : la fraction de mélange et son taux de dissipation.

2.2 Phénoménologie des interactions flamme/turbulence

2.2.1 Flammes turbulentes prémélangées

Le but de cette section est de discuter de l'influence de la turbulence sur la structure des flammes de prémélange. De nombreux auteurs se sont intéressés au sujet, notamment Borghi [12], Borghi et Destriau [13] ou Peters [137]. Les travaux les plus récents utilisent la DNS pour étudier en détail ces interactions (Poinsot *et al.* [151], Poinsot et Veynante [150]).

L'influence de la turbulence sur la chimie (et réciproquement) est contrôlée par les temps caractéristiques de ces deux phénomènes. Un temps caractéristique chimique est défini généralement en fonction de la vitesse et de l'épaisseur de flamme laminaire :

$$\tau_c = \frac{\delta_L^0}{S_L^0}. \quad (2.12)$$

Un temps turbulent caractéristique peut être défini comme le rapport entre une échelle de longueur de la turbulence et la fluctuation de vitesse associée. On obtient ainsi différents temps correspondant aux différentes échelles caractéristiques des tourbillons. Par exemple, suivant l'échelle de Kolmogorov η_K représentant la taille des plus petits tourbillons, il vient :

$$\tau_{t,\eta_K} = \frac{\eta_K}{u'_{\eta_K}}. \quad (2.13)$$

Si l'on considère maintenant les plus grandes structures de l'écoulements décrites par l'échelle intégrale l_t , on trouve :

$$\tau_{t,l_t} = \frac{l_t}{u'_l}. \quad (2.14)$$

Les rapports entre ces différents temps définissent des nombres sans dimension permettant de caractériser les différents régimes de combustion turbulente. Le nombre de Damköhler est défini comme le rapport entre le temps lié à l'échelle intégrale de la turbulence et le temps chimique, alors que le nombre de Karlovitz est égal au rapport entre le temps chimique et le temps lié à l'échelle de Kolmogorov.

$$Da = \frac{\tau_{t,l_t}}{\tau_c}, \quad (2.15)$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_{t,\eta_K}}. \quad (2.16)$$

Le nombre de Reynolds turbulent $Re_t = u'l_t/\nu$ peut alors être réécrit en fonction de ces deux nombres adimensionnels :

$$Re_t = Da^2 Ka^2. \quad (2.17)$$

Suivant les valeurs prises par Da et Ka , il est possible d'identifier différents régimes de combustion. Ces régimes peuvent ensuite être classés au sein d'un diagramme en fonction des rapports des échelles de longueur et de vitesse, ou en fonction des nombres de Damköhler et de Karlovitz (Borghi [12], Peters [137]). La figure 2.5 présente par exemple un diagramme de combustion turbulente proposé par Peters [138]. On retrouve en abscisse le rapport des longueurs l_t/δ_L^0 , et en ordonnée le rapport des vitesses u'_l/S_L^0 . La figure 2.5 permet de distinguer quatre principaux régimes pour la combustion prémélangée :

- le premier régime correspond à un nombre de Karlovitz inférieur à 1 et à un nombre de Damköhler supérieur à 1. C'est le régime des flammelettes ou régime des flammes minces. Les plus petites structures de la turbulence sont ici trop petites pour pouvoir pénétrer le front de flamme et sont donc incapables de modifier sa structure interne. Suivant la valeur du rapport des vitesses u'/S_L , deux régions peuvent être distinguées :
 - pour $u'/S_L^0 < 1$, la turbulence n'a d'effet que sur la structure externe de la flamme en la plissant (c'est le régime des flammelettes plissées),

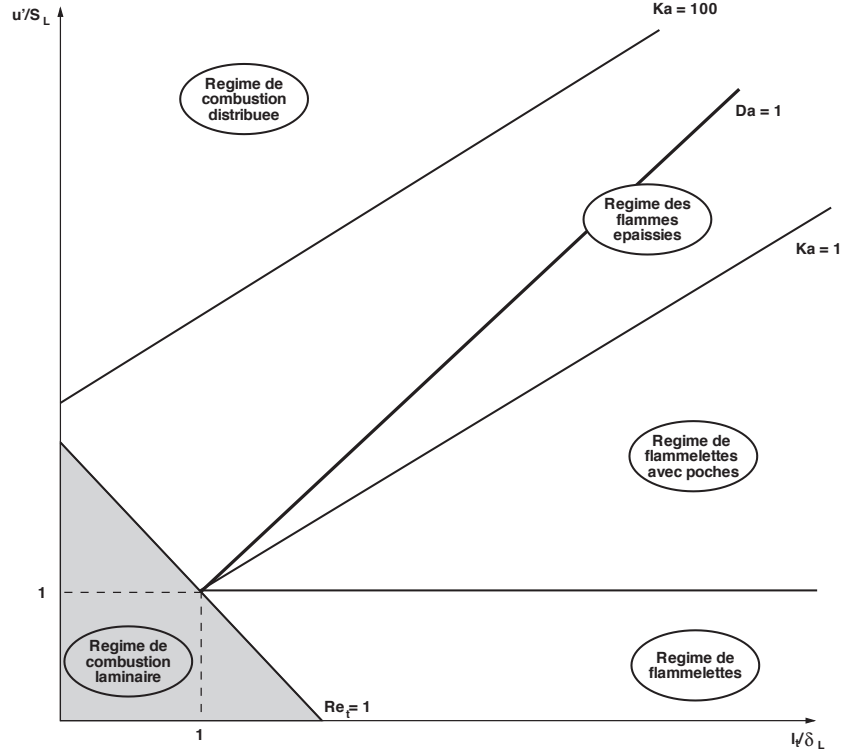


FIGURE 2.5 – Diagramme de combustion turbulente prémélangée (Peters [138]).

- pour $u'/S_L^0 > 1$, l'intensité de la turbulence plisse très fortement le front de flamme, ce qui peut conduire à la formation de poches (c'est le régime des flammelettes avec poches) ;
- le second régime est défini par un Karlovitz supérieur à 1, et un Damköhler lui aussi supérieur à 1 (ou faiblement inférieur à 1). On se situe alors dans le domaine des flammes épaissies. Dans cette région, les plus petits tourbillons possèdent une taille caractéristique inférieure à l'épaisseur de flamme, ce qui leur permet de pénétrer la zone de préchauffage (mais pas la zone de réaction). La structure interne de la flamme est modifiée car les petits tourbillons épaississent la flamme en accroissant la diffusion thermique et moléculaire. À noter que pour des nombres de Karlovitz supérieurs à 1, des zones d'extinction locales peuvent également être observées. Peters [138] introduit une limite en $Ka = 100$, délimitant la région où les plus petits tourbillons de l'écoulement deviennent plus petits que l'épaisseur de la zone de réaction (supposée être 10 fois plus petite que l'épaisseur de flamme). Cette ligne représente la limite supérieure du régime des flammes épaissies ;
- le dernier régime est caractérisé par un Karlovitz supérieur à 100, et un nombre de Damköhler très inférieur à 1. C'est le régime de combustion distribuée. Dans ce cas, les plus petites structures turbulentes ont une taille inférieure à l'épaisseur de la zone de réaction et sont donc capables d'altérer profondément celle-ci. La chimie est fortement perturbée par la turbulence, et on ne peut plus réellement distinguer de front de flamme. Le mélange turbulent est très rapide comparé aux mécanismes chimiques, c'est pourquoi on parle souvent de réacteur parfaitement mélangé.

La limite correspondant à $Ka = 1$, appelée critère de Klimov-Williams, définit la transition entre le régime des flammelettes et le régime des flammes épaissies. Différents travaux ont été réalisés dans le but de caractériser plus précisément la position de cette transition (Poinsot *et al.* [151, 116], Abdel-Gayed et Bradley [2]). Il est apparu en particulier que le régime des flammelettes peut se prolonger au delà de cette limite. Ceci est principalement dû au fait que le critère de Klimov-Williams suppose que les tourbillons à l'échelle de Kolmogorov sont capables d'altérer la flamme turbulente. Or, ceux-ci ont une durée de vie généralement trop courte pour affecter efficacement la flamme. En fait, l'échelle caractéristique des plus

petits tourbillons pouvant altérer la flamme, l'échelle de Gibbs, peut être évaluée suivant [137] :

$$l_G \approx \frac{(S_L^0)^3}{\epsilon}, \quad (2.18)$$

où ϵ représente le taux de dissipation de la turbulence dans la zone inertielle. Récemment, la DNS s'est révélée être un outil particulièrement efficace pour l'étude des interactions flamme/turbulence (pour une revue complète, voir Hilbert *et al.* [88] ou Poinso *et al.* [147]). Ces travaux ont notamment permis le développement de diagrammes de combustion avancés. Sur la figure 2.6, la ligne en pointillés correspond à la limite d'influence des tourbillons sur la flamme. La limite d'extinction, séparant le régime des flammelettes du régime des flammes épaissies, est beaucoup plus haute que ce que prédit le critère de Klimov-Williams.

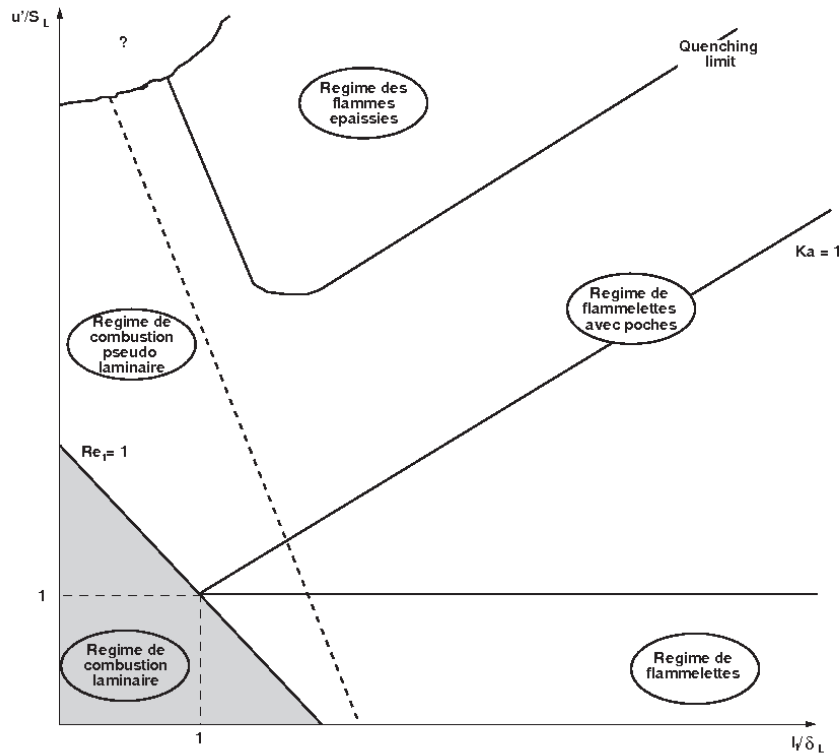


FIGURE 2.6 – Diagramme de combustion turbulente prémélangée étendu, construit à partir de résultats de calculs DNS d'interactions flamme/tourbillon (Poinso *et Veynante* [150]).

La turbulence, à travers ces différentes interactions avec le front de flamme, modifie l'épaisseur et la vitesse de propagation de la flamme. L'influence de la turbulence sur ces paramètres est très complexe et difficilement représentable analytiquement. Des corrélations existent cependant reliant par exemple la vitesse de flamme turbulente à la vitesse de flamme laminaire (Abdel-Gayed *et al.* [3]) :

$$\frac{S_t}{S_L^0} = 1 + \frac{u'}{S_L^0}. \quad (2.19)$$

Une grande part d'empirisme subsiste toutefois dans ce type de modèle.

2.2.2 Flammes turbulentes non prémélangées

De manière similaire, pour les flammes de diffusion, il est possible d'identifier différents régimes de combustion distincts en comparant les échelles caractéristiques des flammes (longueur et temps) à celles de la turbulence. Lorsque l'on s'intéresse à de telles flammes, la définition formelle de ces échelles présente

certaines difficultés. En effet, contrairement au cas prémélangé, le front de flamme ne se propage pas ce qui rend impossible la définition d'une vitesse de propagation. De plus, l'épaisseur de la zone de réaction dépend fortement des conditions de l'écoulement. Ainsi, les échelles de la flamme non prémélangée sont souvent liées aux phénomènes diffusifs, notamment via le taux de dissipation scalaire de z à la stœchiométrie. Un temps caractéristique peut, par exemple, être obtenu suivant :

$$\tau_c = \frac{1}{\chi_{st}}. \quad (2.20)$$

Si cela s'avère nécessaire, un temps chimique τ_c peut être obtenu dans le cadre d'une chimie globale, à partir de développements asymptotiques des taux de réactions. Cuenot et Poinso [37] se basent sur des résultats de calculs DNS pour tracer un diagramme représentant les différents régimes de combustion non prémélangée pouvant être rencontrés en pratique. Une représentation simplifiée de ce diagramme, tracé en fonction du nombre de Damköhler de la flamme et du Reynolds turbulent, est schématisée sur la figure 2.7. On y distingue quatre domaines séparés par trois courbes correspondant à des Damköhler diffusifs constants : la limite d'extinction est représentée par la droite $Da = Da^{ext}$ et la limite du régime de flammelettes par la droite $Da = Da^{LFA}$ (LFA pour "Laminar Flamelet Assumption").

- Le premier domaine correspond à des valeurs du nombre de Reynolds turbulent inférieures à 1. Dans cette zone, l'écoulement reste laminaire (les flammes possèdent donc une structure laminaire).
- Le second domaine est défini par $Re_t > 1$ et $Da > Da^{LFA}$. Dans cette zone, l'hypothèse de flammelettes laminaires est vérifiée. Ainsi, la zone de réaction de la flamme est considérée comme mince et le temps caractéristique de la chimie est négligeable devant les échelles de temps de la turbulence. On peut alors considérer la flamme turbulente comme étant constituée d'une collection de flammelettes, ce qui confère localement à la flamme turbulente les mêmes propriétés qu'une flamme laminaire.
- La troisième zone est définie pour des nombres de Damköhler compris entre Da^{LFA} et Da^{ext} . Les temps caractéristiques de la chimie ne sont plus négligeables devant les temps de la turbulence. Des effets liés à l'instationnarité de l'écoulement peuvent alors apparaître, modifiant le comportement de la flamme. L'hypothèse de flammelettes n'est donc plus valide.
- Dans la dernière région, délimitée par $Da < Da^{ext}$, des extinctions locales (« quenching ») peuvent être observées le long de la flamme. Lorsque le nombre de Damköhler est encore augmenté, c'est toute la flamme qui s'éteint. De fortes instabilités de combustion peuvent être observées dans ce régime.

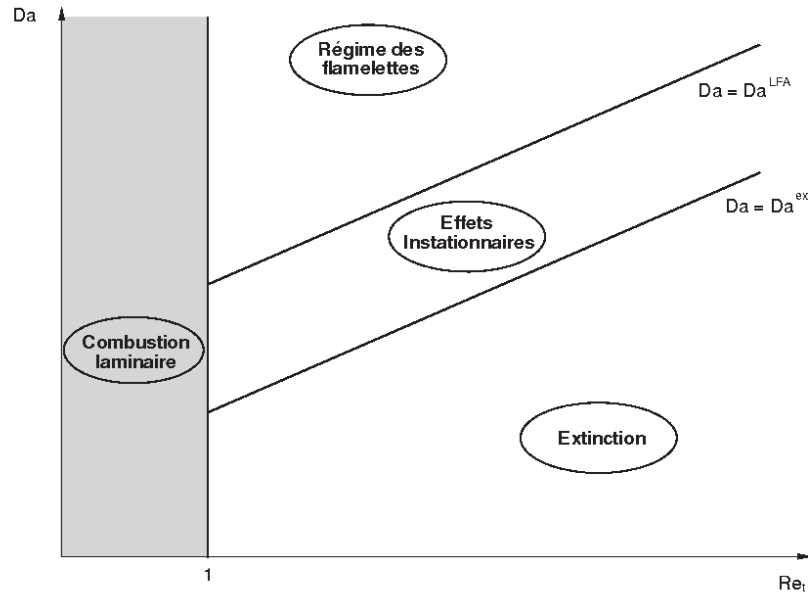


FIGURE 2.7 – Représentation schématisée des différents régimes de combustion turbulente non prémélangée ([150, 37]).

Ce diagramme permet de se représenter les différents régimes rencontrés en combustion turbulente non prémélangée. Cependant, de telles flammes sont très dépendantes des conditions de l'écoulement externe (richesse, débit, pression...) et le diagramme présenté ne permet pas de définir de manière quantitative les différents régimes rencontrés. En particulier les bornes de ceux-ci sont susceptibles de varier fortement suivant le point de fonctionnement étudié.

2.3 Diagrammes pour la combustion turbulente numérique

2.3.1 Généralités

Lors du développement d'un nouveau modèle de combustion turbulente, il peut être intéressant de situer celui-ci par rapport aux différents régimes de combustion. Cette classification permet de mettre en évidence les avantages et les inconvénients du modèle, ainsi que sa plage de validité. Différents diagrammes ont ainsi été établis dans ce but, dont celui de Pitsch et Duchamp de Lageneste [145] (voir figure 2.8).

Ce diagramme est construit dans un repère $(\Delta/\delta_L^0; Ka = (\delta_L^0/\eta_K)^2)$ où l'abscisse représente une évolution dans le domaine physique et l'ordonnée une évolution dans le domaine numérique. Il a été développé spécifiquement pour une identification rapide du domaine de validité d'un modèle de combustion turbulente pour la LES ou la DNS. Les différentes régions sont séparées par des lignes représentant certaines valeurs particulières des nombres sans dimension définis ci-dessous :

$$Ka_\delta = \left(\frac{\delta_r}{\eta_K}\right)^2 \quad \text{et} \quad Re_\Delta = \frac{u'_\Delta \Delta}{S_L^0 \delta_L^0}, \quad (2.21)$$

où η_K est l'échelle de Kolmogorov, u'_Δ représente les fluctuations de vitesse à l'échelle de la maille Δ et δ_r est l'épaisseur de la zone de réaction.

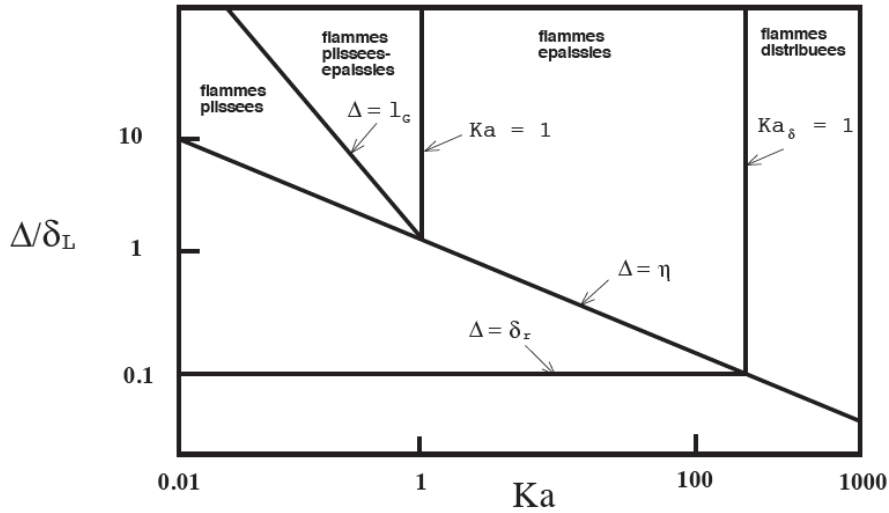


FIGURE 2.8 – Diagramme de combustion de Pitsch et Duchamp de Lageneste [145].

Plus récemment, Dusing *et al.* [58] ont proposé une généralisation de ce diagramme. Pour cela, ils ont d'abord défini un diagramme tridimensionnel, puis ils en ont extrait le plan $(\Delta/\delta_L^0) - (Ka)$ (voir figure 2.9). Le domaine qu'il couvre est plus étendu que celui de Pitsch et Duchamp de Lageneste puisqu'il englobe également les flammes laminaires ainsi qu'une région RANS. L'abscisse Ka correspond à la dimension physique, les lignes verticales délimitent donc les régimes de combustion tels qu'ils ont été définis par Borghi [12]. En ordonnées, on retrouve l'influence de la taille de maille sur les simulations. Quatre domaines peuvent être identifiés :

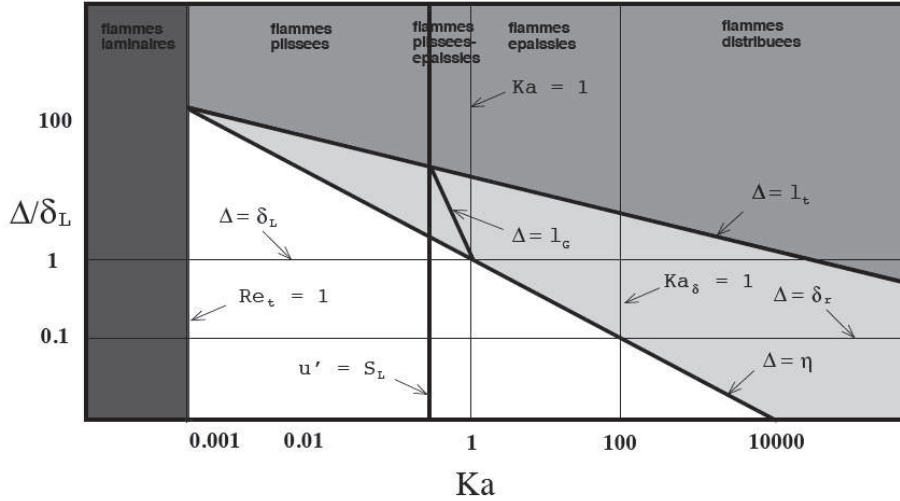


FIGURE 2.9 – Diagramme de combustion de Dusing et al. [58]. Les zones sont grisées en fonction du type de simulation considéré. Du plus foncé au plus clair : laminaire, RANS, LES, DNS.

- le domaine des flammes laminaires : lorsque la flamme est résolue, le taux de réaction turbulent issu du modèle doit tendre vers le taux de réaction laminaire. Lorsque la flamme est sous résolue, le modèle de combustion doit permettre de retrouver la vitesse de propagation correcte du front ;
- le domaine RANS : ici la flamme est complètement sous résolue et le modèle de combustion turbulente doit tenir compte du fait que le taux de réaction est moyenné ;
- le domaine LES : la flamme peut être complètement sous résolue (dans le régime des flammelettes) ou partiellement résolue, suivant la taille du filtre LES. Le modèle de combustion turbulente tient directement compte de l'échelle de la maille pour déterminer les taux de réaction filtrés. Deux effets doivent alors être pris en compte : la sous résolution de la flamme et le plissement de sous maille ;
- le domaine DNS : la flamme turbulente est quasiment toujours résolue, il n'y a donc, la plupart du temps, pas besoin d'un modèle de combustion turbulente pour fermer les termes sources chimiques.

En fonction des caractéristiques décrites ci-dessus, les modèles de combustion turbulente adaptés à la LES ou au RANS doivent répondre à des contraintes différentes. Par exemple, les modèles LES doivent explicitement tenir compte de la taille de coupure du filtre pour déterminer le niveau de résolution de la flamme. Les modèles de combustion RANS et LES doivent donc posséder des caractéristiques qui leurs sont propres, bien que des modèles similaires puissent être employés pour les deux approches.

2.3.2 Mise en application en RANS ou en LES

Lorsque l'on cherche à placer les résultats issus des simulations numériques sur un diagramme de combustion turbulente, il s'agit d'évaluer une échelle intégrale l_t et l'échelle de Kolmogorov η_K . Les fluctuations de vitesses liées à l_t (u') et à l'échelle du filtre Δ pour les simulations aux grandes échelles (u'_Δ) doivent également être calculées. Ainsi :

- en RANS, l'utilisation d'un modèle à deux équations donne directement :

$$l_t = \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega}, \quad (2.22)$$

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\beta^* k \omega} \right). \quad (2.23)$$

Si l'on postule que les fluctuations de vitesses sont isotropes, on a :

$$u' = \sqrt{\frac{2k}{3}}; \quad (2.24)$$

- en LES, l'évaluation de ces quantités est plus approximative, on va par exemple considérer que u' correspond aux fluctuations de vitesses résolues soit :

$$u' \approx \sqrt{\frac{2k_{resol}}{3}}; \quad (2.25)$$

avec $k_{resol} = 1/2 (\langle \widetilde{u_i u_i} \rangle - \langle \tilde{u_i} \rangle \langle \tilde{u_i} \rangle)$. u'_Δ est évaluée à partir d'une hypothèse de type Smagorinsky :

$$u'_\Delta = C_S \Delta \sqrt{2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}}. \quad (2.26)$$

L'estimation de l_t est basée sur l'hypothèse selon laquelle les échelles l_t et Δ sont situées dans la zone inertielle du spectre turbulent entraînant :

$$\varepsilon \approx \frac{u'^3}{l_t} \approx \frac{u'_\Delta{}^3}{\Delta} \rightarrow l_t \approx \left(\frac{u'}{u'_\Delta} \right)^3 \Delta \quad (2.27)$$

Enfin, de cette approximation on déduit η_K :

$$\eta_K \propto \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}. \quad (2.28)$$

2.4 Modélisation de la combustion turbulente

Dans les deux premières sections de ce chapitre, la structure des flammes laminaires ainsi que les différents régimes d'interaction entre la flamme et la turbulence ont été décrites. On s'intéresse dans cette section aux approches utilisées dans cette étude pour modéliser le terme de production/destruction d'espèce filtré $\tilde{\omega}_i$. Dans un deuxième temps, le modèle de flamme épaissie, implanté dans le cadre de cette thèse et utilisé dans la deuxième partie de ce mémoire, est présenté.

2.4.1 Cinétique chimique

Le taux de réaction chimique est évalué à partir de la loi d'action de masse. Si l'on considère que le processus chimique fait intervenir N_e espèces différentes pouvant être reliées entre elles via N_r réactions élémentaires, chacune de ces réactions peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sum_{i=1}^{N_e} \nu'_{ij} R_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_e} \nu''_{ij} R_i, \quad (2.29)$$

où ν'_{ij} et ν''_{ij} représentent respectivement les coefficients stœchiométriques directs et inverses liés à l'espèce R_i pour la réaction j .

La théorie cinétique des gaz permet de déterminer la forme prise par le terme source chimique massique de l'espèce i :

$$\dot{\omega}_i = \mathcal{M}_i \sum_{j=1}^{N_r} (\nu''_{ij} - \nu'_{ij}) \left(k_{fj} \prod_{i=1}^{N_e} C_i^{\nu'_{ij}} - k_{bj} \prod_{i=1}^{N_e} C_i^{\nu''_{ij}} \right), \quad (2.30)$$

où C_i est la concentration molaire de l'espèce i . Les vitesses de réaction directes k_{fj} sont évaluées suivant la loi d'Arrhenius en fonction de la température :

$$k_{fj} = A_j T^{-\beta_j} e^{-\frac{T_{a,j}}{RT}}. \quad (2.31)$$

Les paramètres des lois d'Arrhenius pour les vitesses de réaction directes sont généralement données. Les vitesses inverses, k_{bj} , doivent ensuite être recalculées à partir des constantes d'équilibre :

$$k_{eq} = k_f/k_b = \left(\frac{p_a}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^{N_e} (\nu''_{ij} - \nu'_{ij})} \exp \left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT} \right), \quad (2.32)$$

où $p_a = 101\,325$ Pa. ΔS_j^0 et ΔH_j^0 sont les variations d'entropie et d'enthalpie dues à la réaction j .

Ces égalités sont appliquées dans le cadre du modèle de flamme épaissie pour les grandeurs filtrées. De plus, dans la partie 3, aucun modèle d'interaction chimie-turbulence n'est pris en compte, on considère alors que $\tilde{\omega}_i$ est égal à $\dot{\omega}_i$ « laminaire ».

2.4.2 Modèle de flamme épaissie pour la LES

En régime de flammelette et de flamme épaissie on peut considérer que la flamme turbulente correspond à une flamme laminaire plissée. Or, une difficulté rencontrée dans les simulations aux grandes échelles de flammes turbulentes prémélangées est la suivante : l'épaisseur du front de flamme laminaire est très faible, de l'ordre du dixième de millimètre, soit beaucoup plus petit que les tailles de mailles rencontrées en LES qui sont en générale de l'ordre du millimètre. L'idée de ce modèle est donc épaissir le front de flamme afin qu'il y ait suffisamment de mailles pour le résoudre.

Modèle de flamme épaissie en laminaire

À la première section de ce chapitre on a vu que l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 pouvait être estimée de la façon suivante :

$$\delta_L^0 = \frac{D}{S_L^0}. \quad (2.33)$$

D'après l'analyse asymptotique ZFK (Zel'dovitch/Frank-Kamenetski, [212]), les relations suivantes existent entre l'épaisseur du front de flamme laminaire δ_L^0 et la vitesse de flamme laminaire S_L^0 :

$$S_L^0 \propto \sqrt{D\dot{\omega}_c}, \quad (2.34)$$

où D représente un coefficient de diffusion caractéristique et $\dot{\omega}_c$ le taux de production chimique d'une variable d'avancement (si on considère une chimie globale à une étape, celle-ci peut être assimilée à la concentration du carburant).

À partir de ces relations, Butler et O'Rourke [20] proposent une solution permettant de résoudre des flammes laminares prémélangées sur un maillage grossier en épaississant le front de flamme :

- en multipliant par un facteur F les coefficients de diffusion des espèces, ce qui aura pour effet d'épaissir la flamme du même facteur, l'épaisseur de la flamme laminaire épaissie notée $\check{\delta}_L$ vaut alors $F\delta_L^0$;
- en divisant par F les termes sources chimiques $\dot{\omega}_i$, de manière à garder une vitesse de flamme laminaire constante.

Les équations de conservation des espèces (1.2) et de l'énergie totale (1.7) sont donc ainsi modifiées :

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot (F \mathbf{J}_i) + \frac{\dot{\omega}_i}{F} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{u}) = \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) \mathbf{u}] - \nabla \cdot (F \mathbf{J}_{et}). \quad (2.36)$$

Pour une utilisation pratique en simulation numérique, on notera que le facteur F est une donnée de l'utilisateur, de telle manière que le front de flamme soit correctement résolu pour un maillage donné (typiquement, on trouve couramment des valeurs de l'ordre de 10-20). Cette approche est bien adaptée si le maillage est relativement uniforme. Une solution mieux adaptée aux maillages complexes est non pas d'imposer F mais plutôt n_f qui correspond aux nombres de points nécessaires à une bonne résolution du front de flamme laminaire, on a donc naturellement une relation entre n_f , F , Δ l'échelle du maillage et δ_L^0 l'épaisseur de front de flamme non épaissie :

$$F = \frac{n_f \Delta}{\delta_L^0}. \quad (2.37)$$

Modèle TFLES

Si on se place maintenant dans un contexte turbulent, la vitesse de propagation de la flamme est égale à $S_t \neq S_L^0$. Il est important que le modèle de combustion turbulente développé retrouve les propriétés de la flamme, et en particulier sa vitesse de propagation. Pour cette raison, lorsque la flamme turbulente est épaissie via le modèle TFLES, une correction des termes sources chimiques doit être apportée pour tenir compte des effets de la turbulence sur la vitesse de flamme. Colin *et al.* [34] introduisent ainsi un facteur d'efficacité E pouvant être défini comme le rapport entre le facteur de plissement de la flamme non épaissie $\Xi(\delta_L^0)$ et épaissie $\Xi(\check{\delta}_L)$ défini de façon à vérifier $ES_L^0 = S_t$:

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\check{\delta}_L)}. \quad (2.38)$$

Lorsque le facteur d'épaississement est fixé, de telle sorte que le front de flamme turbulent soit résolu par le maillage, les termes sources chimiques peuvent être évalués en utilisant directement les grandeurs

filtrées. De plus, comme on le montrera par la suite, E prend en compte directement le plissement sous-maille. Par conséquent les termes de diffusion turbulente d'espèces et de chaleur sont pris en compte dans la fonction E . Les équations filtrées de conservation des espèces (équation 1.31) et de l'énergie totale (équation 1.33) sont donc ainsi modifiées :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i) + \nabla \cdot (EF \bar{\mathbf{J}}_i) - \frac{E \tilde{\omega}_i}{F} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i^t, \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot [(\bar{\tau} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{u}}] + \nabla \cdot (EF \bar{\mathbf{J}}_{e_t}) = -\nabla \cdot \left(\mathbf{q}^t + \sum_{i=1, N_e} \bar{h}_i \mathbf{J}_i^t + \tau^t \tilde{\mathbf{u}} \right). \quad (2.40)$$

Modélisation de E

Des expressions détaillées de E , tenant compte de l'étirement local de la flamme et de l'extinction, ont été proposées par Colin *et al.* [34] (utilisée dans cette étude) ou Charlette *et al.* [25, 26] (également implantée dans le code). Dans le modèle de Colin *et al.*, le facteur d'épaississement E est évalué de la manière suivante [34] :

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\check{\delta}_L)} = \frac{1 + \Lambda \Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \Lambda \Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\check{\delta}_L}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}. \quad (2.41)$$

Dans cette expression, Γ est la fonction ITNFS modifiée proposée par Meneveau et Poinso [116] :

$$\Gamma\left(\frac{\Delta_e}{\delta_L}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}\right) = 0,75 \exp\left[-\frac{1,2}{(u'_{\Delta_e}/S_L^0)^{0,3}}\right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L}\right)^{\frac{2}{3}}. \quad (2.42)$$

L'échelle de filtrage Δ_e correspond à la plus grande échelle affectée par l'épaississement qui est de l'ordre de $\check{\delta}_L$ [34]. En pratique, le rapport Δ_e/Δ est fixé en général à 10. Les fluctuations de vitesse sous-maille à l'échelle Δ_e sont évaluées de manière simple dans CEDRE, en suivant une hypothèse de Smagorinsky, soit :

$$u'_{\Delta_e} = C_S \Delta_e \sqrt{2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}}, \quad (2.43)$$

avec C_S la constante du modèle de Smagorinsky. La principale limitation de cette approche est que dans ce cas E ne tend pas vers 1 en laminaire du fait de la dilatation thermique comme le souligne Colin *et al.* [34]. Il faut noter qu'une estimation plus précise est proposée dans l'article original à partir des tenseurs d'ordre 2 de gradients de vitesse¹. De plus, près des parois, la fluctuation sous-maille u'_{Δ_e} a tendance à être sur-évaluée. On choisit donc d'appliquer une fonction d'amortissement, u'_{Δ_e} est alors défini comme :

$$u'_{\Delta_e} = \left(1 - \exp\left(-\frac{d}{0,2\check{\delta}_L}\right)\right) C_S \Delta_e \sqrt{2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}}. \quad (2.44)$$

L'approche utilisée pour évaluer le coefficient Λ est basée sur l'approche employée dans le code **AVBP** [24] :

$$\Lambda = \beta \frac{2 \ln 2}{3C_{ms}(\Theta \sqrt{Re_t} - 1)} \quad \text{avec } C_{ms} = 0,28. \quad (2.45)$$

Dans cette expression, l'évaluation d'un Reynolds turbulent $Re_t = u' l_t / \nu$ associé à une échelle intégrale l_t est nécessaire, où u' correspond aux fluctuations associées à cette échelle intégrale. Afin de prendre en compte l'amortissement de la turbulence près des parois l_t est évalué de la façon suivante :

$$l_t = \min(0,4d; l_t^0). \quad (2.46)$$

1. il n'existe pas dans CEDRE de méthode permettant d'évaluer de façon consistante ce type d'opérateurs

l_t^0 étant modélisée de la façon suivante : si l'on considère que l'échelle l_t^0 se situe dans la zone inertielle de la cascade de Kolmogorov au même titre que Δ_e par conséquent :

$$\frac{u'^3}{l_t^0} = \frac{u'_{\Delta_e}{}^3}{\Delta_e}. \quad (2.47)$$

La fonction d'amortissement Θ défini dans l'équation 2.45 vérifie :

$$\Theta = \min \left[\left(\frac{\eta_K}{\delta_L^c} \right)^{2/3}, 1 \right], \quad (2.48)$$

où l'on voit apparaître l'échelle de coupure δ_L^c . Le rapport $\left(\frac{\eta_K}{\delta_L^c} \right)^{2/3}$ est évalué de la façon suivante

$$\left(\frac{\eta_K}{\delta_L^c} \right)^{2/3} = \sqrt{Re_t} \left(\frac{l_t}{\delta_L^0} \right)^{2/3} \frac{\ln 2}{2C_{ms}} \exp \left[-1.2 \left(\frac{u'}{S_L^0} \right)^{-0.3} \right]. \quad (2.49)$$

Modèle de flamme épaissie dynamique

Dans le cas où le prémélange n'est que partiel, le facteur d'épaississement ne doit être appliqué que dans la zone de flamme. C'est la raison pour laquelle on utilisera un facteur d'épaississement F égal à sa valeur nominale F_{max} égale à $n_f \Delta / \delta_L^0$ dans le front de flamme et 1 (c'est à dire non épaissi) hors du front de flamme. Cette méthode, baptisée Dynamic Thickened Flame (DTF) et proposée par Legier *et al.* [111] a l'avantage de ne modifier la diffusion thermique et moléculaire qu'au niveau de la zone où les taux de réaction sont relativement élevés. F est alors défini par :

$$F^\alpha = 1 + (F_{max} - 1) \alpha_{DTF} \quad (2.50)$$

où α_{DTF} est un senseur évalué de la façon suivante :

$$\alpha_{DTF} = \tanh \left(C_\alpha \frac{\Omega_{DTF}}{\Omega_{DTF}^0} \right) \quad (2.51)$$

et qui vaut 1 dans la flamme et 0 en dehors. Pour C_α , la valeur préconisée est $C_\alpha = 500$ ([163, 1]). Ω_{DTF} correspond à un pseudo-taux de réaction (en général évalué sur la base d'une chimie globale), dans le code CEDRE, Ω_{DTF} est ainsi défini :

$$\Omega_{DTF} = Y_F Y_O \exp \left(-0,5 \frac{T_a}{T} \right) \quad (2.52)$$

où T_a correspond à la température d'activation de la réaction directe pour un schéma cinétique global. On détermine alors la valeur de Ω_{DTF}^0 à l'aide d'un calcul de flamme laminaire de référence. Les équations filtrées deviennent alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_i) + \nabla \cdot (EF^\alpha \bar{\mathbf{J}}_i) - \frac{E \tilde{\omega}_i}{F^\alpha} &= -(1 - \alpha_{DTF}) \nabla \cdot \mathbf{J}_i^t \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot [(\bar{\tau} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{u}}] + \nabla \cdot (EF^\alpha \bar{\mathbf{J}}_{e_t}) &= -(1 - \alpha_{DTF}) \nabla \cdot \left(\mathbf{q}^t + \sum_{i=1, N_e} h_i \mathbf{J}_i^t + \tau^t \tilde{\mathbf{u}} \right) \end{aligned} \quad (2.53)$$

Chapitre 3

Une approche hybride RANS/LES : la DDES

Table des matières

3.1	La couche limite en simulation numérique	32
3.1.1	Approche stationnaire de la couche limite	32
3.1.2	Phénoménologie instationnaire de la couche limite	34
3.1.3	Prise en compte de la turbulence pariétale en simulation numérique	34
3.2	Présentation de la DDES	35
3.2.1	Justification théorique	35
3.2.2	De la DES97 à la DDES	36
	DES97 : principe et justifications théoriques	36
	DES97 : les limites	36
	Une nouvelle formulation, la Delayed Detached Eddy Simulation	37
	Variantes de la DES	38
3.2.3	Autres approches instationnaires prenant en compte la turbulence pariétale	38
	Amélioration des modèles de sous-maille	38
	LES avec prise en compte d'une modélisation à la paroi	39
	Autres approches hybrides RANS/LES	39
3.2.4	Classification des modèles	40
3.3	Implantation d'une approche DDES dans le code CEDRE	40
3.3.1	Rappels sur le modèle RANS $k - \omega$ SST	40
3.3.2	Utilisation du modèle $k - \omega$ SST pour la DES	42
	Modification de l'équation de k	42
	Variante pour la fonction de protection de la couche limite	43
3.3.3	Validation sur des couches limites attachées	43
	Couche limite supersonique à Mach 1,9	43
	Écoulement dans un canal plan à Mach 0,15	44
	Influence du choix de f_{DDES}	44
3.4	Champ d'application d'approches hybrides RANS/LES en écoulements ré-	
	actifs	46
3.4.1	Écoulements décollés en aval de couches limites attachées	46
	Cas d'élargissement brusque	46
	Obstacles	47
	Interactions onde de choc-couches limites	48
3.4.2	Prise en compte des transferts thermiques d'origine convective	48

Dans un premier temps, la phénoménologie des écoulements de couche limite est décrite. L'évolution de la vitesse par une approche stationnaire ainsi que des éléments concernant la dynamique instationnaire de la turbulence pariétale sont rappelées. Les motivations liées à l'introduction d'une approche hybride RANS/LES, la DDES, sont exposées ainsi que la formulation originale de la DDES. L'implantation de cette approche dans le code CEDRE et les premières validations sont ensuite détaillées. L'application de ce type d'approches en combustion turbulente est enfin abordée.

In a first time, the phenomenology of boundary layer flows is described. The evolution of the velocity by a stationary approach and some elements concerning the unsteady dynamics of wall turbulence are recalled. The motivations linked to the introduction of a hybrid RANS/LES are presented along the original formulation of the DDES approach. The implantation of this approach in the CEDRE code and the first validations are then detailed. The use of such methods for combustion applications is finally discussed.

3.1 La couche limite en simulation numérique

Avant d'aborder les approches hybrides RANS/LES il est nécessaire de rappeler brièvement la phénoménologie de la turbulence pariétale. Pour une description plus détaillée des phénomènes de couche limite, le lecteur est invité à se référer à Schiestel [177] ou encore Chassaing [27].

3.1.1 Approche stationnaire de la couche limite

La couche limite peut être divisée en une région interne, dominée par le cisaillement, et externe de type sillage. Les notions nécessaires à la description classique de la couche limite s'introduisent en se plaçant dans le plan (XY), avec la paroi orientée selon X. En notant y_0 l'ordonnée de la paroi dans ce repère, $\mathbf{u}(u, v, w)$ les composantes de la vitesse dans la couche limite et U_e la vitesse de l'écoulement extérieur, on peut alors définir l'épaisseur de la couche limite δ_{BL} (avec BL pour boundary layer) comme :

$$\delta_{BL} = y|_{u/U_e=0,99} - y_0, \quad (3.1)$$

Dans cette zone, les simplifications usuelles appliquées à l'équation de la quantité de mouvement pour un écoulement incompressible mènent à l'expression :

$$\mu \frac{\partial u}{\partial y} - \overline{\rho u'v'} = \tau_p, \quad (3.2)$$

où τ_p est le frottement à la paroi. On notera également que les gradients de pression longitudinaux sont négligés. Pour exhiber les propriétés universelles de la couche limite, il est nécessaire d'introduire les ordonnée et vitesse adimensionnées y^+ et u^+ définies par :

$$y^+ = y \frac{u_\tau}{\nu} \text{ et } u^+ = \frac{u}{u_\tau}, \text{ avec } u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_p}{\rho}} \quad (3.3)$$

La résolution de l'équation 3.2 fait apparaître quatre régions, représentées figure 3.1 :

- La **sous-couche visqueuse ou région linéaire** : dans cette zone très proche paroi ($y^+ < 5$), l'écoulement est complètement dominé par les effets de la viscosité moléculaire. L'écoulement est

laminaire, ce qui permet de négliger le terme de contrainte turbulente $\overline{\rho u'v'}$. L'équation (3.2) s'écrit alors :

$$\mu \frac{\partial u}{\partial y} = \tau_p \implies u^+ = y^+. \quad (3.4)$$

- La **zone tampon** : dans cette zone ($5 \leq y^+ \leq 40$), il y a compétition entre les termes visqueux et les tensions turbulentes. On ne peut donc pas faire d'analyse asymptotique de l'équation (3.2). D'un point de vue physique, c'est dans cette zone que la production d'énergie cinétique turbulente est maximale.
- La **zone logarithmique** : constituant la dernière partie de la région interne ($40 \leq y^+ \leq 100$ et $y < \delta_{BL}/4$), la production turbulente y est à peu près égale à la dissipation. La vitesse suit alors la loi suivante :

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (3.5)$$

où κ est la constante de Karman et la valeur de C dépend de la rugosité de la paroi : pour une paroi lisse, on prend $C = 5,2$.

- Enfin, la zone de sillage (« wake region » en anglais) correspondant à la région externe de la couche limite est celle sensible aux gradients de pression adverse. Une étude plus approfondie de la sensibilité des zones de sillage aux gradients de pression a été effectuée dans la thèse de Deck [41]. C'est également dans cette région que la viscosité turbulente modélisée au sens RANS croît pour atteindre son maximum vers $y^+ \approx 500$.

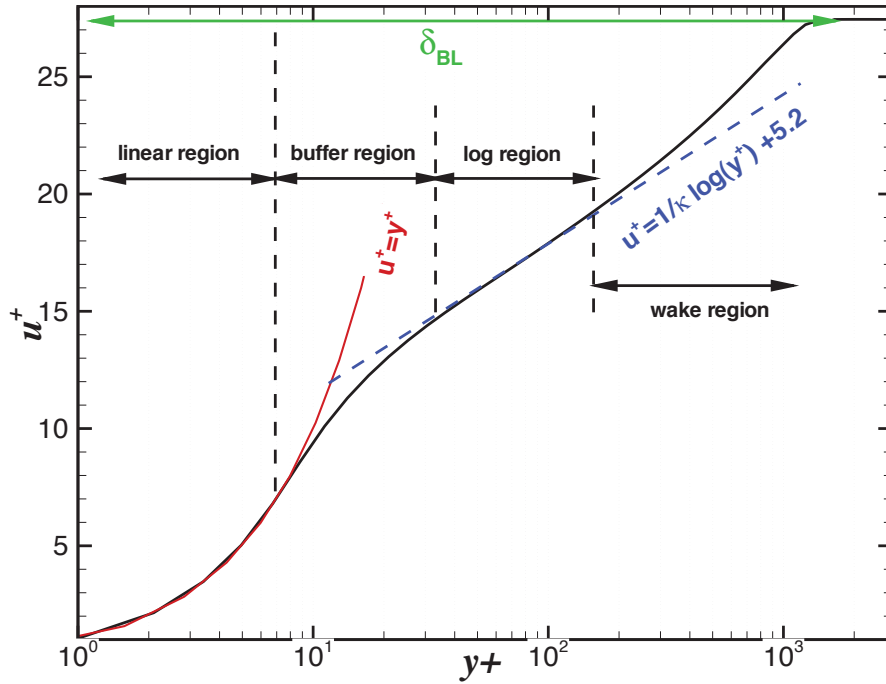


FIGURE 3.1 – Profil de vitesse dans une couche limite attachée en variables de paroi

Les raisonnements asymptotiques effectués dans le paragraphe précédent valent pour des écoulements incompressibles. Pour des écoulements compressibles, van Driest [55] introduit une vitesse transformée u^* , comme une moyenne pondérée par la masse volumique et définie par :

$$u^* = \int_0^u \sqrt{\frac{\rho}{\rho_p}} du \quad (3.6)$$

et montre qu'en variable de paroi, la vitesse transformée adimensionnée $u^{*+} = u^*/u_\tau$ suit la même évolution qu'en incompressible (en fonction de y^+).

3.1.2 Phénoménologie instationnaire de la couche limite

Les phénomènes proches-paroi possèdent une dynamique complexe, principalement étudiée à l'aide de simulations numériques directes. Depuis les observations de Kline *et al.* [101], on sait que l'on trouve contre la paroi des structures allongées dans le sens de l'écoulement. Ces tourbillons quasi-longitudinaux (TQL) ou « quasi-streamwise vortices » (QSV) en anglais, longs d'environ 1000 unités de paroi et larges de 50, correspondent à une alternance de zones de fluide à haute et basse vitesse, et servent de base à des tourbillons en forme d'épingle à cheveux. Dans la sous-couche visqueuse, où l'action de la viscosité moléculaire est forte, ces tourbillons forment un angle faible avec la paroi, d'environ 13° . Au delà, ils se redressent et forment alors un angle d'environ 45° avec la paroi, valeur qui peut être retrouvée par une analyse de stabilité. La forme de ces structures est illustrée figure 3.2.

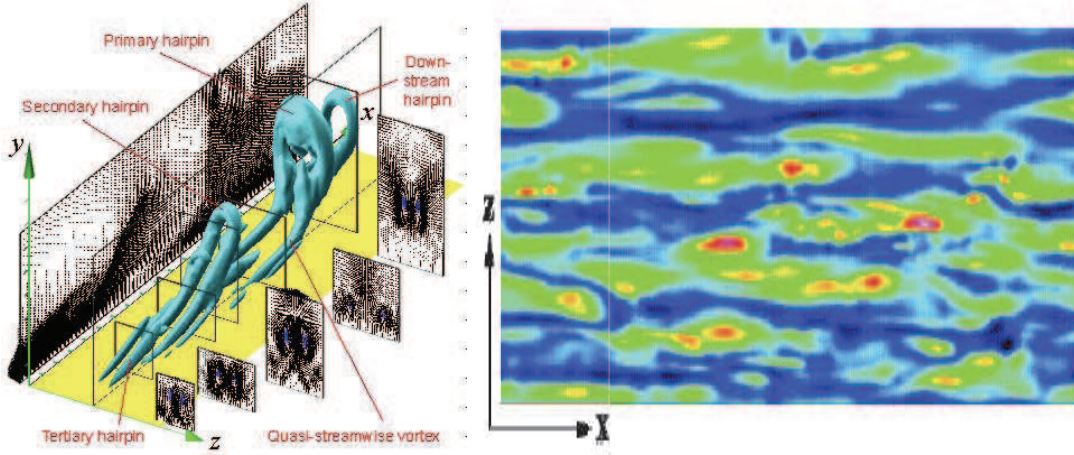


FIGURE 3.2 – Forme des structures turbulentes en proche paroi : à gauche, structures en forme d'épingle à cheveux « hairpins » et QSV, à droite structures allongées « streaks » tirées de [142]

Concernant le processus de production de la turbulence, maximal dans la zone tampon, celui-ci est dû selon Kim *et al.* [99] à un phénomène d'éclatement tourbillonnaire (« bursting process » en anglais). Ce phénomène peut lui même se décomposer en deux phases, selon le signe des fluctuations de vitesses dans le plan (XY) :

- La phase de balayage : $u' > 0$ et $v' < 0$.
- La phase d'éjection : $u' < 0$ et $v' > 0$.

Par ailleurs, Piomelli *et al.* [143] ont fait le lien entre ces deux phases et les transferts d'énergie inter-échelles dans la couche limite. Ainsi, dans la zone tampon, la cascade directe est associée à la phase d'éjection et la cascade inverse à la phase de balayage. Dans la zone logarithmique, les processus sont différents puisque tous les transferts énergétiques sont associés au phénomène d'éjection tourbillonnaire. Enfin les récents travaux de Jimenez *et al.* [94] ont notamment mis en évidence la dynamique des larges structures entre les différentes zones grâce à la DNS.

3.1.3 Prise en compte de la turbulence pariétale en simulation numérique

D'après les deux sous-sections précédentes, il apparaît que selon que l'on aborde la simulation numérique de la couche limite en stationnaire ou en instationnaire le comportement est très différent :

- En stationnaire, la couche limite suit un comportement universel. Ainsi, en RANS, des adaptations bas-Reynolds des modèles permettent de reproduire le profil de couche limite. Le raffinement, par conséquent fortement anisotrope, s'effectue uniquement dans la direction normale au plan formé par la paroi.
- En instationnaire la dynamique de la turbulence dans la couche limite est pilotée par des structures de tailles très fines et de formes allongées dans le sens de l'écoulement et dont la résolution nécessite un raffinement important dans toutes les directions. Ainsi, Piomelli, dans une revue des modèles de

paroi pour la LES [140] donne un ordre de grandeur du nombre de points nécessaires à la résolution en LES d'une couche limite attachée : $Re^{0,4}$ pour la couche externe et $Re^{1,8}$ pour la couche interne. Ainsi, si l'on cherche à effectuer une simulation LES d'écoulements à Reynolds élevé en cherchant à résoudre la turbulence pariétale on arrive rapidement à une taille de maillage prohibitive. D'un point de vue applicatif, Deck [41] a évalué à plus de 500 le ratio entre le nombre de points requis en LES et en RANS pour simuler un écoulement de tuyère surdétendue.

3.2 Présentation de la DDES

Cette section décrit les motivations, ainsi que la formulation de l'approche hybride RANS/LES mise en œuvre dans cette étude, la Delayed Detached Eddy Simulation.

3.2.1 Justification théorique

L'augmentation continue de la puissance de calcul disponible permet aujourd'hui d'utiliser, de plus en plus souvent, des approches instationnaires de type LES à la place des approches RANS classiques. Cette évolution de méthodologie simplifie la modélisation de la turbulence, qui ne porte plus que sur une partie réduite du spectre, et apporte la plupart du temps un gain significatif sur la qualité des résultats par rapport aux approches moyennées de type RANS. Ceci est particulièrement vrai si les phénomènes suivants ont un rôle moteur dans l'écoulement :

- structures anisotropes dépendant fortement de la géométrie ;
- mécanismes fondamentalement instationnaires (détachement tourbillonnaire, acoustique) ;
- mélange scalaire. On notera que ce dernier point est particulièrement important en combustion, car la prévision du mélange entre réactifs est fondamentale [156, 150].

Utilisée uniquement sur des cas académiques (THI, couches de mélanges, canal plan, flammes élémentaires) il y a une quinzaine d'années, on trouve aujourd'hui couramment des simulations dites « LES » de chambres de combustion réelles [11]. De nombreux types de flammes et de régimes de combustion ont été étudiés en LES comme le suggère une revue de Pitsch [144], l'utilisation de la LES en propulsion étant par ailleurs illustrée par Fureby [68].

Cependant, il faut noter que dans l'ensemble de ces cas, comme dans la quasi totalité des écoulements sur des configurations complexes, on parle de LES par abus de langage car seule une partie réduite du domaine de calcul possède la discrétisation nécessaire à la résolution des structures participant de façon active à la dynamique de l'écoulement. En particulier proche de la paroi, les maillages utilisés couramment en LES sur des chambres de combustion ne possèdent pas la discrétisation suffisante pour résoudre le type de structures turbulentes décrites au paragraphe 3.1.

Dans le cas des écoulements massivement décollés, lorsque le calcul détaillé de la dynamique et de la thermique pariétale ne sont pas nécessaires et influent peu sur l'écoulement loin des parois, ces LES localement sous-résolues au sens de la turbulence pariétale peuvent donner des résultats très satisfaisants. Précisons toutefois que les maillages doivent permettre de représenter correctement les zones de production dans les couches de mélange, où 15 points sont généralement nécessaires pour décrire l'épaisseur de vorticit  initiale¹. En revanche, si on se trouve en présence d'interactions complexes de type onde de choc/couche limite ou si l'objet de l'étude consiste à déterminer précisément les flux pariétaux (qu'il s'agisse du frottement ou du flux de chaleur), on se trouve face à cette alternative : soit faire un maillage LES de la couche limite (solution utilisée en aérodynamique externe [114], mais qui serait trop coûteuse à appliquer dans les chambres de combustion), soit hybrider la LES avec un autre type de modélisation moins coûteuse à la paroi. C'est dans ce cadre que s'inscrivent les approches de type DES qui combinent un modèle RANS² dans les couches limites attachées avec une modélisation de type LES pour les décollements. En effet, les modèles RANS ont bénéficié de nombreuses années de recherche pour affiner leur

1. avec des schémas d'ordre deux en espace

2. il faut noter qu'il s'agit d'une utilisation instationnaire du modèle, soit URANS

comportement bas Reynolds (*i.e.* proche paroi), ce qui les rend fiables dans le cas de la description d'une couche limite attachée canonique. Par ailleurs, ces modèles sont beaucoup moins coûteux car l'effort de discrétisation spatiale ne se fait que dans la direction normale à la paroi.

3.2.2 De la DES97 à la DDES

Dans un premier temps, il est important, pour comprendre le fonctionnement de la DDES utilisée dans cette étude, de rappeler la formulation originale proposée par Spalart *et al.* en 1997 [191], notée par la suite DES97.

DES97 : principe et justifications théoriques

La DES97 est conçue originalement à partir du modèle RANS à une équation de Spalart-Allmaras [189] permettant de modéliser la viscosité turbulente ν_t . Il est à noter que dans ce modèle, la contribution de l'énergie cinétique turbulente k au tenseur de Reynolds (équation 1.44) est négligée. L'équation de transport de ν_t est la suivante :

$$\nu_t = \hat{\nu} f_{v_1} \quad (3.7)$$

$$\frac{D\hat{\nu}}{Dt} = P_{\hat{\nu}} - \varepsilon_{\hat{\nu}} + D_{\hat{\nu}} \quad (3.8)$$

Dans ces équations f_{v_1} est définie dans la référence [189]. Cette fonction permet de prendre en compte l'amortissement des fluctuations de vitesse dû à la présence de la paroi. $D_{\hat{\nu}}$ correspond au terme de diffusion, $P_{\hat{\nu}}$ au terme de production et $\varepsilon_{\hat{\nu}}$ au terme de destruction, ces deux derniers termes vérifiant :

$$P_{\hat{\nu}} \propto |\tilde{\mathbf{S}}| \hat{\nu} \quad (3.9)$$

$$\varepsilon_{\hat{\nu}} \propto \left(\frac{\hat{\nu}}{d} \right)^2 \quad (3.10)$$

où d est la distance à la paroi et $\propto$ traduit la proportionnalité. Dans l'équation (3.9), on introduit la norme $|\tilde{\mathbf{S}}|$ de la partie symétrique du tenseur des gradients de vitesse définie comme :

$$|\tilde{\mathbf{S}}| = \sqrt{2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}} \quad (3.11)$$

L'approche DES consiste à remplacer la distance à la paroi d figurant dans l'équation (3.10) par $\hat{d} = \min(d, C_{DES}\Delta)$ où Δ est l'échelle locale du maillage prise égale à $\max(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$ si l'on considère des mailles parallélépipédiques. Ainsi, près de la paroi où $d \leq \Delta$ c'est bien le mode RANS qui est retenu, en revanche lorsque $d \geq \Delta$, on obtient $\hat{d} = C_{DES}\Delta$. Dans ce cas, à distance suffisante de la paroi et dans une hypothèse d'équilibre entre production et dissipation :

$$|\tilde{\mathbf{S}}| \hat{\nu} \propto \left(\frac{\hat{\nu}}{C_{DES}\Delta} \right)^2 \Rightarrow \hat{\nu} \propto (C_{DES}\Delta)^2 |\tilde{\mathbf{S}}| \quad (3.12)$$

On obtient ainsi une expression pour la viscosité turbulente $\hat{\nu}$ qui se rapproche d'une formulation de type Smagorinsky, $\nu_{SGS} = (C_s\Delta)^2 |\tilde{\mathbf{S}}|$, utilisée en LES [185]. La constante C_{DES} a été calibrée à 0,65 sur un calcul de Turbulence Homogène Isotrope.

Enfin, il faut noter que l'approche DES est une technique qui peut être adaptée à différents modèles RANS assez facilement [193].

DES97 : les limites

On peut remarquer que dans l'approche DES97, la transition entre les modes RANS et LES (communément qualifiée de « zone grise » – Grey Region en anglais –) est uniquement imposée par le maillage par

le biais de l'échelle locale Δ . Cette remarque implique que la réalisation de maillages pour la DES relève d'une véritable expertise préalable comme le souligne Spalart dans [187] ce qui limite la prédictivité du modèle. De plus, la DES97 est également inadaptée lorsque les mailles dans la couche limite sont telles que $\Delta < d$ (dans des cellules situées en coin de maillage par exemple, où Δ_x et Δ_z peuvent être petits). Dans ce cas, on observe une transition précoce en LES dans la couche limite, alors que le maillage n'est pas suffisamment fin pour la résolution des structures pariétales décrites au paragraphe 3.1.2.

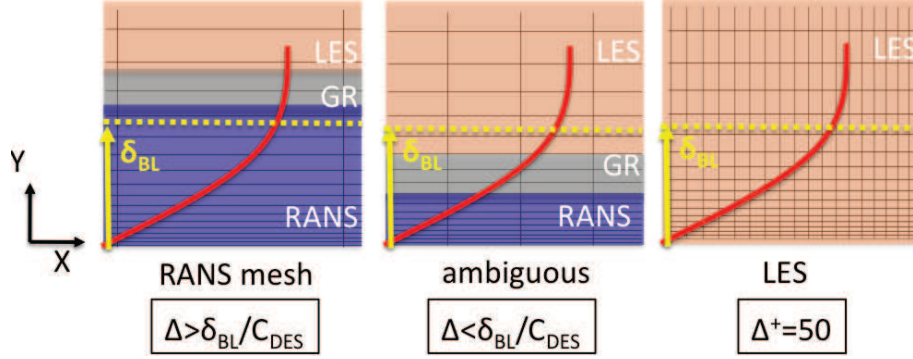


FIGURE 3.3 – Différents types de maillages de couche limite et délimitation des zones associées aux modes RANS et LES de la DES et de la zone grise, profil de vitesse

La figure 3.3 illustre trois cas de répartitions de mailles dans le plan (X, Y) pour différentes distributions de points en X dans la couche limite. Dans cette figure on considère que la taille de maille dans la direction Z , Δ_z , est égale à Δ_x pour tout les cas présentés. Les zones correspondant aux deux modes de l'approche DES à savoir RANS en proche paroi et LES ailleurs, ainsi que la zone grise où $\Delta \approx \delta_{BL}/C_{DES}$ sont reproduites sur ces maillages. Si le maillage utilisé correspond à un maillage qualifié de RANS où $\Delta_x > \delta_{BL}$ l'intégralité de la couche limite est traitée en RANS. En revanche lorsque Δ_x est plus faible, à l'approche de ruptures de géométrie ou dans des régions où de forts gradients de pression dans la direction transverse sont à prévoir, la transition vers la LES est plus précoce. Ce phénomène, connu sous le nom de « Modelled Stressed Depletion » [168] (MSD), conduit alors à la relaminarisation artificielle de la couche limite. Le troisième maillage vérifie les critères permettant de résoudre la turbulence pariétale en LES.

Une nouvelle formulation, la Delayed Detached Eddy Simulation

Afin de remédier aux problèmes évoqués précédemment, une nouvelle version de la DES est proposée par Spalart *et al.* en 2006 [190], la Delayed Detached Eddy Simulation (DDES). Cette nouvelle appellation vient de l'introduction d'une fonction f_{DDES} visant à empêcher le passage prématuré du modèle en mode LES lorsque la zone de transition est située dans la couche limite.

La fonction f_{DDES} proposée par Spalart *et al.* est définie par :

$$f_{DDES} = 1 - \tanh \left[(8r_{DDES})^3 \right] \quad (3.13)$$

$$\text{avec, } r_{DDES} = \frac{\nu_t + \nu}{\sqrt{\nabla \tilde{\mathbf{u}} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} \cdot \kappa^2 d^2}} \quad (3.14)$$

Le comportement global de la fonction f_{DDES} est le suivant : dans la couche limite, jusqu'au pic de viscosité turbulente modélisée ν_t , $f_{DDES} = 0$ et ailleurs $f_{DDES} = 1$. Cette fonction est utilisée pour calculer le paramètre $\hat{d}$ qui remplacera d dans l'équation (3.10) et qui est défini par :

$$\hat{d} = d - f_{DDES} \times \max(0, d - C_{DES}\Delta) \quad (3.15)$$

Après analyse de cette expression, on peut remarquer que :

- pour $f_{DDES} = 0$, $\hat{d} = d$ qui est l'échelle RANS ;
- pour $f_{DDES} = 1$, on a $\hat{d} = \hat{d}_{DES97} = \min(d, C_{DES}\Delta)$ qui correspond à l'échelle DES.

Pour cette approche à une équation, l'échelle RANS est directement la distance à la paroi. Nous verrons au chapitre suivant que cette échelle sera déterminée autrement pour le modèle $k - \omega$ SST présenté à la section 3.3. Dans la suite du mémoire la fonction originale f_{DDES} proposée par Spalart *et al.* sera notée $f_{d_{Spalart}}$.

Variantes de la DES

Depuis 1997 et sa première formulation, la DES a beaucoup évolué afin d'éviter au maximum le phénomène de MSD :

- Afin de s'assurer que les zones attachées de l'écoulement soient modélisées en RANS et que la DES ne soit activée que dans les zones de décollement, Deck [42] propose une méthode zonale (Zonal DES) qui permet à l'utilisateur de prédéfinir les zones dans lesquelles chacune des approches est active. Cette méthode est particulièrement appropriée aux écoulements de culots [50, 206, 182, 181] et a donné des résultats convaincants pour des jets propulsifs [28] et une configuration de profil d'aile hypersustentée [43]. Il est à noter également que la taille du filtre employé est prise égale à la racine cubique du volume de la cellule.
- La protection de la couche limite ainsi que la capacité du modèle à générer de la turbulence résolue lors du basculement du RANS à la LES sont des points sur lesquels la DDES présente encore des faiblesses. C'est pour cela que des variantes à la DDES ont été proposées, en particulier une approche combinant des apports de la DDES et de la ZDES [160, 159] (Extended DDES).
- Le dernier point d'amélioration concerne l'introduction de turbulence résolue au sein des zones (U)RANS. En effet, en DES classique, dans la zone grise, lors du passage du modèle (U)RANS à la LES, la turbulence modélisée ne se transforme pas forcément en turbulence résolue. Cela a pour effet d'une part de retarder les instabilités dans une couche de mélange en développement spatial (dans un décollement massif par exemple), d'autre part de retarder le point de décollement dans les cas où le celui ci n'est pas fixé par la géométrie du problème. Enfin, la prise en compte de dispositifs de contrôle de la couche limite en DES classique est impossible. Ainsi, c'est dans cette optique que les approches Improved DDES (IDDES) [180] et Stimulated DES (SDES) [51, 71] sont introduites. En IDDES, lorsque les conditions aux limites sont instationnaires et que le maillage est suffisamment fin pour capter les tourbillons de proche paroi, la IDDES permet de basculer vers une approche de type LES avec une correction proche paroi. En SDES, la méthode utilisée est basée sur la méthode SEM (Synthetic Eddy Method) [134] qui consiste à superposer au champ (U)RANS des tourbillons résolus.

Pour aller plus loin, le lecteur est invité à consulter l'article de Spalart [188] présentant une revue synthétique de la DES et de ses dérivées ainsi que les perspectives de développement de ce type de modèles.

3.2.3 Autres approches instationnaires prenant en compte la turbulence pariétale

Il existe d'autres méthodes permettant de corriger la faiblesse de la LES de ne pas pouvoir résoudre la turbulence pariétale à un coût raisonnable pour des Reynolds élevés. Deux axes de recherche sont par conséquent suivis : l'un consiste à corriger le comportement des modèles sous-maille de la LES afin de restituer un comportement canonique des profils de vitesse dans les couches limites attachées. L'autre vise à introduire un modèle ad-hoc pour les écoulements pariétaux (Piomelli et Balaras [141]). Selon la classification de Piomelli [140], les approches hybrides RANS/LES font partie de cette seconde catégorie. Par souci de brièveté, seuls les principes généraux de ces méthodes (autres que la DES) sont présentés.

Amélioration des modèles de sous-maille

L'objectif de ces approches est de s'assurer que la viscosité sous-maille décroisse suffisamment près de la paroi tout en conservant un comportement proche du modèle de Smagorinsky (à savoir $\nu_{SGS} = (C_s \Delta)^2 |\tilde{\mathbf{S}}|$) loin des parois. Parmi ces approches, l'approche « Dynamique » consiste à évaluer C_s en

fonction des gradients de vitesse comme le proposent Germano *et al.* [76]. L'approche de Wall Adapted Local Eddy Viscosity (WALE), proposée par Nicoud *et al.* ou l'approche de Vreman [204] vise à remplacer $|\tilde{\mathbf{S}}|$ par une expression basée sur les tenseurs de vitesses mais qui tend vers 0 près des parois.

LES avec prise en compte d'une modélisation à la paroi

Le lecteur est invité à consulter l'article de Piomelli [140] qui décrit l'ensemble des modèles proche paroi utilisés en LES (Wall Layer Models for LES – WMLES – en anglais). Parmi ces modèles on peut citer la méthode basé sur les lois de couche limite à l'équilibre, qui est la moins coûteuse, ou d'autres approches zonales comme les modèles à deux couches.

Autres approches hybrides RANS/LES

Bien que la DES se révèle être l'approche hybride RANS/LES la plus employée aujourd'hui, Il existe un grand nombre de méthodes permettant de basculer d'une modélisation URANS à la paroi à une LES dans les zones décollés. Une revue de certaines de ces approches étant effectuée dans la thèse de Deck [41], le lecteur est invité à s'y référer. Plus récemment, Frohlich et von Terzi [64] en font une revue mise à jour. Parmi ces méthodes il est intéressant de citer :

- La **Very Large Eddy Simulation** (VLES), originalement introduite par Speziale [192] et ses variantes. Cette approche consiste à exprimer le tenseur de Reynolds de la façon suivante :

$$\tau_{VLES}^t = f\left(\frac{\Delta}{\eta_K}\right) \tau_{RANS}^t \quad (3.16)$$

où τ_{RANS}^t correspond au tenseur évalué à partir du modèle RANS et $f(\Delta/\eta_K)$, où η_K est la longueur de Kolmogorov (évaluée à partir du modèle RANS), avec f égal à 1 dans les couches limites attachées.

- Une autre technique dite de **Scale-Adaptative Simulation** (SAS) développée par Menter [118] consiste à utiliser l'échelle de von Karman, notée L_{SAS}^{VK} , conçue pour s'adapter à la taille des structures turbulentes. Cette échelle est définie comme :

$$L_{SAS}^{VK} = \left| \frac{\nabla \tilde{\mathbf{u}} : \nabla \tilde{\mathbf{u}}}{\nabla^2 \tilde{\mathbf{u}} : \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}} \right|. \quad (3.17)$$

- Des approche hybride RANS/LES de seconde génération originalement introduites par Labourasse et Sagaut consistent à décomposer les variables de l'écoulement de la façon suivante :

$$\Psi = \underbrace{\langle \Psi \rangle}_{RANS} + \underbrace{\Psi^c}_{correction} + \Psi^{SGS} \quad (3.18)$$

L'idée de ce modèle hybride est de résoudre les équations pour l'écoulement moyen ($\langle \Psi \rangle$) et de corriger l'écoulement moyen en ajoutant les fluctuations résolues (Ψ^c) lorsque le maillage est suffisamment fin ce grâce à une fonction de basculement. Il faut également noter que ce type de formalisme est également utilisé avec une approche Variational Multiscale pour la LES (VMS-LES) par Salvetti *et al.* [174]. L'approche VMS, introduite par Hughes *et al.* a pour principe de séparer les échelles entre très grandes échelles et moyennes échelles sur lesquelles la dissipation sous-maille s'applique. Pour plus de détails concernant ce modèle, le lecteur est invité à consulter les références [91] et [92].

- Enfin, Davidson et Peng ont développé une approche RANS/LES basée d'une part sur le modèle $k - \omega$ pour le RANS et sur un modèle à une équation pour la viscosité sous-maille [39]. Récemment, un modèle assez similaire à la DES est également proposé [38], s'appuyant sur un modèle RANS basé sur des similarités d'échelles.

3.2.4 Classification des modèles

Sagaut *et al.* [168, 167] proposent une représentation schématique (reproduite à la figure 3.4) mettant en évidence à la fois le coût de calcul et le niveau de physique qui est résolu, pour les approches DNS, LES, RANS et hybride RANS/LES.

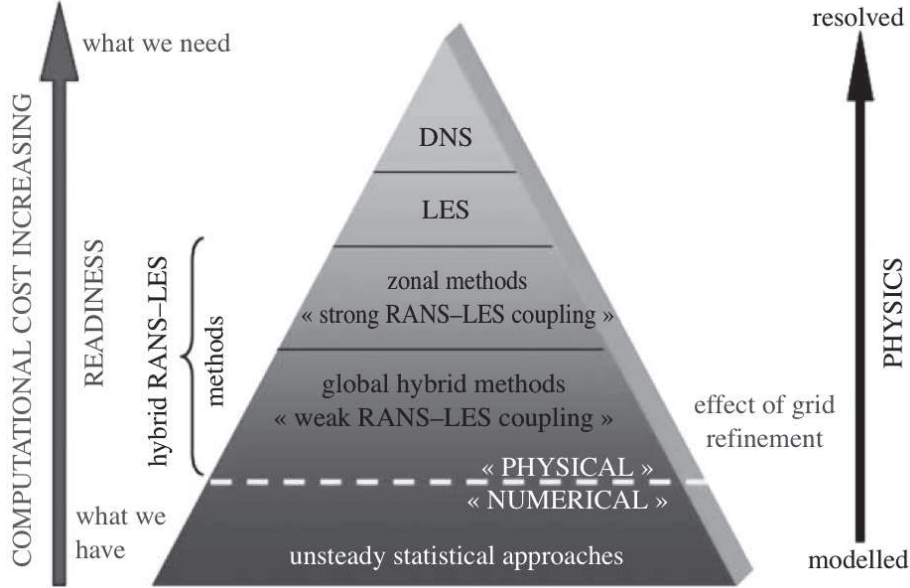


FIGURE 3.4 – Triangle mettant en relation le coût du calcul (à gauche) à la physique résolue (à droite) pour les différentes approches (Sagaut *et al.* [168, 167])

3.3 Implantation d'une approche DDES dans le code CEDRE

Dans cette section, on décrit l'adaptation du modèle $k - \omega$ SST présent dans le code CEDRE pour obtenir une méthode hybride RANS/LES de type DDES. Une étude préliminaire a montré que, parmi les différents modèles proposés dans le code CEDRE ($k - \epsilon$, $k - \omega$), le modèle $k - \omega$ donne les meilleurs résultats en écoulement de couche limite et pour une interaction onde de choc couche limite, avec une qualité comparable à celle du modèle de Spalart-Allmaras (SA) [189] couramment utilisé en aérodynamique (pour plus de détails, on peut se référer à l'annexe B). On rappelle que l'intérêt d'un modèle à deux équations est, d'une part, de bénéficier d'une précision accrue et d'autre part d'avoir accès directement à un temps turbulent à partir de la pseudo-dissipation ω ce qui est un net avantage pour la construction des modèles de combustion turbulente.

3.3.1 Rappels sur le modèle RANS $k - \omega$ SST

Ce modèle, décrit par Menter [117] propose une fermeture à deux équations pour le calcul de la viscosité turbulente ν_t . Les deux scalaires transportés par le code CEDRE sont l'énergie cinétique turbulente k et la « pseudo-dissipation » ω . La viscosité turbulente est alors définie comme :

$$\nu_t = \frac{k}{\omega} \quad (3.19)$$

On notera que la « pseudo-dissipation » ω peut également être reliée à la dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ par la relation suivante :

$$\omega = \frac{\epsilon}{\beta^* k} \quad \text{avec} \quad \beta^* = 0,09 \quad (3.20)$$

L'idée fondatrice du modèle $k - \omega$ SST est de combiner en un seul modèle les avantages du modèle $k - \omega$ [211] (pour ses capacités à reproduire des couches limites attachées) et ceux du modèle $k - \varepsilon$ [95], moins sensible aux conditions aux limites sur les grandeurs turbulentes que le modèle $k - \omega$. Ce modèle permet une transition continue entre $k - \omega$ proche de la paroi et $k - \varepsilon$ en dehors de la couche limite via une fonction de raccord F_1 . Le modèle introduit également une limitation sur la viscosité turbulente permettant d'éviter la surestimation du cisaillement turbulent dans les écoulements en présence d'un gradient de pression adverse. Les termes sources de k et ω s'écrivent :

$$S_k = \hat{P}_k - \varepsilon \quad (3.21)$$

$$S_\omega = \frac{\gamma}{\nu_t} P_k - \beta \omega^2 + (1 - F_1) CD_{k\omega} \quad (3.22)$$

avec :

$$P_k = \nu_t |\tilde{\mathbf{S}}|^2 \quad (3.23)$$

$$\hat{P}_k = \min (P_k, c_l; \varepsilon) \quad (3.24)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\sigma_\omega \frac{1}{\omega} \nabla k \cdot \nabla \omega \right) \quad (3.25)$$

$$\varepsilon = \beta^* \omega k \quad (3.26)$$

Dans les relations précédentes, les constantes génériques c du modèle sont des fonctions de F_1 :

$$c = F_1 c_1 + (1 - F_1) c_2 \quad (3.27)$$

avec :

$$\sigma_{k1} = 2,0; \quad \sigma_{\omega 1} = 2,0; \quad \gamma_1 = 0,5532; \quad \beta_1 = 0,075 \quad (3.28)$$

$$\sigma_{k2} = 1,0; \quad \sigma_{\omega 2} = 1,168; \quad \gamma_2 = 0,4403; \quad \beta_2 = 0,0828 \quad (3.29)$$

Les constantes indépendantes de F_1 sont :

$$\kappa = 0,41 \quad \text{et} \quad c_l = 10 \quad (3.30)$$

La viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max (a_1 \omega, F_2 |\tilde{\mathbf{S}}|)} \quad \text{avec} \quad a_1 = 0,31 \quad (3.31)$$

La fonction F_2 permet d'éviter à la limitation SST de s'appliquer en dehors des couches limites.

Les fonctions de raccord F_1 et F_2 sont définies de la manière suivante :

$$F_1 = \tanh (arg_1^4) \quad (3.32)$$

$$arg_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500 \nu}{d^2 \omega} \right), \frac{4 \sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} d^2} \right] \quad (3.33)$$

$$F_2 = \tanh (arg_2^2) \quad (3.34)$$

$$arg_2 = \max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega d}, \frac{500 \nu}{d^2 \omega} \right) \quad (3.35)$$

Les conditions limites à la paroi pour les grandeurs turbulentes sont les suivantes :

$$\omega = (\omega_{vis}^2 + \omega_{log}^2) \quad (3.36)$$

$$\omega_{vis} = \frac{6 \nu}{0,075 d^2} \quad (3.37)$$

$$\omega_{log} = \frac{u_\tau}{0,3 \kappa d} \quad (3.38)$$

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.39)$$

où ω_{vis} et ω_{log} correspondent respectivement à la contribution de la sous-couche visqueuse et de la zone logarithmique, $\mathbf{n}$ est le vecteur unitaire normal à la paroi.

3.3.2 Utilisation du modèle $k - \omega$ SST pour la DES

Modification de l'équation de k

L'adaptation de l'échelle de longueur DDES à un modèle à deux équations de transport s'appuie sur la modification suggérée par Strelets [193] pour le modèle SST. Pour ce dernier modèle, l'échelle de longueur devient $l_{RANS} = \sqrt{k}/(\beta^*\omega)$. On rappelle que $l_{RANS} = d$ pour le modèle SA. L'échelle précédente intervient dans de nombreux termes du modèle $k - \omega$ SST. Toutefois dans une approche DDES, seul le terme de dissipation est modifié selon :

$$\varepsilon_{RANS} = \beta^* \omega k = \frac{k^{3/2}}{l_{RANS}} \rightarrow \varepsilon_{DDES} = \frac{k^{3/2}}{l_{DDES}} \quad (3.40)$$

Ainsi :

$$l_{DDES} = l_{RANS} - f_{DDES} \times \max(0, l_{RANS} - C_{DES}\Delta) \quad (3.41)$$

De façon analogue à l'équation (3.27), on a :

$$C_{DES} = (1 - F_1) \times C_{DES}^{k-\varepsilon} + F_1 \times C_{DES}^{k-\omega} \quad (3.42)$$

où $C_{DES}^{k-\varepsilon}$ et $C_{DES}^{k-\omega}$ valent respectivement 0,61 et 0,78. L'échelle de sous-maille Δ est prise égale à $\Delta = \sqrt[3]{V}$ où le volume V est égal à $\Delta_x \Delta_y \Delta_z$. Cette définition de Δ permet une déstabilisation plus rapide de la couche de mélange sur un cas d'écoulement de culot traité en ZDES (voir Simon *et al.* [181], par rapport à sa définition classique à savoir $\max_{(x,y,z)}(\Delta_{x,y,z})$.

On peut alors démontrer que, loin des parois – lorsque le terme de production d'énergie cinétique turbulente s'équilibre avec le terme de destruction – le modèle DDES en mode LES fournit une viscosité turbulente de type Smagorinsky. L'hypothèse d'équilibre s'écrit :

$$\hat{P}_k = \varepsilon \quad (3.43)$$

Elle permet d'exprimer ν_t à partir des équations (3.23) et (3.26) sous la forme :

$$\nu_t = \frac{k^{3/2}}{l_{RANS}|\tilde{\mathbf{S}}|^2} \quad (3.44)$$

Or, loin des parois, on a :

$$\sqrt{k} = \frac{\nu_t}{\beta^* l_{RANS}} \quad (3.45)$$

En combinant (3.44) et (3.45), on obtient :

$$\nu_t = \beta^{*3/2} l_{RANS}^2 |\tilde{\mathbf{S}}| \quad (3.46)$$

Dans la zone LES où l_{RANS} tend vers $C_{DES}\Delta$, on obtient finalement :

$$\nu_t = \beta^{*3/2} C_{DES}^2 \Delta^2 |\tilde{\mathbf{S}}| \quad (3.47)$$

Cette expression nous donne l'équivalence avec un modèle sous-maille de type Smagorinsky où $C_S^2 = \beta^{*3/2} C_{DES}^2$. On note en particulier que $C_{DES} = 0,61$ conduit à une valeur de C_S égale environ à 0,1. Cette valeur sera celle utilisée sur le cas de validation pour comparer les approches DDES et LES pour le cas de la marche descendante.

Variante pour la fonction de protection de la couche limite

Pour imposer que les zones hors couches limites marquées par $f_{DDES} = 1$ soient traitées en mode LES, on peut envisager d'autres façons d'évaluer f_{DDES} . Dans l'approche hybride proposée par Fan *et al.* [61], la fonction Γ utilisée pour assurer le passage de l'approche RANS, activée dans les couches limites attachées, et LES loin des parois est une modification de la fonction F_1 du modèle SST :

$$\Gamma = \tanh(\eta^4), \eta = \frac{\max(\tau_1, \tau_2)}{\omega} \quad (3.48)$$

$$\tau_1 = \frac{500\nu}{d^2}, \tau_2 = \frac{\sqrt{k}}{C_\mu d} \quad (3.49)$$

Il s'avère que la fonction $f_{DDES} = 1 - \Gamma$ proposée ci-dessus est mieux adaptée pour traiter les couches limites attachées que la fonction de base donnée par l'équation (8.10). En effet, la fonction F_1 , introduite dans le modèle SST de Menter, sert à basculer du modèle $k - \omega$ classique dans les couches limites au modèle $k - \varepsilon$ en dehors des couches limites. L'utilisation de cette fonction est également proposée dans [119]. Dans le code CEDRE l'utilisateur a la possibilité d'utiliser, au choix, la fonction proposée par Spalart *et al.* [190] ($f_{d_{Spalart}}$) ou $1 - F_1$.

3.3.3 Validation sur des couches limites attachées

Un point important concernant la validation de l'approche DDES est de vérifier que la transition entre les zones RANS et LES s'effectue correctement. Dans un premier temps, on le vérifie pour une couche limite pleinement développée dans un écoulement supersonique à Mach 1,9 ; puis pour un écoulement de canal plan à Mach 0,15.

Couche limite supersonique à Mach 1,9

Le calcul de l'écoulement supersonique dans une tuyère à Mach 1,9 réalisé avec le modèle SST de CEDRE [131] est comparé au résultat obtenu avec le modèle SA [189] du code de l'Onera Flu3M [79]. Le maillage utilisé sur ce cas et la comparaison des profils de couche limite sont présentés en annexe B. L'évolution de la valeur de la fonction $f_{d_{Spalart}}$ est pilotée entre autres par l'évolution des gradients de vitesse $\nabla \tilde{u}$ dans la couche limite. Il apparaît donc intéressant, dans un premier temps, de comparer les produit contractés des gradients de vitesse $\nabla \tilde{u} : \nabla \tilde{u}$ (figure 3.5). Sur cette figure on peut constater que les profils obtenus pour les deux approches sont en relativement bon accord et prédisent une décroissance linéaire pour $y^+ > 20$.

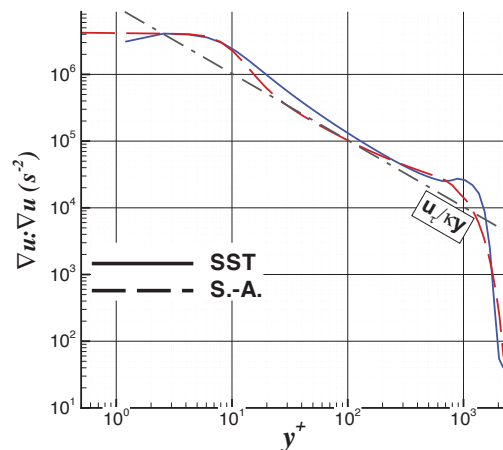


FIGURE 3.5 – Evolution du produit contracté des gradients de vitesse dans la couche limite pour les modèles SST et S.A.

L'évolution des grandeurs utilisées dans l'approche DDES, à savoir les échelles l_{RANS} et l_{DDES} pour le modèle SST, $\hat{d}$ et d pour le modèle SA, est illustrée respectivement aux figures 3.6 et 3.7. Les profils de $1 - f_{DDES}$, μ_t/μ ainsi que $C_{DES}\Delta$ sont reportés sur ces figures. L'intérêt de la fonction f_{DDES} , comme on peut le remarquer sur les figures 3.6 et 3.7, est de protéger la couche limite et de retarder un basculement précoce en mode LES dans la couche limite attachée.

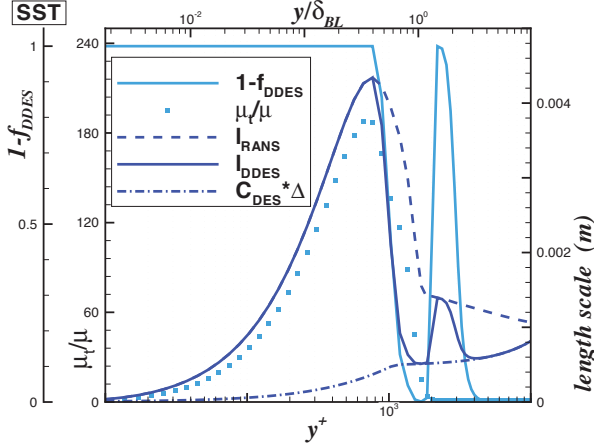


FIGURE 3.6 – Grandeurs DDES dans la couche limite de plaque plane pour le modèle SST, $f_{DDES} = f_{d_{Spalart}}$, $\Delta = \sqrt[3]{V}$

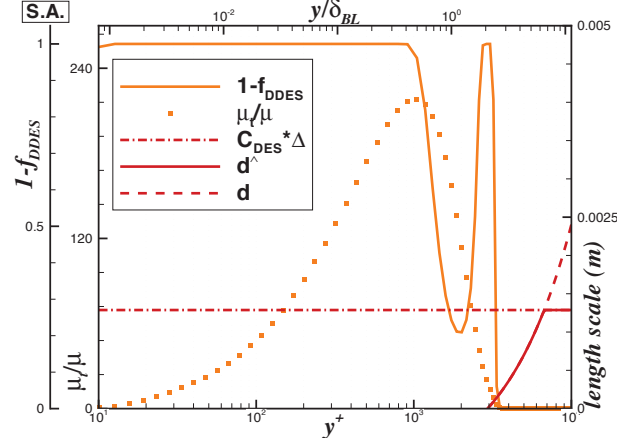


FIGURE 3.7 – Grandeurs DDES dans la couche limite de plaque plane pour le modèle S.A., $f_{DDES} = f_{d_{Spalart}}$, $\Delta = \max_{x,y,z} \Delta_{x,y,z}$

Sur ces figures, on constate que, compte tenu de sa définition, la fonction f_{DDES} permet de bien positionner le basculement du RANS vers la LES en imposant l'approche RANS dans la couche limite attachée jusqu'au pic de viscosité turbulente.

Écoulement dans un canal plan à Mach 0,15

Outre les résultats obtenus dans le divergent de la tuyère en régime supersonique, il est intéressant d'observer l'évolution des grandeurs liées au modèle DDES sur une couche limite obtenue dans un canal plan, représentatif de l'alimentation du foyer A3C³. D'une manière générale, on peut observer sur la figure 3.8 que la fonction f_{DDES} suit le comportement attendu. Il est notamment intéressant de voir que si la DES97 avait été utilisée sur ce cas, le point de basculement aurait été localisé très proche de la paroi. Les profils de vitesse obtenus par la DDES et par la LES formulée de manière classique dans le code CEDRE avec le modèle de Smagorinsky [185] ont un comportement très différent. Pour celui obtenu en LES, on peut remarquer d'une part un déficit de vitesse dans la zone proche paroi au niveau du frottement sur les profils de vitesse et d'autre part l'absence d'une zone logarithmique (pas de partie linéaire au delà de la sous-couche visqueuse dans le profil obtenu en LES). En d'autres termes, la couche limite (figure 3.9) est quasi laminaire car le maillage (de type RANS) ne permet pas de résoudre les structures turbulentes présentes dans la couche limite. De plus, les profils de vitesse et de viscosité turbulente dans la couche limite obtenus pour la DDES sont identiques à ceux obtenus en RANS dans la zone protégée par la f_{DDES} , ce qui était attendu. Il faut noter que les résultats présentés ont été obtenus avec $f_{DDES} = 1 - F_1$.

Influence du choix de f_{DDES}

Pour illustrer le niveau de protection de la couche limite en fonction du choix de la fonction f_{DDES} . L'évolution de la viscosité turbulente modélisée dans la couche limite est illustrée pour les trois fonctions $f_{d_{Spalart}}$, $1 - F_1$ et $1 - F_2$ figure 3.10.

3. La géométrie et les conditions de fonctionnement sont décrites au chapitre suivant.

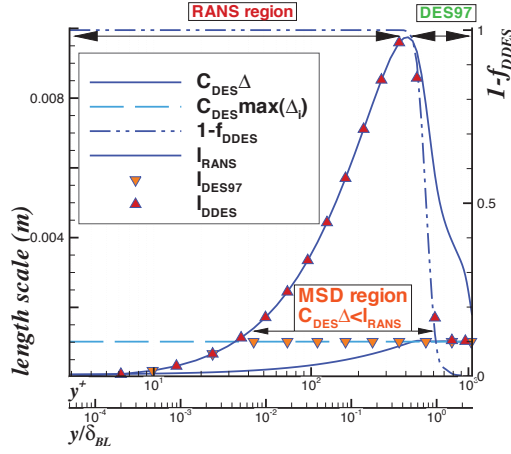


FIGURE 3.8 – Evolution des grandeurs DDES dans la couche limite d'un canal plan, $f_{DDES} = 1 - F_1$

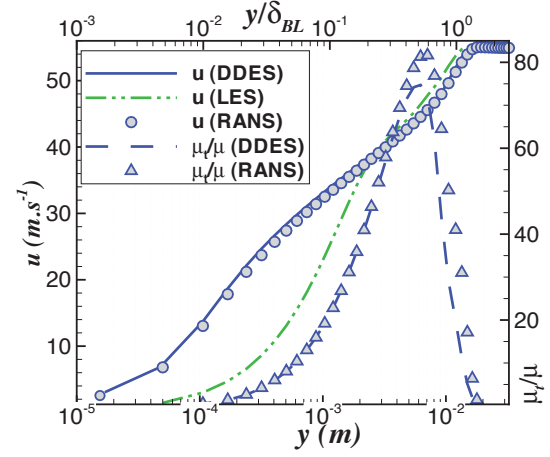


FIGURE 3.9 – Comparaison des profils de vitesse et de viscosité turbulente entre LES, RANS, DDES

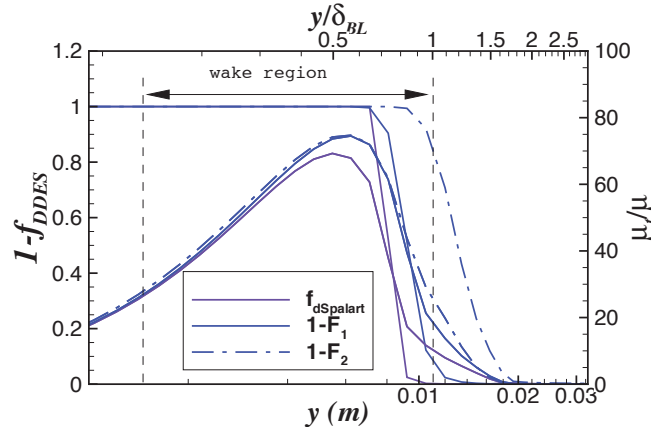


FIGURE 3.10 – Evolution de ν_t/ν dans la couche limite pour l'écoulement de canal plan, pour différentes fonctions de protection de la zone RANS

On peut constater sur cette figure que ces trois alternatives procurent un niveau de protection de la zone RANS différents. Notamment, avec la fonction $f_{dSpalart}$ où l'on constate que le pic de viscosité turbulente n'est pas atteint. L'influence de la définition de la fonction de protection sera analysée plus en détail pour un écoulement massivement décollé en aval d'une marche descendante à la partie 2.

3.4 Champ d'application d'approches hybrides RANS/LES en écoulements réactifs

L'objectif de cette section est d'identifier les configurations pour lesquelles il est souhaitable de prendre en compte la turbulence pariétale avec un modèle adapté et où l'utilisation d'une approche hybride RANS/LES est par conséquent pertinente. En effet, si la combustion a lieu directement en aval de couches limites et que le décollement est provoqué par une rupture de géométrie ou par un gradient de pression adverse, une meilleure prise en compte des couches limites attachées grâce à l'approche URANS est justifiée. En revanche, dans de nombreux cas (fours, turbines à gaz...), la combustion ayant lieu dans des zones décollées où l'écoulement est piloté par de grosses structures turbulentes, une mauvaise résolution de la dynamique pariétale a un effet négligeable sur la qualité des simulations dans les zones d'intérêt, la LES sur des maillages suffisamment fins dans la zone décollée mais trop grossiers au niveau des parois pour décrire correctement la dynamique pariétale se révèle la plupart du temps satisfaisante. Cependant, si l'on s'intéresse aux transferts thermiques (d'origines convectifs et/ou radiatifs), l'évaluation des transferts convectifs par une approche URANS est une alternative peu coûteuse à une LES résolue près des parois.

3.4.1 Écoulements décollés en aval de couches limites attachées

Dans les chambres de combustion, certaines caractéristiques géométriques permettent d'accélérer le mélange des réactifs, d'accrocher la flamme et de stabiliser la combustion en aval des injecteurs ou des canaux d'alimentation où l'écoulement est attaché (Poinot et Veynante [150]). Le lecteur est invité à consulter l'article de Renard *et al.* [157] pour une revue de ces dispositifs. On peut scinder ces géométries en deux catégories. La première est celle des élargissements brusques, qui servent directement d'accroches-flammes. La stabilisation et l'accrochage de la flamme peuvent également s'effectuer en aval d'un obstacle, dans la zone de basse pression associée à la recirculation (utilisé dans les statoréacteurs et super-statoréacteurs). La seconde consiste en l'utilisation d'un obstacle permettant de stabiliser la flamme à l'aval de celui-ci.

Cas d'élargissement brusque

La figure 3.11 illustre quatre géométries où la combustion a lieu en aval d'un élargissement brusque. La flamme y est stabilisée par des recirculations permettant l'alimentation en gaz brûlés (chauds) (pour la combustion prémélangée) ou en réactifs (pour la combustion non prémélangée) et s'accroche au niveau du coin de l'élargissement. Dans ce type de cas, une approche hybride RANS/LES permettrait d'obtenir le bon profil de vitesse au niveau du décollement et ainsi mieux prendre en compte le développement de la couche de mélange provoquée par la rupture de géométrie.

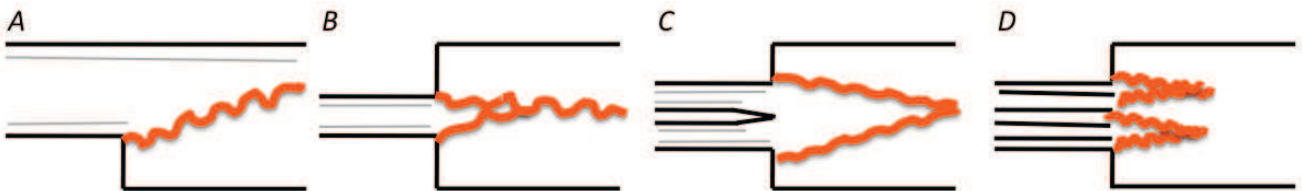


FIGURE 3.11 – Exemples d'élargissement brusque utilisés en combustion

On peut distinguer parmi ces géométries :

- La **marche descendante simple** (géométrie A) en écoulement prémélangé est une configuration étudiée d'un point de vue expérimental par Ganji et Sawyer [70], puis par Pitz et Daily [146] (marche de l'Université de Californie Berkeley). Ce cas a par ailleurs permis d'aborder la problématique des

instabilités de combustion sur un cas simple par Keller *et al.* [98]. Sur ce cas, des simulations LES ont été mises en œuvre par Thibaut et Candel [196] et Fureby [66], ce cas a aussi servi de validation pour Weller *et al.* [208]. Des expériences sur une marche descendante ont également été réalisées à l'Onera. Cette configuration d'écoulement fait l'objet des simulations numériques (notamment en DDES) présentées dans la partie II.

- Le **double élargissement brusque** (géométrie B) est utilisé également pour étudier les instabilités de combustion et notamment le rôle joué par les tourbillons dans l'apparition de ces instabilités (Poinsot *et al.* [149]). Ce cas test est également simulé en LES par Angelberger *et al.* [4] (cas axisymétrique); par ailleurs, une version plane de ce brûleur est par ailleurs étudiée par Ditaranto et Hals [53].
- Le cas du **double élargissement** existe aussi avec deux canaux séparés – plus connu sous le nom de brûleur ORACLES – (géométrie C) est une chambre de combustion qui présente l'avantage de fonctionner en prémélangé et en non prémélangé (Besson *et al.* [10]). Il sert également de cas de validation pour des modèles de combustion turbulente (en RANS) [158, 161].
- Une dernière configuration symétrique est étudiée à l'Ecole Centrale Paris (géométrie D), il s'agit d'un cas non prémélangé où le fuel est injecté au milieu, l'oxydant dans les deux canaux latéraux, elle sert notamment à la validation de l'approche flamme épaissie pour les écoulements non prémélangés (Légier *et al.* [111]).

Obstacles

Dans ce paragraphe, on s'intéresse à l'utilisation d'obstacles comme accroche-flamme, la couche de mélange se développant en aval du décollement permettant la stabilisation de la flamme. Cette méthode est employée notamment dans les statoréacteurs. Sur ce type de cas, l'approche hybride RANS/LES permet de mieux prédire la dynamique de la couche de mélange en aval du décollement.

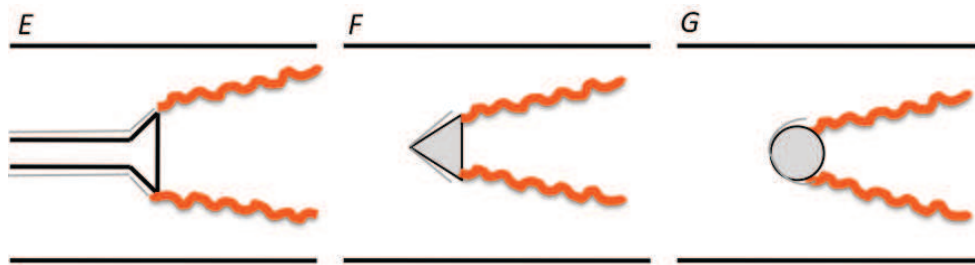


FIGURE 3.12 – Exemples de combustion stabilisée par obstacle

Parmi les nombreuses configurations présentant un obstacle on peut citer trois exemples (illustrés figure 3.12) :

- Le cas étudié par Nandula *et al.* (géométrie E) [124] est constitué par un **barreau cylindrique débouchant sur un embout conique** dans une chambre à section carrée. Sur ce cas, il est essentiel de bien prendre en compte l'écoulement en amont du décollement car le profil de vitesse à la base du cône pilote en grande partie l'épaississement de la couche de vorticit  comme l'observe Savre dans sa th se [175].
- L'accroche flamme en forme de **prisme** (géométrie F) est un cas étudi  originalement par Volvo [184]. Un montage  quivalent a  t  analys    l'Ecole Centrale Paris [102]. C'est  galement un  coulement tr s pris  pour valider les mod les pour la combustion turbulente pr m lang e [130, 66].
- Le **barreau cylindrique** plac  dans la direction transverse de l' coulement (géométrie G) utilis  comme accroche-flamme⁴ a  t  tr s t t envisag  par Zukoski [215] puis  tudi  exp rimentalement par Veynante *et al.* [202]. Une approche hybride RANS/LES peut s'av rer particuli rement performante pour pr dire le point de d collement. C'est par ailleurs un cas en a rodynamique pour lequel les approches hybrides RANS / LES sont bien adapt es [142] et en particulier la DES (Travin *et al.* [199]).

4. d'ailleurs repr sent  sur le logo de la Combustion Institute

Interactions onde de choc-couches limites

Dans le domaine de la propulsion spatiale où les écoulements considérés sont fortement compressibles, la combustion peut avoir lieu en aval d'interactions onde de chocs couches limites comme l'illustre la figure 3.13. Étant donnée la valeur élevée du nombre de Reynolds dans ces écoulements, la prise en compte de l'interaction onde de choc - couche limite en LES conduirait à des tailles de maillages très importantes. Ainsi, pour ce type d'écoulements en réactif une approche hybride RANS / LES se révèle être naturellement adaptée.

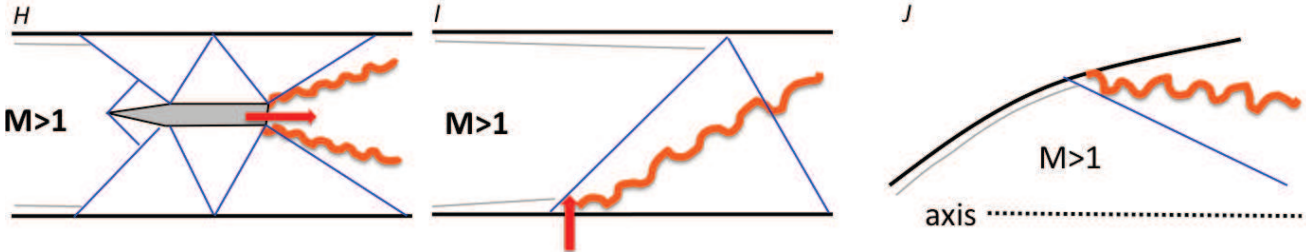


FIGURE 3.13 – Exemples de dispositifs propulsifs présentant des interactions onde de choc - couche limite

La figure 3.13 illustre trois types de configurations présentant des interactions ondes de choc - couches limites associées à des régions réactives :

- Le **superstatoréacteur** avec injection du carburant en **aval d'obstacle** (géométrie H) est un cas étudié par la JAXA [96, 97] et l'Onera [52]. Numériquement ce cas est étudié par Berglund et Fureby [7] en LES. En amont de l'obstacle, de nombreux chocs sont créés et sont réfléchis au niveau des parois. L'oscillation de ce réseau de chocs est pilotée en partie par les instabilités des interactions ondes de choc couches limites au niveau des parois.
- Le **superstatoréacteur avec injection transverse** d'oxygène, étudié en URANS par Choi *et al.* [31], présente à la fois des couches limites attachées en amont de l'injection mais également une interaction onde de choc couche limite. Des calculs DES (sur un maillage 2D) ont été par ailleurs réalisés sur cette configuration [32] et constituent le seul cas d'application de la DES en combustion identifié au cours de la thèse.
- Lors de la phase transitoire de montée en pression de la chambre de combustion et à basse altitude, les **tuyères propulsives** fonctionnent en régime de surdétente c'est à dire que pour adapter la tuyère en pression, un choc intense interagit avec la couche limite amont pour créer un décollement. Dans ce décollement, les imbrûlés de la chambre de combustion peuvent alors réagir avec l'oxygène de l'air. Ce type de configuration sera abordée plus en détail dans la partie III de ce mémoire, où la tuyère ATAC de l'Onera, expérimentée par Ordonneau *et al.* [133] fait l'objet de simulations numériques par l'approche DDES.

3.4.2 Prise en compte des transferts thermiques d'origine convective

L'intérêt d'appliquer une approche hybride RANS / LES dans une chambre de combustion réside également dans la capacité à prendre en compte les transferts thermiques d'origine convectif au niveau des parois.

D'une part, lorsque la simulation numérique vient en appui de la conception des chambres de combustion, en permettant d'orienter le choix des matériaux et de la méthode de refroidissement, il convient de savoir évaluer le plus précisément les flux de chaleur à la paroi [115].

D'autre part, si l'on cherche à calculer l'émission de polluants dans les chambres de combustion (NO_x , suies) qui sont très sensibles à la température, il convient d'être en mesure d'estimer les transferts convectifs et radiatifs au niveau de la paroi dans les simulations aux grandes échelles [54, 178].

Chapitre 4

Présentation des méthodes numériques du code CEDRE

Table des matières

4.1	Principes de base des méthodes	50
4.1.1	Introduction d'un formalisme compact	50
4.1.2	Formulation volumes finis	51
4.2	Discrétisation spatiale	51
4.3	Intégration temporelle	52
4.3.1	Formalisme utilisé et type d'approche suivi	52
4.3.2	Méthodes explicites	52
4.3.3	θ schéma	53
4.3.4	Schéma de Gear	54

Dans ce quatrième chapitre, les principes de base des schémas numériques utilisés dans le code CEDRE sont décrits. Les méthodes de discrétisation spatiale et de traitement des flux sont ensuite brièvement présentées. Enfin, les principaux schémas d'intégration temporelle sont détaillés. En particulier, le schéma de Gear, implanté dans le code dans le cadre de cette étude est présenté.

In chapter four, the base principles of the numerical schemes used in the CEDRE code are described. The methods employed for the spatial discretization and flux treatment are then briefly presented. Finally, the main time integration schemes are detailed. In particular, the Gear scheme implemented in the code in the frame of this study is presented.

4.1 Principes de base des méthodes

Cette présentation des méthodes numériques utilisées dans le code CEDRE est adaptée du travail de thèse de Bertier [8], que le lecteur est invité à consulter pour plus de détails.

4.1.1 Introduction d'un formalisme compact

Il est utile pour la suite de l'étude d'introduire des notations compactes permettant de regrouper en un même vecteur plusieurs variables. On introduit donc le jeu de variables primitives U et conservatives Q définies de la façon suivante :

$$U = \begin{bmatrix} p \\ Y_i \\ T \\ \mathbf{u} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho Y_i \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho e_t \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

De la même manière, on peut définir par extension les grandeurs filtrées primitives et conservatives, mais pour simplifier l'exposé, on raisonnera dans ce chapitre sur le système d'équations de base¹ (*i.e.* non filtré), que l'on peut réécrire sous la forme du système suivant (en supposant que les forces volumiques $\mathbf{f}_i$ sont nulles ainsi que les flux radiatifs) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{u} + \mathbf{J}_i) &= \dot{\omega}_i, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I} - \boldsymbol{\tau}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e_t + p \mathbf{u} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{J}_{e_t}) &= 0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Cette forme conservative possède l'avantage d'être bien adaptée au traitement des discontinuités, telles que les ondes de choc. On notera que les changements de variable $U = U(Q)$ et $Q = Q(U)$ sont bi-univoques, ce qui permet d'utiliser indifféremment l'un ou l'autre jeu de variable.

On rappelle que le problème continu complet consiste à trouver $Q(\mathbf{x}, t)$ en tout point du domaine ouvert

1. mais tout le raisonnement vaut pour les équations filtrées

Ω de $\mathbb{R}^d$, $d \in [1, 2, 3]$, et de bord $\partial\Omega$. Sous une forme plus compacte, l'équation 4.2 peut s'écrire :

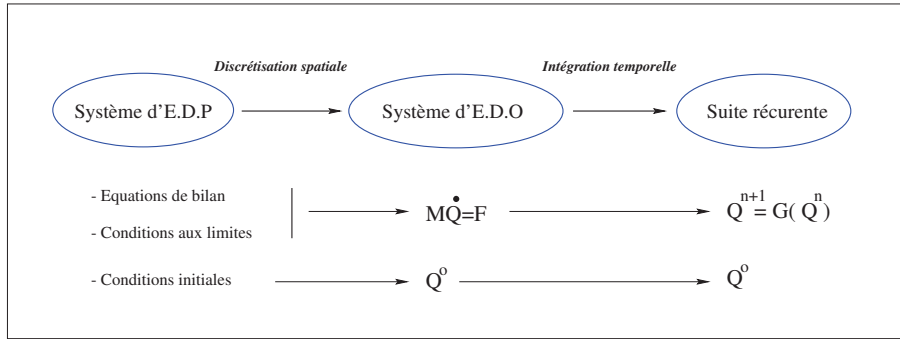
$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(U, \nabla U) = S, \text{ dans } \Omega \times \mathbb{R}^+ \quad (4.3)$$

où

$$S = \begin{bmatrix} 0 \\ \dot{\omega}_i \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

4.1.2 Formulation volumes finis

Le code CEDRE, utilise une approche volumes finis cell-centered, dont les volumes de contrôle sont des polyèdres quelconques. On peut décomposer la méthode numérique en deux grandes étapes, qui feront l'objet des deux prochaines sections : la discrétisation spatiale et l'intégration temporelle.



La discrétisation spatiale permet de passer de l'étude d'un système continu d'équations aux dérivées partielles (EDP) à un système d'équations différentielles ordinaires (EDO) et comprend globalement l'interpolation des grandeurs aux interfaces, puis le calcul et le cumul des flux par face. L'intégration temporelle s'applique alors sur un système d'équations différentielles ordinaires qu'elle transforme en une suite récurrente. Cette distinction entre les phases de discrétisation spatiale et d'intégration temporelle permet de clarifier la présentation des méthodes, et donne en pratique au code une certaine modularité.

4.2 Discrétisation spatiale

Une présentation détaillée de l'ensemble des méthodes de traitement des flux et d'interpolation spatiale n'est volontairement pas réalisée dans ce mémoire. Pour aller plus loin, le lecteur est invité à consulter les thèses de Bertier [8] et Haider [85] ainsi que le manuel du code CEDRE [131]. On peut cependant rappeler que, au niveau des interfaces entre les cellules :

- les flux dissipatifs sont calculés à l'aide d'un schéma centré ;
- les flux hyperboliques sont pris en compte à l'aide d'une méthode MUSCL (Monotonic Upstream Schemes for Conservation Laws) décentrée d'ordre 2 associée à un limiteur de Van Leer.

4.3 Intégration temporelle

On propose dans cette section d'introduire quelques notions essentielles relatives à l'intégration temporelle, avec comme support les schémas de base disponibles dans CEDRE.

4.3.1 Formalisme utilisé et type d'approche suivi

L'intégration temporelle a pour but de résoudre le système d'équations différentielles ordinaires :

$$M\dot{Q} = F(U, \nabla U, t), \quad (4.5)$$

en remplaçant la solution exacte $Q(t)$ par une suite de valeurs discrètes aux différents instants. Entre les deux instants t^n et t^{n+1} , l'intégration temporelle consiste alors à évaluer l'expression :

$$M\delta Q = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U) dt, \quad \text{avec} \quad \delta Q = \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t}, \quad (4.6)$$

et où $\Delta t = (t^{n+1} - t^n)$. On notera dès à présent que tous les schémas présentés par la suite utiliseront une **formulation en delta**, c'est à dire que l'inconnue du système discret n'est pas Q^{n+1} mais δQ . Cette forme a l'avantage d'être plus concise dans sa présentation formelle, et présente l'intérêt pratique de minimiser les erreurs d'arrondis lors de son utilisation dans un logiciel de CFD.

Parmi les méthodes d'intégration temporelle on peut distinguer les méthodes à un pas et les méthodes multi-pas. La différence entre ces deux approches est illustrée figure 4.1 La méthode à un pas permet d'effectuer l'intégration du système en utilisant seulement les états aux instants physiques t^n et t^{n+1} , contrairement aux méthodes multi-pas qui utilisent en outre des instants antérieurs à t^n .

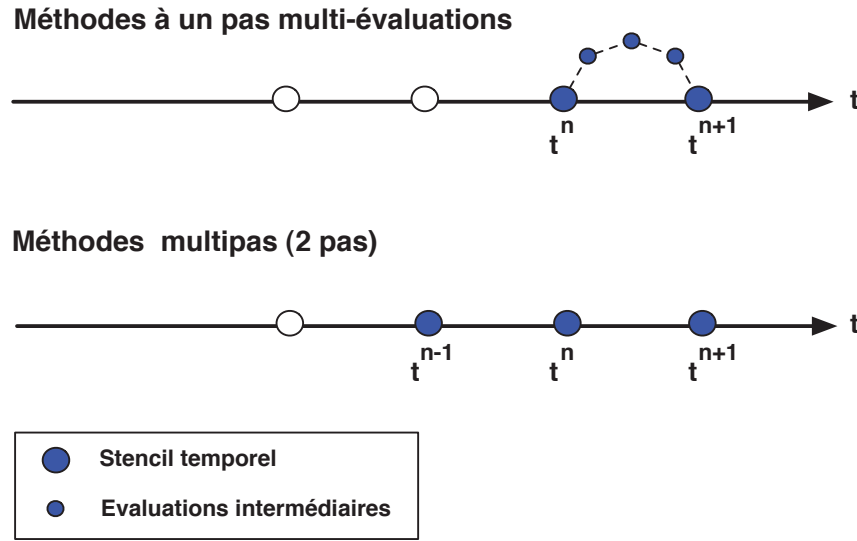


FIGURE 4.1 – Illustration de la distinction multipas/multi-itérations

On remarquera, comme il est illustré sur cette figure, que les méthodes à un pas peuvent néanmoins être à multi-évaluation : en plus des états calculés aux temps t^n et t^{n+1} , on utilise des états intermédiaires qui n'ont pas de signification physique en eux-mêmes (et qui ne sont par conséquent pas représentés sur l'axe des temps) mais qui permettent d'élargir le stencil du schéma.

4.3.2 Méthodes explicites

Les méthodes d'intégration **explicites** sont les plus immédiates à mettre en oeuvre car le calcul de l'état au temps t^{n+1} ne fait intervenir que l'état au temps t^n . Cependant, toutes ces méthodes ont leur stabilité

conditionnée par une contrainte dite de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) sur le pas de temps utilisé. Ainsi en notant localement u la vitesse convective, c la vitesse du son et Δx la taille de maille, la définition classique du nombre de CFL sur un problème monodimensionnel s'écrit :

$$CFL = \Delta t \frac{|u| + c}{\Delta x}. \quad (4.7)$$

Le pas de temps doit alors respecter en tout point du domaine de calcul :

$$\Delta t < CFL_{\max} \cdot \frac{\Delta x}{|u| + a}, \quad (4.8)$$

où la valeur du nombre de $CFL_{\max}$ dépend de la limite de stabilité du schéma considéré. La plus simple des méthodes d'intégration explicites est celle d'Euler :

$$M\delta Q = F(U^n). \quad (4.9)$$

La matrice de masse M étant diagonale, la résolution du système (4.9) est triviale, ce qui rend le processus d'intégration entre deux pas de temps très peu coûteux. Cependant son domaine de stabilité extrêmement réduit rend cette méthode très difficilement utilisable en pratique. De plus, c'est une méthode peu précise, car seulement d'ordre un en temps.

4.3.3 θ schéma

L'utilisation de schémas **implicites** permet de s'affranchir, en partie ou totalement, de la contrainte CFL (4.8) au prix d'une mise en oeuvre plus complexe, faisant intervenir au second membre du système l'évaluation des flux des états calculés au temps t^{n+1} . Le θ schéma initialement présent dans CEDRE est défini en non-linéaire comme :

$$M\delta Q = F[\theta U^{n+1} + (1 - \theta) U^n] \quad (4.10)$$

Ce schéma admet également la variante :

$$M\delta Q = \theta F(U^{n+1}) + (1 - \theta) F(U^n) \quad (4.11)$$

Selon les valeurs de θ , on obtient les schémas suivants :

- $\theta = 0$: méthode d'Euler explicite (rectangles à gauche)
- $\theta = 0,5$: méthode de Crank-Nicolson (trapèzes)
- $\theta = 1$: méthode d'Euler implicite (rectangles à droite)

Sur la figure 4.2 les différentes étapes liées à l'utilisation du schéma Euler implicites sont illustrées.

Ces étapes, au nombre de trois dans le cadre des méthodes numériques utilisées dans CEDRE, sont autant d'approximations susceptibles de dégrader la qualité de la solution :

- **Linéarisation du second membre.** Les schémas (4.10) et (4.11) conduisent à l'écriture de systèmes dont les second membres sont des fonctions non-linéaires de l'état U^{n+1} . De façon à pouvoir résoudre ces systèmes par des méthodes itératives classiques, on développe alors au premier ordre $F(U^{n+1})$ autour de de l'état U^n :

$$F(U^{n+1}) = F(U^n) + \left. \frac{\partial F}{\partial Q} \right|^n (Q^{n+1} - Q^n) + \mathcal{O}[\Delta Q(t)]^2, \quad (4.12)$$

La linéarisation de $F(U^{n+1})$ par rapport à U^n consiste alors à négliger les termes d'ordre deux et supérieurs $\mathcal{O}[\Delta Q(t)]^2$ dans (4.12). On notera par la suite J la matrice jacobienne des seconds membres par rapport aux états :

$$J = \frac{\partial F}{\partial Q} \quad (4.13)$$

L'unique θ -schéma linéarisé, à l'aide de (4.12), s'écrit alors :

$$(M - \theta \Delta t J^n) \delta Q = F(U^n) \quad (4.14)$$

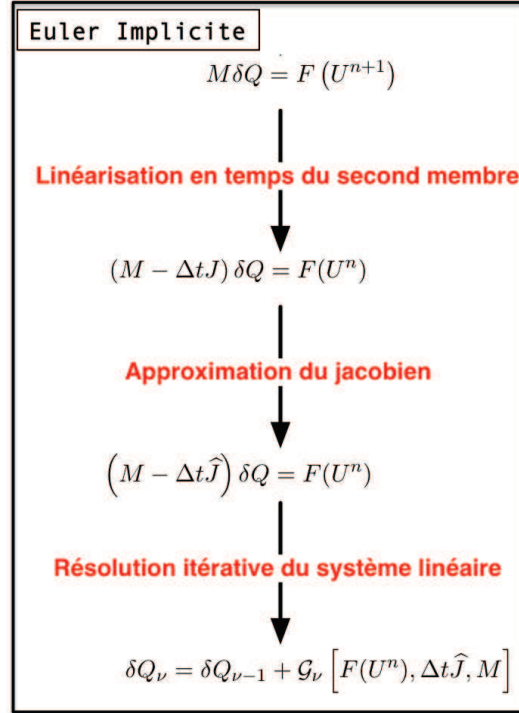


FIGURE 4.2 – Illustration, à l’aide du schémas d’Euler implicite, des différentes étapes du processus d’intégration temporelle.

- **Approximation du jacobien.** En toute rigueur, le calcul de J devrait faire intervenir les cellules du second voisinage. Ceci mène à la construction d’une matrice très remplie, nécessitant donc un stockage important, et dont le conditionnement n’est pas optimal. Le code CEDRE, à l’instar de nombreux autres codes de calcul dotés de schémas implicites, **n’utilise en pratique qu’une approximation de ce jacobien, notée $\hat{J}$** . Avec cette approximation, le système linéaire (4.14) se réécrit donc :

$$(M - \theta \Delta t \hat{J}^n) \delta Q = F(U^n) \quad (4.15)$$

L’utilisation de ce jacobien approché, construit à l’aide d’une discrétisation spatiale d’ordre un, modifie de façon importante les propriétés des schémas d’intégration temporelle.

- **Résolution itérative du système linéaire.** Le système linéaire issu de la phase implicite est résolu à l’aide de la méthode GMRES dont le principe général est rappelé dans la thèse de Bertier [8]. Ainsi, malgré ces approximations, le schéma Euler implicite est une méthode robuste, d’ordre 1 en temps et idéale pour la recherche d’un état stationnaire à grand pas de temps. On notera que dans la limite des très grands pas de temps, le schéma d’Euler implicite tend asymptotiquement vers la méthode de Newton, ce qui assure une bonne convergence du processus itératif (on rappelle que la méthode de Newton converge de façon quadratique). Cette méthode sera par conséquent employé pour les calculs RANS. Cependant, ce schéma est trop peu précis en temps pour convenir à des applications en LES ou DES, c’est pour cela qu’une méthode de Gear est mise en oeuvre dans le cadre de cette thèse.

4.3.4 Schéma de Gear

Pour les calculs instationnaires qui seront présentés dans la suite du mémoire, l’intégration temporelle est réalisée à l’aide d’un schéma implicite d’ordre 2, le schéma de Gear. Le schéma implicite backward Euler proposé par Gear [75] est un schéma à deux pas très répandu en aérodynamique [155, 41, 18, 105]. On cherchera à évaluer δQ défini comme :

$$M\delta Q = \frac{2}{3}F(U^{n+1}) + \frac{1}{3}M\delta Q^n \quad , \text{ avec : } \quad \begin{cases} Q^n &= Q^{n-1} + \Delta t \delta Q^n \\ Q^{n+1} &= Q^n + \Delta t \delta Q \end{cases} \quad (4.16)$$

Avec δQ^n défini comme

$$\delta Q^n = \frac{Q^n - Q^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.17)$$

Ainsi, après linéarisation le système 4.16 revient à [155] :

$$\left(M - \frac{2}{3}\Delta t J^n\right) \delta Q = \frac{2}{3}F(U^n) + \frac{1}{3}M\delta Q^n \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} Q^n &= Q^{n-1} + \Delta t \delta Q^n \\ Q^{n+1} &= Q^n + \Delta t \delta Q \end{cases} \quad (4.18)$$

À cause des diverses simplifications (linéarisation approchée des matrices Jacobiennes, factorisation de l'opérateur implicite), il est nécessaire d'incorporer un algorithme de sous - itérations afin de retrouver un ordre 2 en temps. Cet algorithme s'écrit :

$$\left(M - \frac{2}{3}\Delta t \hat{J}_p^{n+1}\right) \delta Q_{p+1} = \underbrace{M(Q^n - Q_p^{n+1}) + \frac{2}{3}F(U_p^{n+1}) + \frac{1}{3}M\delta Q^n}_{R_{p+1}} \quad (4.19)$$

où $\delta Q_{p+1} = Q_{p+1}^{n+1} - Q_p^{n+1}$ et $Q_1^{n+1} = Q^n$. Le processus converge lorsque δQ_{p+1} tend vers 0 on a alors $Q^{n+1} = Q_{p+1}^{n+1}$. En pratique, on impose le nombre de sous-itérations N_{SI} de l'algorithme au lieu de fixer un critère de convergence ce qui revient à $\delta Q \approx Q_{N_{SI}+1}^{n+1} - Q^n$.

Tout comme le schéma Euler implicite, une vue schématique des étapes de la méthode de Gear est proposée figure 4.3.

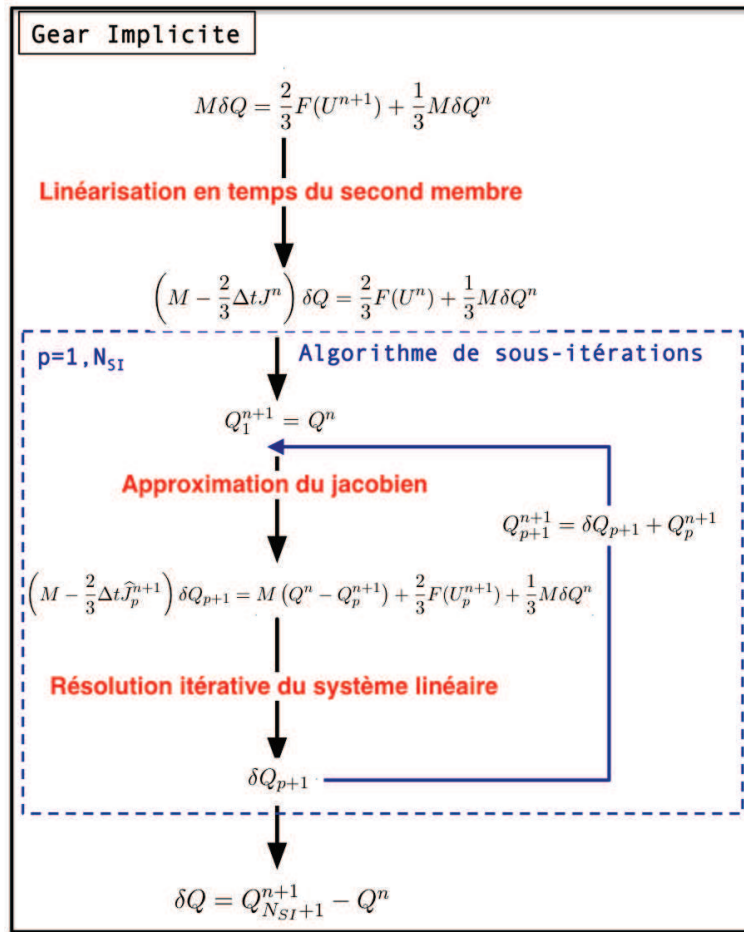


FIGURE 4.3 – Illustration des différentes étapes du processus d'intégration temporelle avec la méthode de Gear

Ce schéma, implanté dans le cadre de la thèse est validé sur un tourbillon 2D (se référer à l'annexe C).

Deuxième partie

Flamme de prémélange méthane-air
stabilisée par recirculation derrière une
marche

Chapitre 5

Présentation des simulations numériques de la chambre A3C

Table des matières

5.1	La chambre de combustion A3C du LAERTE	60
5.1.1	Description du banc	60
5.1.2	Le foyer A3C : un bon candidat pour valider la DDES en réactif	60
5.1.3	Conditions d'essai	61
5.1.4	Diagnostics disponibles	61
5.2	Domaine de calcul et maillages	62
5.2.1	Domaine de calcul	62
5.2.2	Maillage	63
5.3	Stratégie du calcul	64
5.3.1	Conditions aux limites	64
5.3.2	Paramètres thermodynamiques	65
5.3.3	Position des points de mesure et capteurs numériques	66

Ce chapitre est consacré à la présentation du cas de marche descendante A3C servant de validation à l'approche DDES pour des écoulements réactifs. Dans un premier temps, les caractéristiques de cette chambre de combustion sont présentées ainsi que les différents diagnostics qui permettent une comparaison approfondie avec les résultats des simulations. Dans un deuxième temps, le cas test numérique (maillages, conditions aux limites, schémas numériques) est introduit.

This chapter is dedicated to the description of the physical test case of the A3C backward facing step combustor which will be simulated in order to validate the DDES approach for reactive flows. The characteristics of the test case and the available measurements are in a first time presented. In a second time the numerical test case and the conditions of our computations are introduced.

5.1 La chambre de combustion A3C du LAERTE

5.1.1 Description du banc

La chambre de combustion en forme de marche descendante A3C¹ montée sur le banc du LAERTE² est composée d'un premier canal de 1,5 m de long et de 6,5 cm de haut débouchant sur un second canal de 1,4 m de long et 10 cm de haut. Le col en sortie du second canal peut-être obturé afin d'augmenter la pression chambre. La largeur de la chambre est constante et égale à 10 cm. La figure 5.1 montre le banc en conditions de fonctionnement et la figure 5.2 en donne une vue schématique. La position des différents diagnostics ainsi que la zone correspondant au domaine de calcul sont indiqués sur la figure 5.2. La turbulence est introduite dans l'écoulement en amont de la marche grâce à deux types de dispositifs : un nid d'abeille (représenté sur la figure 5.2) ou un turbulateur.

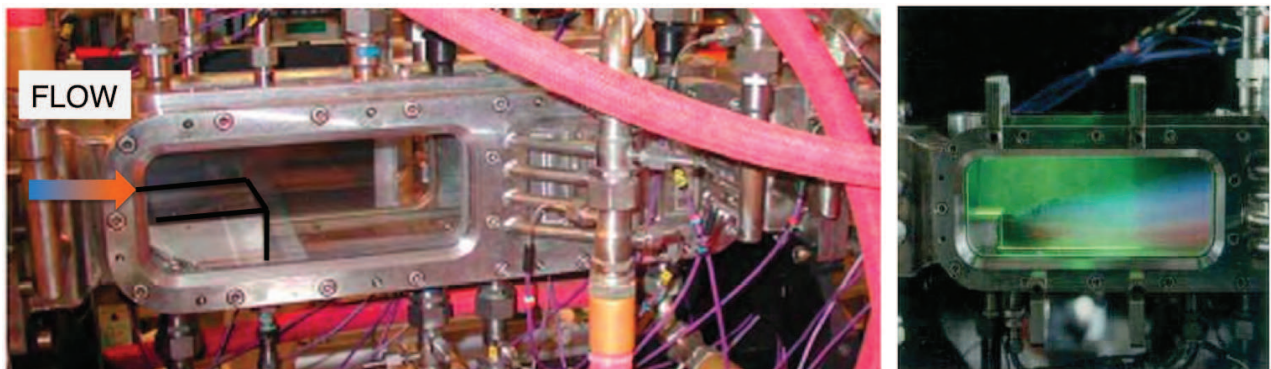


FIGURE 5.1 – Montage du banc A3C (gauche), banc en condition de fonctionnement éclairé par nappe laser (droite)

5.1.2 Le foyer A3C : un bon candidat pour valider la DDES en réactif

Les caractéristiques de l'écoulement dans le foyer A3C qui en font un bon candidat pour valider l'utilisation d'une approche hybride RANS / LES de type DDES en gaz chauds sont les suivantes :

1. Action Concertée pour les Chambres de Combustion
2. Laboratoire d'AERoThermique et d'Energétique de l'Onera

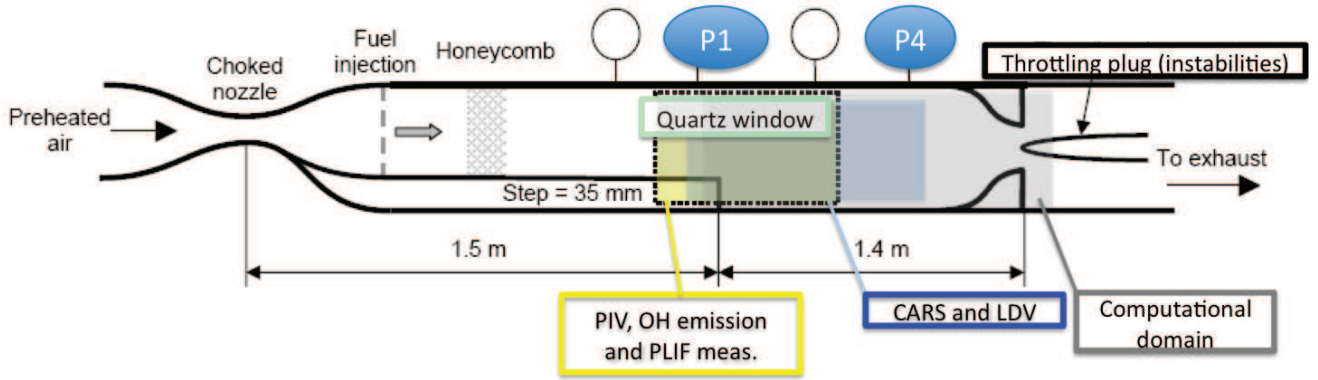


FIGURE 5.2 – Schéma détaillé du banc et diagnostics

- l'existence de deux régions aux comportements distincts : un canal amont présentant des couches limites attachées (mode RANS) et en aval de la marche, un écoulement massivement décollé ainsi qu'une zone de recirculation (mode LES) ;
- la simplicité de la géométrie ;
- l'existence de mesures expérimentales à la fois en inerte et en réactif.

Tout ces éléments, représentés figure 5.3, font de cette chambre un cas-test très bien adapté à la validation de la DDES pour un écoulement réactif.

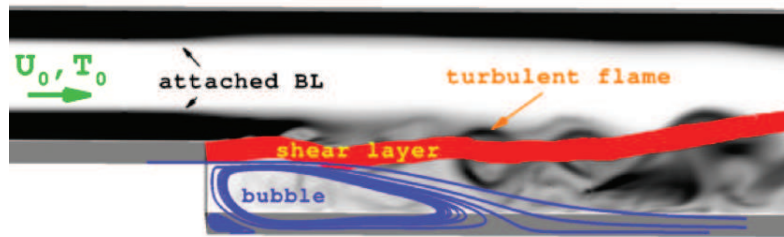


FIGURE 5.3 – Phénoménologie de l'écoulement

5.1.3 Conditions d'essai

L'écoulement est injecté à une température de 520 K, avec une vitesse débitante de $50 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Le nombre de Reynolds basé sur la hauteur de marche (Re_h égal à hU_0/ν) vaut 43 000 pour l'écoulement inerte (air pur). La pression imposée en sortie de chambre est de 100 400 Pa. Des essais ont été menés dans ces conditions, aussi bien pour des écoulements inertes que pour des écoulements réactifs de méthane-air pré-mélangé pauvre à la richesse 0,8. En entrée, le dispositif en nid d'abeille permet d'introduire un niveau de turbulence dans le canal de 10%. Ces conditions sont reprises de façon synthétique dans le tableau 5.1.

TABLE 5.1 – Conditions d'essais reproduites dans les calculs

h	U_0	M_0	T_0	Φ	Re_h	p_0
0,035 m	$50 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	0,15	520 K	0 et 0,8	43 000	100 400 Pa

5.1.4 Diagnostics disponibles

Plusieurs techniques de mesures ont été utilisées pour caractériser l'écoulement dans cette chambre de combustion. Pour les écoulement inertes et réactifs, des mesures de vitesse par vélocimétrie laser

LDV (Laser Doppler Velocimetry) ont été réalisées par Moreau *et al.* [122]. Les mêmes conditions ont été reproduites par Magre *et al.* qui se sont intéressés aux champs de température par la méthode Raman cohérente DRASC [113]. Plus récemment, en 2004, dans le cadre de la campagne MICAEDI, l'investigation des radicaux OH par fluorescence laser PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) et par chimie-luminescence ont été réalisées par Sabel'nikov *et al.* [165] en 2004 pour étudier les instabilités de combustion. Enfin, ces travaux ont été complétés en 2006 par des mesures de vitesse par PIV (Particle Induced Velocimetry). Lors de ces essais, deux microphones étaient placés à la verticale de la marche ainsi qu'en aval. Les résultats obtenus lors de cette dernière campagne ont été synthétisés par Laverdant *et al.* [107]. La figure 5.2 permet de visualiser la position des différents diagnostics réalisés au cours des campagnes d'essai. L'ensemble des données disponibles pour ce cas sont résumées au tableau 5.2.

TABLE 5.2 – Grandeurs mesurées sur la marche A3C pour les différents diagnostics

Cas	Type de mesures	Grandeurs mesurées
Inerte	LDV	u, v, u'_{rms}, v'_{rms}
Réactif stable	LDV, DRASC, PLIF, PIV, micros	$u, v, u'_{rms}, v'_{rms}, T, T'_{rms}, OH, p$
Réactif instable	PLIF, PIV, chimie-luminescence, micros	$u, v, u'_{rms}, v'_{rms}, OH, p$

5.2 Domaine de calcul et maillages

5.2.1 Domaine de calcul

En ce qui concerne la définition du domaine de calcul, schématisé figure 5.4, les dimensions expérimentales sont conservées à l'exception de la longueur et la largeur de chambre. La longueur du canal amont ($6h$) a été choisie de manière à ce que la couche limite basse soit pleinement développée au niveau de la marche. En aval, le canal mesure $37h$: cette longueur permet de considérer l'intégralité de la flamme, dont le point d'impact moyen au niveau de la paroi supérieure se situe à environ $23h$. Dans la direction transverse, la largeur réelle de la chambre est de $0,1\text{ m}$ ce qui correspond à $2,86h$. Pour prendre en compte les parois latérales et par conséquent les deux couches limites tout en conservant une bonne résolution dans le plan transverse, on peut estimer la taille du maillage structuré correspondant à $N = n_x \times n_y \times n_z \approx 60 \times 100 \times 600 = 4\,800\,000$ cellules en discrétisant les couches limites latérales avec 25 points. Cette taille de maillage est très importante et n'est pas nécessaire compte tenu du niveau de validation retenu dans ce travail, il a donc été choisi de négliger les parois latérales au profit de conditions de périodicité sur une largeur de $2h$, permettant néanmoins à la couche de mélange tri-dimensionnelle de se développer. Par ailleurs, d'après les travaux de thèse de Courtois [36], il apparaît que le rôle joué par les parois latérales n'est pas prépondérant.

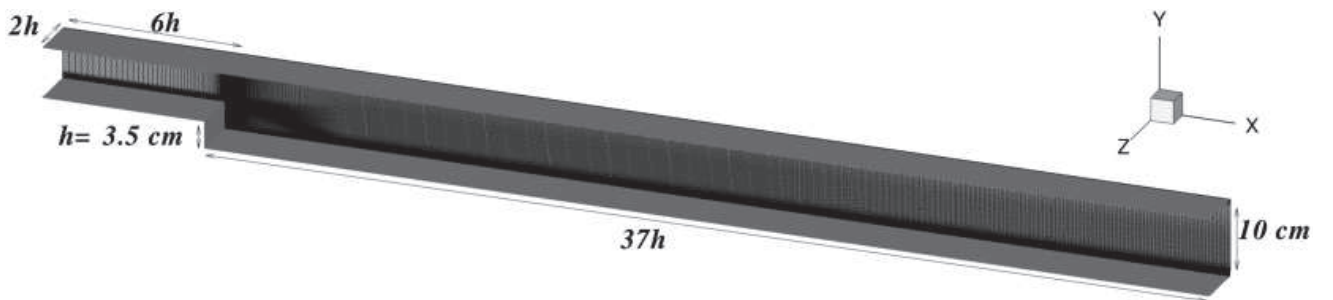


FIGURE 5.4 – Domaine de calcul et dimensions, maillage dans le plan médian

5.2.2 Maillage

Deux maillages, que l'on notera « maillage I » et « maillage II » ont été utilisés dans cette étude. Ils comportent respectivement 1 072 584 et 1 485 774 cellules, et diffèrent essentiellement par le nombre de points utilisés en envergure. Compte-tenu de la géométrie du domaine de calcul, une approche de type structurée a été préférée à l'utilisation conjointe de tétraèdres et de couches de prismes, autorisant alors un contrôle beaucoup plus fin de la discrétisation (en particulier au nez de la marche et dans les couches-limites). Les approches complètement structurées possèdent cependant un gros inconvénient, même sur une géométrie aussi simple : toutes les lignes de maillage doivent être propagées à travers le domaine de calcul, induisant un coût supplémentaire souvent élevé. C'est la raison pour laquelle on retient dans cette étude une approche dite « structurée par blocs » pour les deux maillages :

- un premier maillage, complètement structuré, est réalisé à l'aide du mailleur ICEM ;
- ce maillage est ensuite redécoupé à l'aide d'un utilitaire dédié, développé dans le cadre de cette thèse, de manière à raffiner les zones nécessitant une discrétisation plus importante.

Cette stratégie, illustrée sur la figure 5.5, a été mise en oeuvre de manière à réaliser des maillages dont le nombre de points dans l'envergure varie fortement entre l'entrée et la sortie du domaine, allant de 3 points en entrée jusqu'à 36 points (pour le maillage II) au niveau de la marche. De manière plus

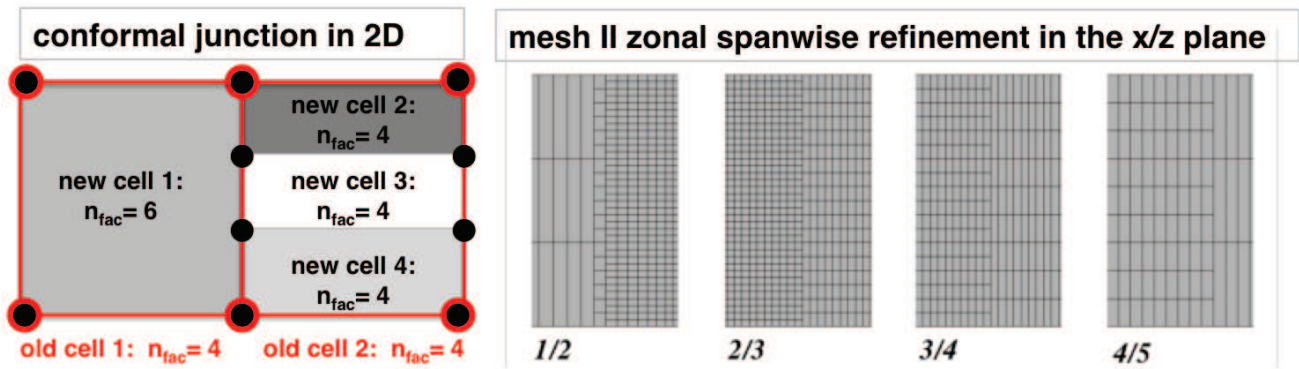


FIGURE 5.5 – (gauche) Raccords conformes créés par EPINETTE entre 2 zones de raffinement transverse différents, (droite) Vues du maillage dans le plan (XZ) au niveau des raccords. Les positions des zones de raccord conformes sont $X_{1/2} = -h$, $X_{2/3} = 8h$, $X_{3/4} = 18h$, $X_{4/5} = 31h$

quantitative, on trouvera dans le tableau 5.3 le nombre de points dans la direction transverse pour les différentes zone des deux maillages.

TABLE 5.3 – Approche par zone pour le raffinement transverse

Zone	n_z	maillage	$\Delta z / \delta_{BL}$
1 : Canal amont	3	I et II	1,8
2 : Marche et zone de recirculation	18 – 36	I - II	0,3 – 0,15
3 : Aval de la recirculation	18	I et II	0,3
4 : Zone de développement de la flamme (cas réactif)	9	I et II	0,6
5 : Fin de domaine	3	I et II	1,8

Par ailleurs, les deux maillages partagent la même grille 2D dans le plan XY, représentée sur la figure 5.6. Pour aller plus loin, et vérifier l'adéquation des maillages utilisés avec la physique pariétale, l'évolution de la taille de première maille en unité de paroi (y_0^+) est tracée figure 5.7.

On vérifie alors que, sur la paroi du bas, la première maille se trouve toujours dans la sous-couche visqueuse, ce qui est indispensable pour que le modèle URANS fonctionne correctement. En revanche,

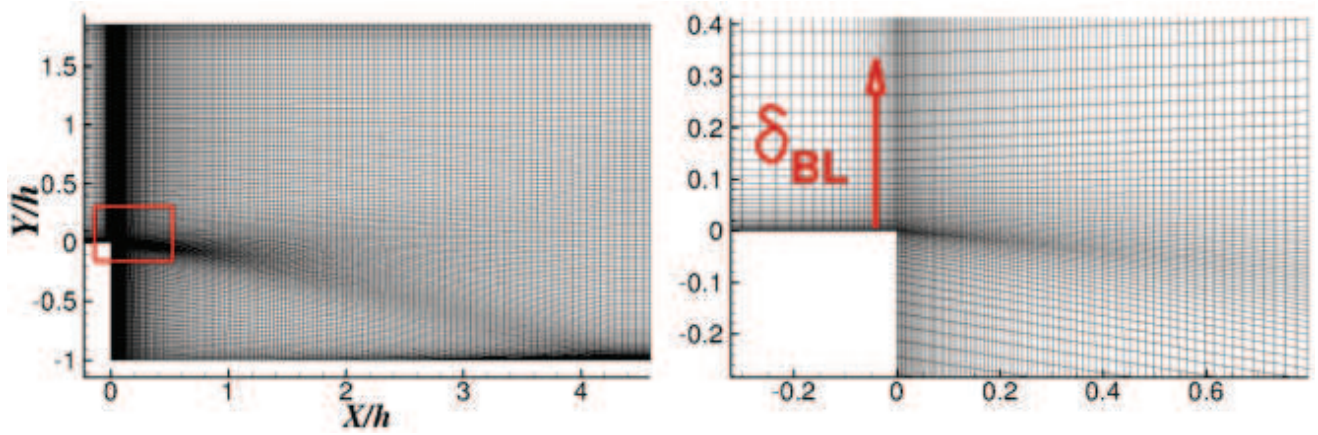
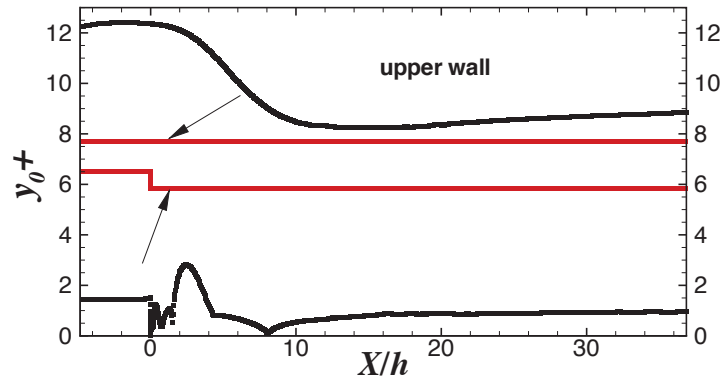
FIGURE 5.6 – Vue rapprochée du maillage dans le plan XY au niveau du coin de la marche

TABLE 5.4 – Raffinement de la grille 2D

Zone	n_x	n_y	y_0/δ_{BL}
Canal amont	63	71	paroi inférieure : $3,8 \cdot 10^{-3}$ - paroi supérieure : $3,1 \cdot 10^{-2}$
Chambre	626	115	paroi inférieure : $3,8 \cdot 10^{-3}$ - paroi supérieure : $3,1 \cdot 10^{-2}$

FIGURE 5.7 – Evolution de la taille de première maille en unité de paroi (y_0^+) au niveau des parois hautes et basses

sur la paroi du haut, la première maille se trouve plutôt dans la zone logarithmique de la couche-limite : les différents flux seront alors corrigés par une loi de paroi.

5.3 Stratégie du calcul

5.3.1 Conditions aux limites

Les conditions appliquées aux limites du domaine de calcul sont les suivantes :

- Comme dans l'expérience, l'écoulement est injecté à une vitesse débitante de $50 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et une température de 520 K. En entrée de domaine, des profils de vitesse, d'énergie cinétique turbulente k et la quantité ω pour les calcul 2D-RANS et DDES (figure 5.8) sont imposés. Ils sont obtenus préalablement à partir d'un calcul de canal plan. Par ailleurs, faute de méthode adaptée permettant d'injecter des fluctuations en entrée de domaine dans le code CEDRE pour les calculs instationnaires, aucune fluctuation n'est prise en compte. Cela se traduira par le faible niveau de turbulence dans la partie haute de la chambre mis en évidence au paragraphe 6.2.2.

- Pour le cas réactif, on considère une chimie globale. La combustion est régie par l'équation globale suivante :



Cinq espèces ($CH_4, O_2, N_2, CO_2, H_2O$) servent à décrire la composition chimique de l'écoulement. En effet, le prémélange étant pauvre ($\Phi = 0,8$) un nombre réduit d'espèces suffisent à obtenir une température de fin de combustion proche de celle obtenue avec une chimie détaillée (2182 K). En entrée, les fractions massiques du prémélange avec de l'air sont obtenues directement à partir de la richesse de la façon suivante :

$$Y_{CH_4} = \frac{\Phi \mathcal{M}_{CH_4}}{\Phi \mathcal{M}_{CH_4} + 2\mathcal{M}_{O_2}(1 + \beta)}, \quad (5.2)$$

$$Y_{O_2} = \frac{1 - Y_{CH_4}}{1 + \beta}, \quad (5.3)$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_{CH_4} - Y_{O_2}, \quad (5.4)$$

où $\beta = 3,29$ est le facteur de dilution massique de l'azote dans l'air.

- En inerte, la pression en sortie de chambre est imposée directement. En réactif, une condition non réfléchissante reposant sur la méthode des caractéristiques de type NSCBC [148] est utilisée. L'influence du traitement acoustique de la condition de sortie du domaine est analysée au chapitre 7.
- Aucune mesure thermique des parois n'est disponible ; par conséquent, il a été choisi d'imposer des parois adiabatiques.
- Les couches limites étant prises en compte dans le calcul, des conditions d'adhérence sont imposées au niveau des parois.
- Des conditions de périodicité sont prises au niveau des parois latérales.

Le tableau 5.5 reprend les différentes grandeurs qui sont imposées au niveau des limites.

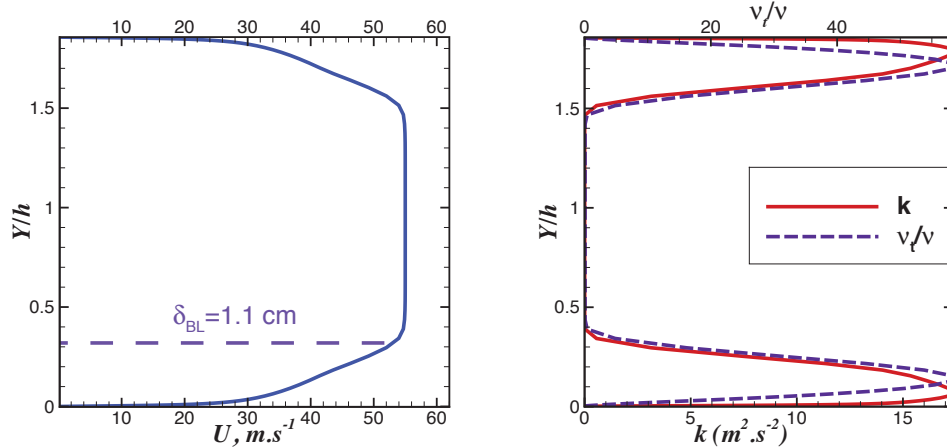


FIGURE 5.8 – Profils de vitesse (droite), d'énergie cinétique turbulente et du ratio entre viscosité cinématique turbulente et viscosité cinématique laminaire (ν_t/ν avec ν_t égal à k/ω) imposés en entrée de chambre

5.3.2 Paramètres thermodynamiques

La viscosité du mélange est calculée à partir de la moyenne des viscosités d'espèces (obtenue par une loi de Sutherland (équation 1.15)).

Les nombres de Prandtl et de Schmidt, permettant d'évaluer les coefficients de conductivité thermique (λ_i) et de diffusion d'espèces (D_i) respectivement, sont donnés pour les différentes espèces mises en jeu dans nos calculs au tableau 5.6.

TABLE 5.5 – Grandeurs imposées au niveau des limites

Cas	Limite	Grandeur imposée	Valeur
Inerte	Entrée	T $\mathbf{u}$ (k, ω) Y_{air}	520 K profil (figure 5.8) (gauche) profils (figure 5.8) (gauche) 1
Réactif	Entrée	T $\mathbf{u}$ (k, ω) $Y_{CH_4} - Y_{O_2} - Y_{N_2} - Y_{CO_2} - Y_{H_2O}$	520 K profil (figure 5.8) (gauche) profils (figure 5.8) (gauche) 0,0446 – 0,2224 – 0,7330 – 0 – 0
tous	Sortie	p	100 400 Pa
tous	Parois	Φ	$0 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$

TABLE 5.6 – Nombres de Prandtl et de Schmidt des espèces utilisées dans les calculs

	Air	CH_4	O_2	N_2	CO_2	H_2O
Prandtl	0,71	0,72	0,70	0,70	0,72	0,72
Schmidt	0,71	0,44	0,84	0,71	0,94	0,58

5.3.3 Position des points de mesure et capteurs numériques

La position des points de mesures de vitesse et de température est matérialisée sur la figure 5.9. La position des différents capteurs numériques est également indiquée. Différentes grandeurs thermodynamiques sont ainsi stockées à chaque pas de temps au niveau de ces capteurs et serviront à l'analyse fréquentielle présentée aux paragraphes 6.3.2 et 7.3.2.

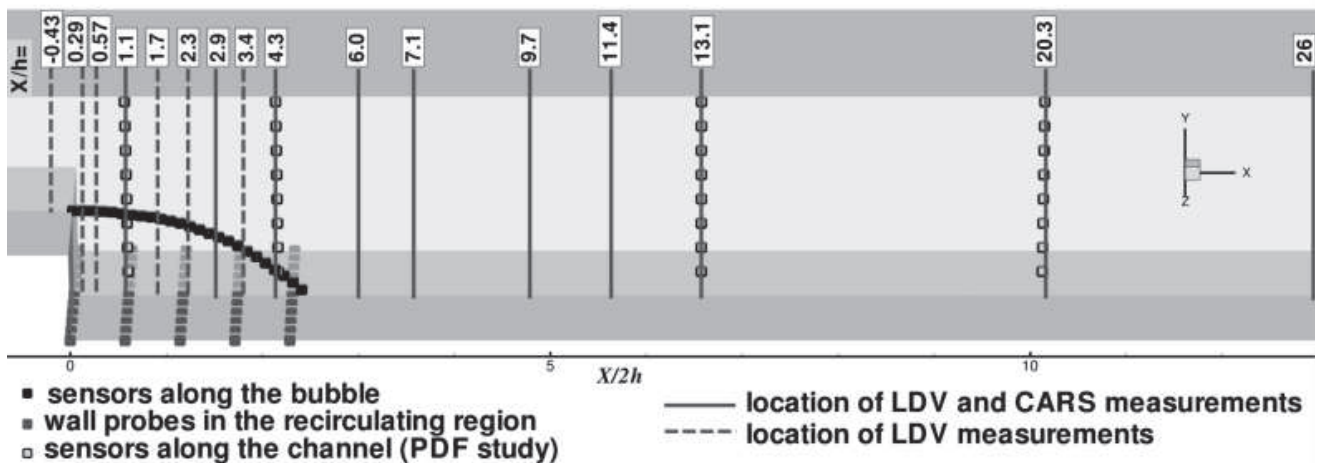


FIGURE 5.9 – Position des capteurs et des points de mesures dans le domaine de calcul

Chapitre 6

Simulation de l'écoulement inerte dans la chambre A3C

Table des matières

6.1	Présentation des calculs et première validation	68
6.1.1	Calculs réalisés	68
6.1.2	Choix du pas de temps	68
6.1.3	Comportement de la DDES	69
6.2	Analyse des champs moyens	71
6.2.1	Etude de la recirculation moyenne, comparaison avec les mesures	71
	Longueur de recirculation	71
6.2.2	Comparaison des profils avec ceux de LDV	72
	Comparaison des moments statistiques du premier ordre	72
6.2.3	Analyse de la couche de mélange et de la zone décollée	76
	Épaisseur de vorticité et de quantité de mouvement	76
	Coefficients de pression dans la chambre	76
	Critère de Pope	78
6.3	Etude de la dynamique du décollement	79
6.3.1	Dynamique de la couche de mélange	79
	Comparaison des modèles	79
	Analyse du lâcher tourbillonnaire pour le calcul DDES-a	80
6.3.2	Analyse spectrale de l'écoulement décollé	82
	Signaux de pression	82
	Signaux de vitesse verticale	83

Dans ce chapitre, les résultats moyennés des simulations sont d'abord comparés aux valeurs expérimentales décrivant le champ aérodynamique de l'écoulement inerte dans la chambre. Une attention particulière est portée sur la validation de l'approche DDES implémentée dans le cadre de la thèse. La deuxième section est consacrée à l'analyse physique de la dynamique de l'écoulement en aval de la marche.

In this chapter, the averaged results of our computations are firstly compared to the experimental quantities describing the aerodynamic field of the inert flow inside the chamber. The validation of the DDES approach implemented in this study is specifically scrutinized. The second section is dedicated to the physical analysis of the flow dynamics downstream of the step.

6.1 Présentation des calculs et première validation

6.1.1 Calculs réalisés

L'objectif de ce chapitre est de valider le fonctionnement de la DDES en inerte et de comparer sur le même cas les trois approches DDES, LES et RANS. Pour ce faire, six calculs – dont les principales caractéristiques sont regroupées au tableau 6.1 – sont présentés. Pour la DDES une convergence en maillage est réalisée à travers les calculs DDES-a (sur le maillage II) et DDES-c (sur le maillage I). De plus, l'influence du nombre de sous-itérations du schéma de Gear sur la précision des résultats obtenus est également examinée grâce à la comparaison entre la DDES-a (2 sous-itérations) et DDES-b (5 sous-itérations). Enfin, l'impact du choix de la fonction de protection de couche limite $1 - F_1$ ou $f_{d_{Spalart}}$ proposée par Spalart *et al.* [190]) est montrée à travers les calculs DDES-a et DDES-d. Pour le calcul LES, la constante C_S du modèle de Smagorinsky est prise égale à 0,1. Pour information, le coût de ces calculs est détaillé à l'annexe C.

TABLE 6.1 – *Tableau récapitulatif des calculs réalisés en inerte sur A3C*

Cas	Maillage	Turbulence	Intégration temporelle	Combustion	NSCBC
DDES-a/c	II / I	DDES ($1 - F_1$)	Gear 2 sous-itérations	inerte	sans
DDES-b	II	DDES ($1 - F_1$)	Gear 5 sous-itérations	inerte	sans
DDES-d	II	DDES ($f_{d_{Spalart}}$)	Gear 2 sous-itérations	inerte	sans
LES	II	LES (Smago)	Gear 2 sous-itérations	inerte	sans
RANS	2D	$k - \omega$ SST	Euler implicite	inerte	sans

6.1.2 Choix du pas de temps

On rappelle que l'on peut définir un nombre de CFL convectif défini comme $CFL_c = \Delta t |\mathbf{u}| / D_h$. Le nombre de CFL classique (incluant la vitesse acoustique) étant $CFL_a = \Delta t (|\mathbf{u}| + c) / D_h$. À titre d'exemple, les champs moyens de CFL_c et de CFL_a sont présentés à la figure 6.1 pour le calcul DDES-a, pour un pas de temps Δt égal à $2,5 \mu s$.

Il ressort de cette figure que les zones à fort CFL sont localisées essentiellement au niveau des couches limites, au centre du canal au niveau de l'élargissement brusque et au coin de la marche. Au niveau du coin de la marche, les phénomènes comme l'instabilité de Kelvin-Helmholtz sont essentiellement de nature convective, un niveau de CFL_a élevé limité à cette région n'a a priori qu'une influence limitée. Globalement on a $\max(CFL_a) < 13$ et $\max(CFL_c) < 0,7$. D'après la figure 6.2, il apparaît que dans

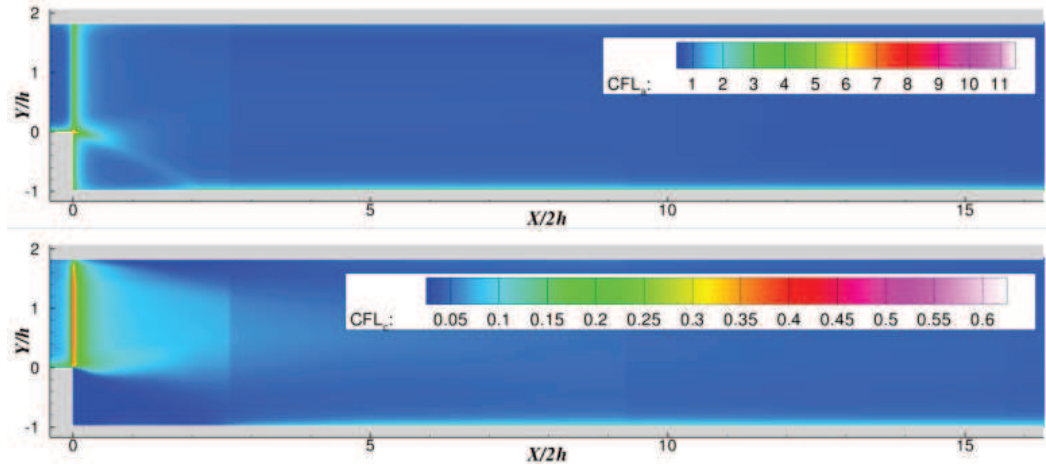


FIGURE 6.1 – Champs moyens de CFL pour le calcul DDES-a. (haut) CFL_a et (bas) CFL_c

plus de 90% du domaine de calcul, on obtient $CFL_a < 2$ et $CFL_c < 0,2$; niveaux auxquels le schéma de Gear sous-itéré associé au schéma de Roe est peu dissipatif et dispersif. Il faut noter que pour réaliser le calcul en utilisant un schéma explicite (environ quinze fois plus rapide que le schéma de Gear sous-itéré 2 fois par pas de temps), il faut vérifier $CFL_{a_{max}} < 0,5$, ce qui revient à diviser le pas de temps par 26. Les temps de restitution obtenus seraient par conséquent 1,9 fois plus longs.

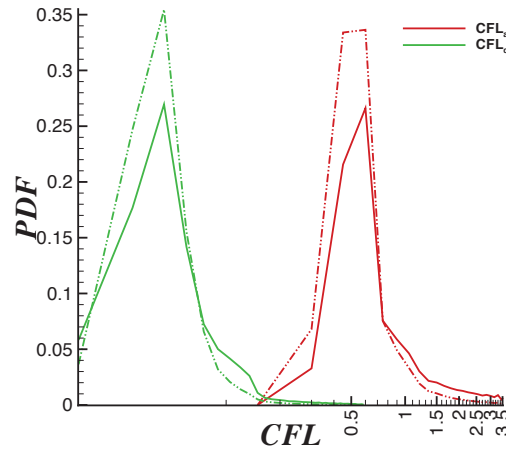


FIGURE 6.2 – Densité de probabilité des nombres de CFL sur le nombre de cellules (traits pleins), sur le volume (pointsillés)

6.1.3 Comportement de la DDES

Afin de valider le bon fonctionnement de la DDES, il est nécessaire de vérifier que les modes LES ou RANS du modèle sont activés dans les zones pertinentes. Pour ce faire, les zones où l'échelle DDES est l'échelle RANS (région RANS) et celles où l'échelle DDES est l'échelle LES sont représentées sur la figure 6.3. Les séparations entre les différentes zones sont marquées par des isolignes $l_{RANS} - C_{DES}\Delta = 0$ (cela permet de visualiser en particulier la zone RANS persistant au centre de l'écoulement) où $1 - f_{DDES} = 0$ (cas des couches limites). Il est intéressant de remarquer que les couches limites sont bien traitées en RANS. En revanche, une zone RANS persistante est localisée dans la partie haute de la chambre. Cela est dû à la définition de l'échelle RANS pour le modèle SST. En effet, pour la DDES basée sur le modèle SA, celle-ci correspond à la distance à la paroi, alors que pour la DDES basée sur le modèle $k - \omega$ SST cette échelle peut prendre des valeurs faibles lorsque k tend vers zéro, ce qui peut se produire au sein

de l'écoulement en dehors des couches limites au niveau du centre du canal. Dans notre cas, le fait que le mode LES ne soit pas actif dans cette région, située relativement loin de la marche et de la zone de recirculation où le mode LES est nécessaire, n'a a priori qu'un effet limité sur les résultats, le niveau de turbulence étant faible dans cette région.

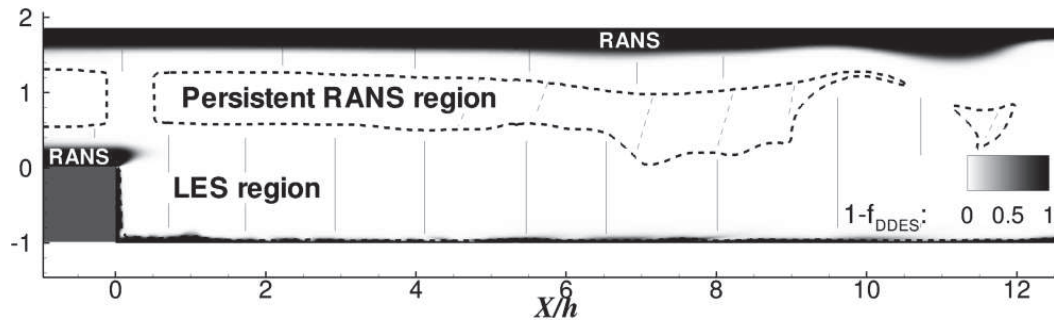


FIGURE 6.3 – Distinction, en instantané, des approches pour la DDES : $l_{DDES} = l_{RANS} \rightarrow$ zone RANS, $l_{DDES} = C_{DES}\Delta \rightarrow$ zone LES pour le calcul DDES-a

6.2 Analyse des champs moyens

6.2.1 Etude de la recirculation moyenne, comparaison avec les mesures

Les simulations instationnaires sont moyennées durant un temps physique de 0,15 s ce qui correspond à 5 traversées de domaine pour l'écoulement à $U_0 = 50 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. La topologie de l'écoulement moyen pour l'ensemble des calculs indiqués au tableau 6.1 est présentée figure 6.4. Les lignes de courant sont tracées dans le plan médian du domaine de calcul pour les simulations LES et DDES. Qualitativement, on peut distinguer plusieurs motifs aérodynamiques :

- une recirculation très allongée ainsi que deux recirculations de coin contrarotatives pour le cas 2D-RANS ;
- une recirculation plus courte et une recirculation contrarotative pour les calculs DDES utilisant la fonction de protection $1 - F_1$;
- des recirculations courtes ainsi qu'un décollement sur la paroi supérieure pour la LES et la DDES utilisant la fonction $f_{d_{Spalart}}$.

L'existence de cette deuxième recirculation supérieure sera analysée par la suite dans ce mémoire.

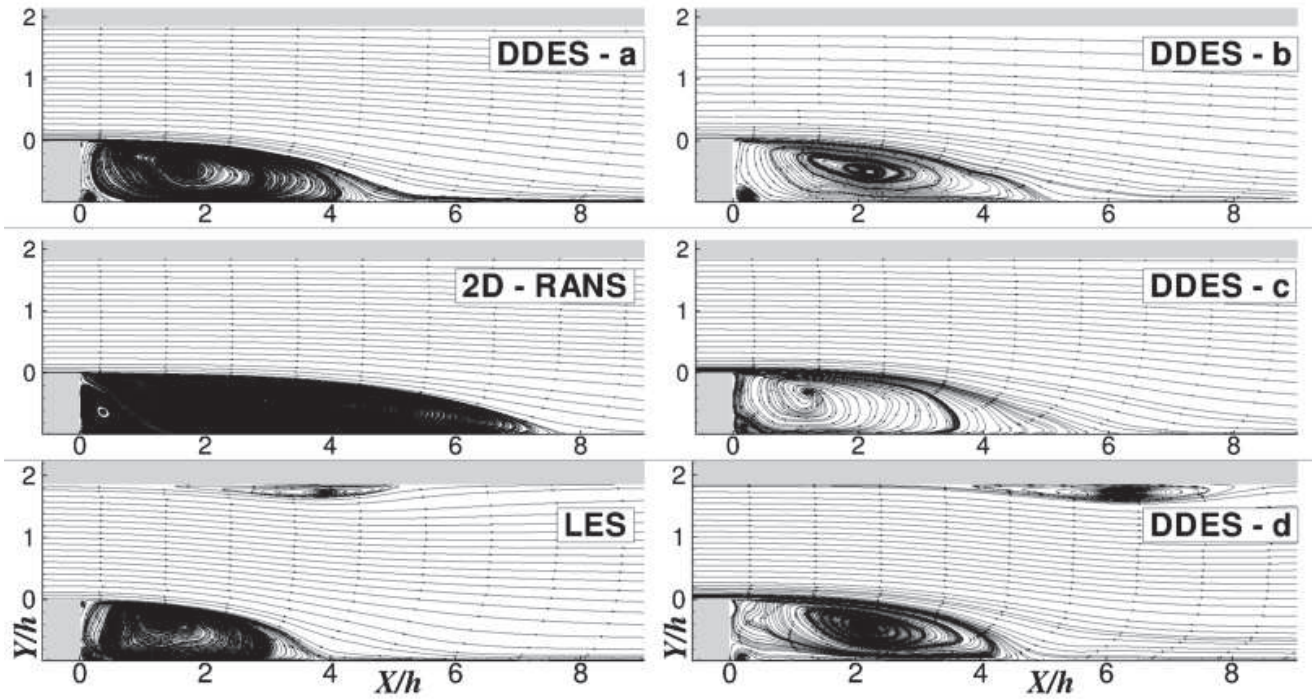


FIGURE 6.4 – Lignes de courant moyennées pour l'ensemble des calculs en écoulement inerte

Longueur de recirculation

Dans un premier temps, il est intéressant de comparer les longueurs de recirculation obtenues par le calcul avec la valeur expérimentale [122]. En extrapolant la position du point de vitesse nulle sur la paroi inférieure à partir des vitesses mesurées dans la recirculation, on peut estimer que le point de recollement moyen est situé à une distance L_r de la marche, telle que $0,15 \text{ cm} < L_r < 0,21 \text{ cm}$ soit $4,3 < L_r/h < 6$. L'ensemble des résultats de calcul est présenté dans le tableau 6.2. On peut constater que les valeurs obtenues en DDES se situent vers la borne supérieure de la longueur expérimentale alors que la LES tend vers la borne inférieure. En revanche, le résultat RANS surestime largement cette grandeur. Les résultats pour les maillages I et II sont de plus très proches pour la DDES, ce qui semble indiquer que la convergence

en maillage est atteinte. En outre, le nombre de sous-itérations du schéma de Gear n'a pas d'influence sur ce résultat. Il est à noter que, dans des conditions similaires ($Re_h = 40\,000$, $U_0 = 44\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$), Driver *et al.* obtiennent une valeur expérimentale 6,1 pour L_r/h [56]. Pour des nombres de Reynolds plus faible (de 3800 à 16 000), Lee et Sung obtiennent des mesures de L_r/h telles que $5 < L_r/h < 6,5$ [109].

TABLE 6.2 – Longueurs de recirculation moyennes normés par la hauteur de la marche

	LDV	DDES-A	DDES-B	LES	RANS
L_r/h	$4,3 < - < 6$	5,1	4,8	4	7,8

6.2.2 Comparaison des profils avec ceux de LDV

Les simulations sont à présent confrontées aux mesures expérimentales des champs moyens de vitesse obtenues par LDV [122].

Comparaison des moments statistiques du premier ordre

La comparaison des vitesses moyennes et fluctuantes (RMS) définies selon les conventions détaillées à l'annexe A sont réalisées. Les profils de vitesse longitudinale moyenne $\tilde{u}$ et fluctuante u'_{RMS} normés par U_0 sont tracés figures 6.5) et 6.7) respectivement. Les vitesses verticales moyennes $\tilde{v}$ et v'_{RMS} sont tracés figures 6.6) et 6.8).

Au niveau des valeurs moyennes de vitesse longitudinale (figure 6.5), les calculs sont en bon accord avec les valeurs expérimentales dans la partie basse de la chambre pour les 6 premiers profils, c'est à dire jusqu'à la moitié de la longueur de recirculation. Dans la partie haute de la chambre, on peut noter deux types de comportements. D'une part, pour les calculs DDES-a/b/c et 2D-RANS l'écoulement reste attaché à la paroi supérieure. D'autre part, les calculs DDES-d et LES présentent des zones de vitesse négative proche de la paroi, ce qui traduit l'occurrence de décollements situées respectivement entre $X/h = 2,3$ et $X/h = 4,5$ pour la LES et entre $X/h = 3,8$ et $X/h = 8$ pour le calcul DDES-d. Pour le calcul LES, ce décollement est symptomatique de la quasi-laminarité de l'écoulement pariétal. En effet, le maillage n'étant pas suffisamment fin pour résoudre spatialement les structures turbulentes dans la zone proche paroi, un décollement précoce et non physique apparaît, qualifié de « décollement induit par le maillage » (en anglais grid induced separation – GIS –). Pour le calcul DDES-d, ce décollement au niveau de la paroi haute traduit une protection insuffisante de la couche limite supérieure pour laquelle le phénomène de MSD (c'est à dire de sous évaluation des tensions de Reynolds modélisées) se transforme en GIS. Dans le prolongement de la chambre de combustion, les profils de vitesse pour les calculs LES et DDES présentent un bon accord avec les valeurs expérimentales. Le 2D-RANS est, par ailleurs, d'une moins bonne qualité avec en particulier la surestimation de la longueur de recirculation. Il est de plus intéressant de remarquer que l'écart entre les calculs DDES-a/b/c sont minimales.

En ce qui concerne les vitesses verticales moyennes (figure 6.6) les écarts entre les différents calculs sont plus importants que pour les vitesses longitudinales. Les calculs DDES-a et DDES-b sont équivalents et en bon accord avec les profils expérimentaux jusqu'à $X/h = 3,4$. Le calcul 2D-RANS a tendance à sous-estimer le niveau de vitesse verticale, contrairement à la LES qui fait apparaître une déviation importante de l'écoulement, notamment près de la paroi supérieure, se traduisant par le décollement évoqué précédemment. En aval du point de recollement, il faut noter que tous les calculs ont tendance à sous-estimer la déviation de l'écoulement dans la partie basse de la chambre. Cet écart peut-être expliqué par l'existence de couches limites latérales non prises en compte dans les simulations.

Concernant les profils de vitesses RMS, il apparaît d'une manière générale que l'ensemble des calculs ont tendance à surestimer le pic de RMS ainsi que la largeur correspondant à la couche de cisaillement. Un

élément de justification de cette tendance est la non prise en compte des couches limites latérales. Celles-ci ont pour effet de rendre moins cohérentes les structures turbulentes ce qui entraîne une diminution du niveau de turbulence. De plus, l'existence de modes quart d'onde liés à l'utilisation de conditions aux limites partiellement réfléchissantes en sortie de chambre peut également expliquer cette surestimation. En effet, l'énergie acoustique provenant des ondes réfléchies au niveau de la sortie peut être transférée aux fluctuations de vitesse. En outre, il est à noter que le calcul DDES-d donne des résultats de meilleure qualité que les autres approches dans la partie basse de la chambre. La fonction de protection $f_{d_{Spalart}}$ protégeant moins la couche limite que $1 - F_1$, la déstabilisation de la couche de mélange s'effectue plus près de la marche. Les structures turbulentes créées au niveau de la marche sont alors plus rapidement décorrélées, ce qui diminue la valeur du pic. L'apparition de recirculations au niveau de la paroi haute est vérifiée également pour les calculs LES et DDES-d qui présentent un second pic au niveau des profils de RMS. Notons enfin que, dans la partie haute de la chambre, les niveaux de RMS sont sous-estimés par rapport aux valeurs expérimentales. Cela est dû à la non prise en compte de fluctuations en entrée de chambre. Le lecteur est invité notamment à consulter la référence [186] qui présente une méthode permettant de prendre en compte ce type de fluctuations en LES.

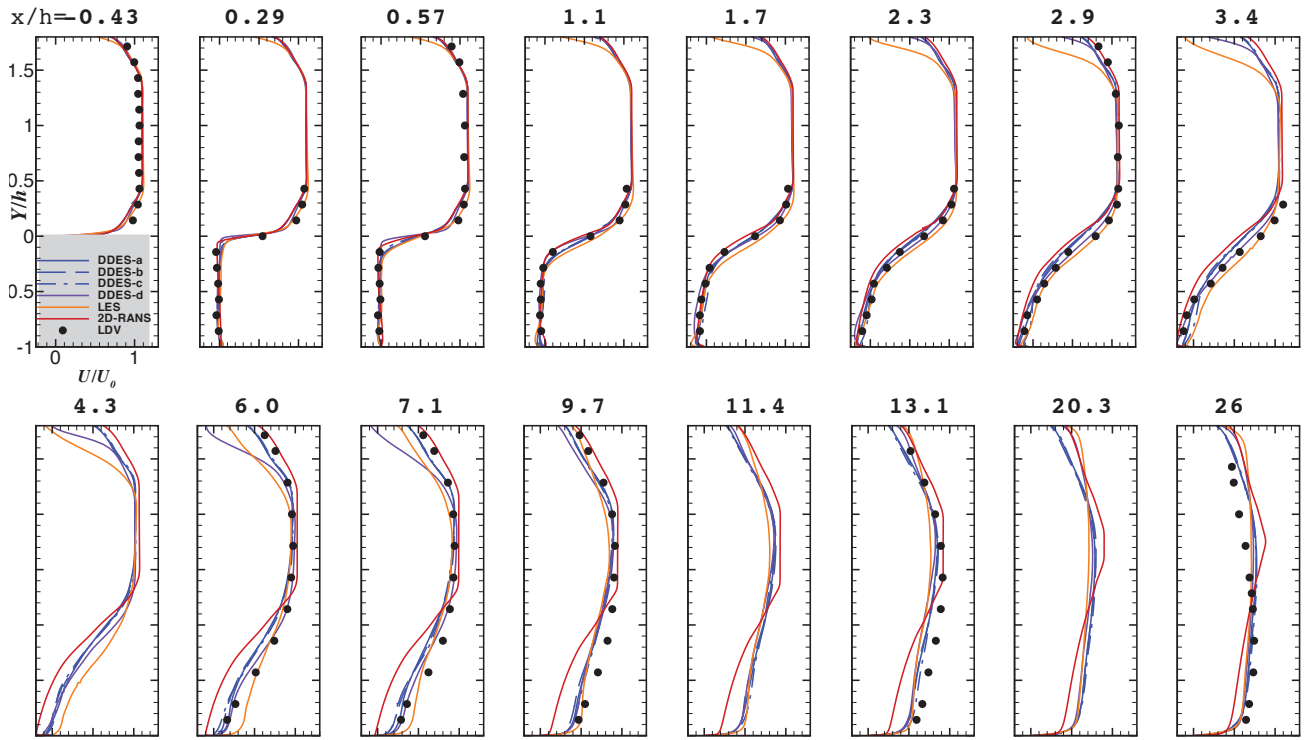


FIGURE 6.5 – Profils de vitesse longitudinale moyenne normée par U_0 pour le cas inerte (légende sur la figure)

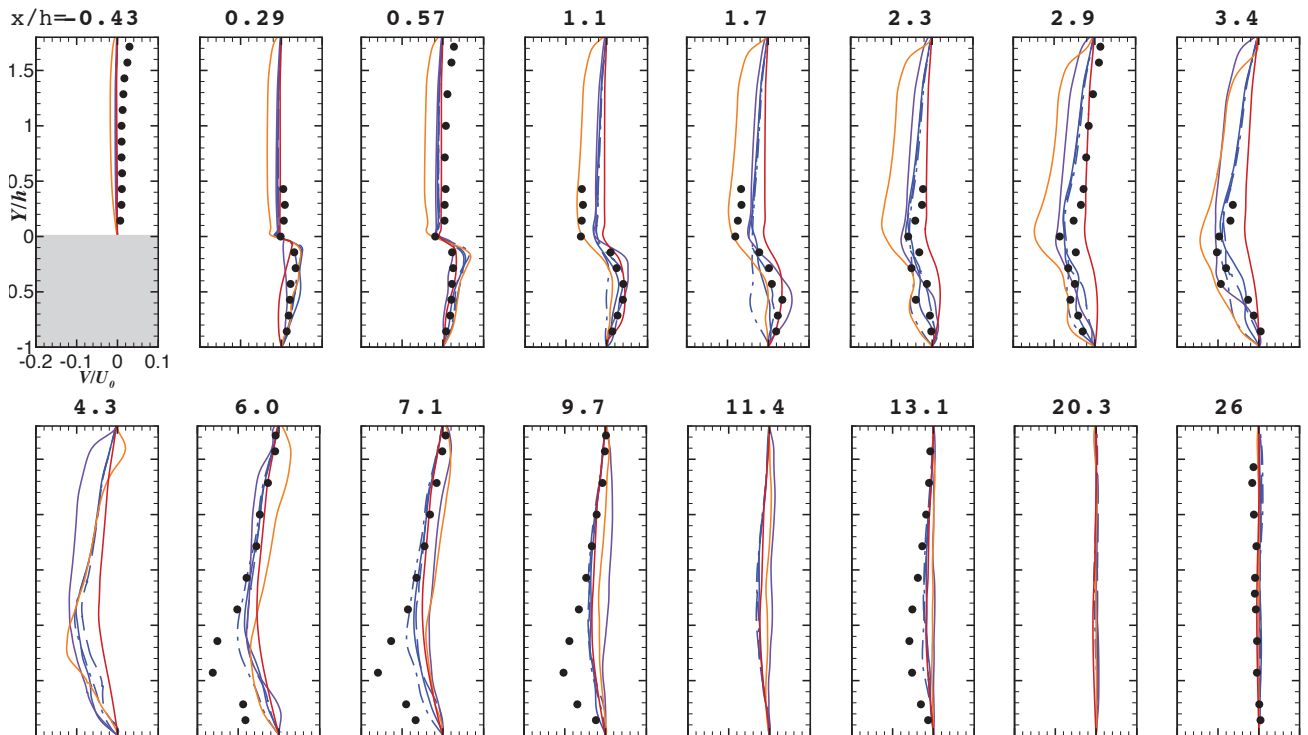


FIGURE 6.6 – Profils de vitesse verticale moyenne normée par U_0 , même légende que figure 6.5

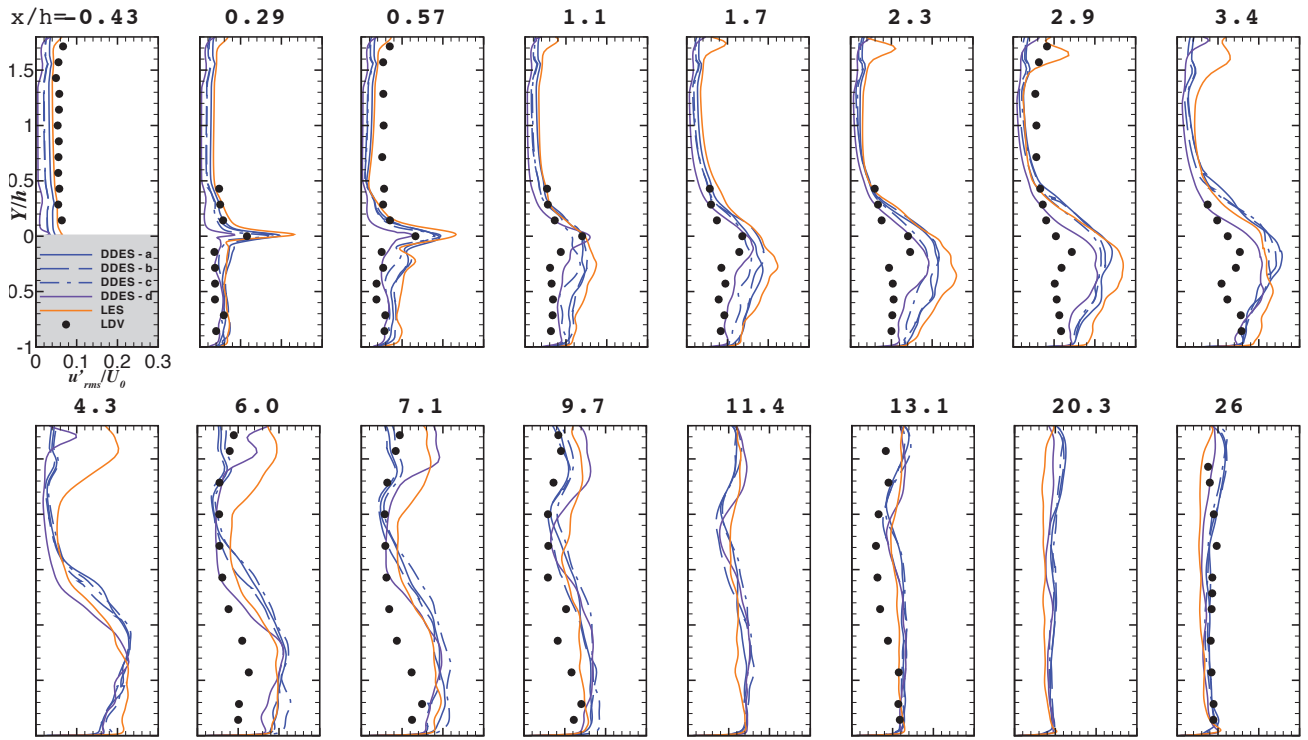


FIGURE 6.7 – Profils de fluctuations RMS de vitesse longitudinale normée par U_0 , même légende que figure 6.5

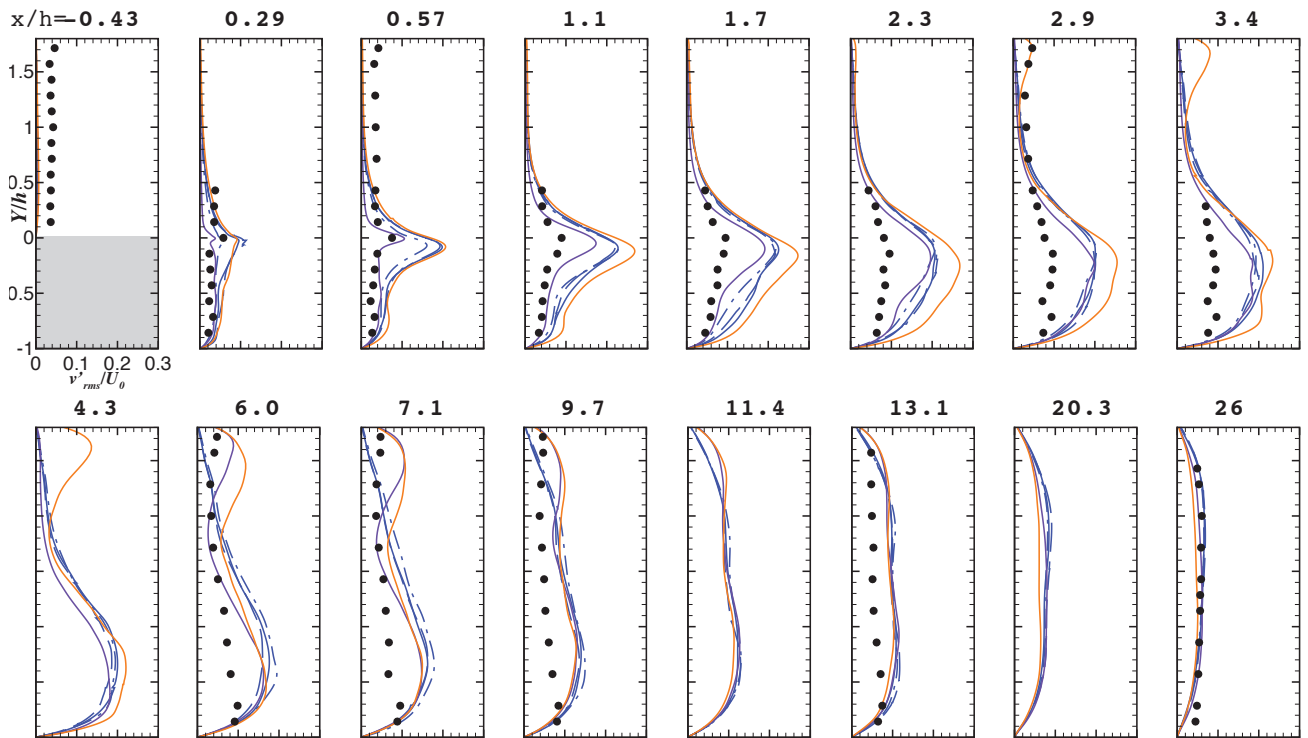


FIGURE 6.8 – Profils de fluctuations RMS de vitesse verticale normée par U_0 , même légende que figure 6.5

6.2.3 Analyse de la couche de mélange et de la zone décollée

Épaisseur de vorticit  et de quantit  de mouvement

L' volution de la vitesse longitudinale au sein d'une couche de m lange peut- tre d crite par deux grandeurs int grales : l' paisseur de quantit  de mouvement θ et l' paisseur de vorticit  δ_ω . Pour une couche de m lange se d veloppant suivant l'axe X ces deux grandeurs sont d finies comme suit :

$$\theta(x) = \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \frac{\tilde{u}(x, y) - \tilde{u}_{\min[y]}(x)}{\tilde{u}_{\max[y]}(x) - \tilde{u}_{\min[y]}(x)} \left(1 - \frac{\tilde{u}(x, y) - \tilde{u}_{\min[y]}(x)}{\tilde{u}_{\max[y]}(x) - \tilde{u}_{\min[y]}(x)} \right) dy \quad (6.1)$$

$$\delta_\omega(x) = \frac{(\tilde{u}_{\max[y]} - \tilde{u}_{\min[y]})(x)}{\max[y] \frac{\partial \tilde{u}(x, y)}{\partial y}}. \quad (6.2)$$

L' paisseur de vorticit  au sein de la couche de m lange d velopp e en aval de la marche est trac e figure 6.9 pour les calculs LES, DDES -a et 2D-RANS ainsi que pour les r sultats issus de la LDV.

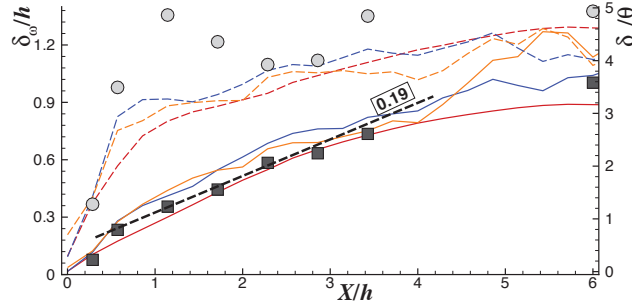


FIGURE 6.9 – * paisseur de vorticit  norm e par la hauteur de marche ou par l' paisseur de quantit  de mouvement (—/— : DDES-a ; —/— : 2D-RANS ; —/— : LES ; ■/● : LDV).*

Sur cette figure, il appara t que l' paisseur de vorticit  norm e par la hauteur de marche suit une  volution exponentielle de $X/h = 0$   $X/h = 0,5$ en accord avec la th orie de la stabilit  lin aire pour une couche de m lange plane. Cette tendance est bien reproduite par les calculs LES et DDES-a contrairement au calcul RANS qui a tendance    voluer lin airement d s le coin de la marche. Le d veloppement de la couche de m lange suit une loi lin aire de pente 0,19 l g rement sur valu e pour les calculs LES et DDES-a. De plus grands  carts apparaissent au niveau du profil d' paisseur de vorticit  norm e par l' paisseur de quantit  de mouvement. Cet effet est d    une surestimation de l' paisseur de quantit  de mouvement qui est probablement provoqu e par la non prise en compte des parois lat rales.

Coefficients de pression dans la chambre

L' volution de la pression dans ce type de configuration est un  l ment fr quemment analys  par les a rodynamiciens. L'analyse s'appuie sur le coefficient de pression C_p moyen et sa fluctuation RMS qui sont d finis comme suit :

$$C_p = \frac{\tilde{p} - p_{inlet}}{1/2\rho U_0^2} \quad (6.3)$$

$$C_{pRMS} = \frac{p'_{RMS}}{1/2\rho U_0^2} \quad (6.4)$$

Les approches DDES, LES et 2D-RANS sont compar es figure 6.10 o  sont reproduites des lignes de iso- C_p ainsi que les champs du module de vitesse dans le plan m dian. Sur ces figures, il appara t que les niveaux et la forme des lignes obtenues en 2D-RANS et DDES-a sont similaires. N anmoins les lignes du calcul 2D-RANS sont plus  tir es   cause d'une recirculation plus allong e. En revanche des diff rences

plus importantes apparaissent au niveau du calcul LES pour lequel les niveaux observés sont beaucoup plus faibles dans la recirculation ce qui traduit une dépression plus forte à l'origine du raccourcissement de la longueur de recirculation.

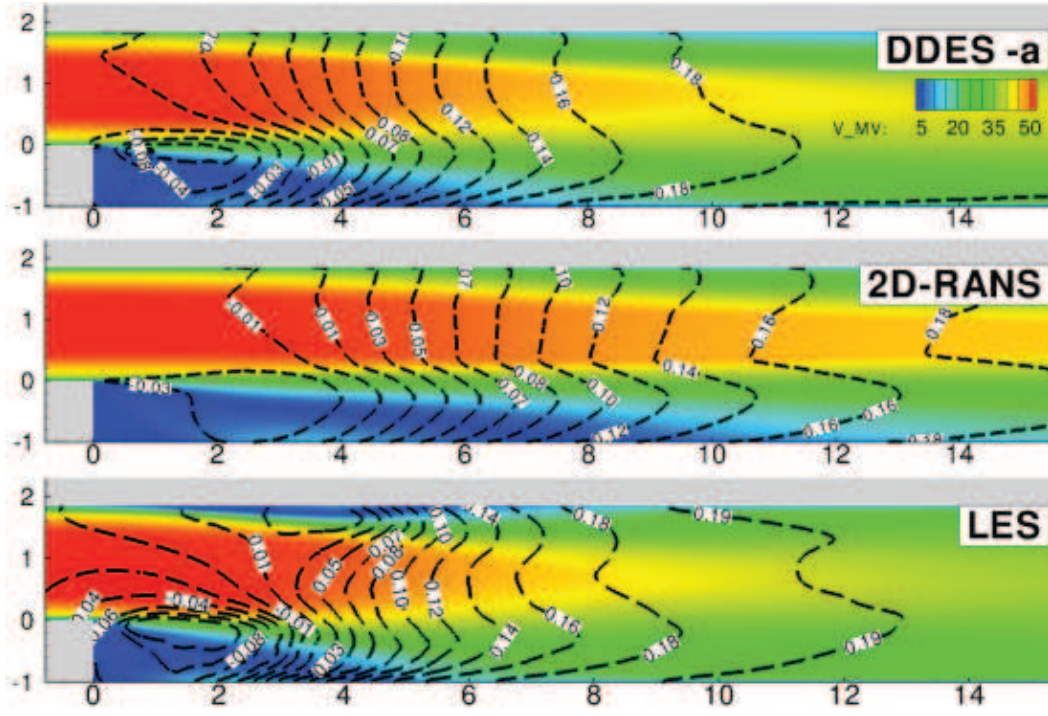


FIGURE 6.10 – Iso-lignes de C_p et champ de $|\tilde{u}|$ moyen pour les trois modèles DDES -a, 2D-RANS et LES

Les profils de C_p et de C_{pRMS} (LES et DDES) sont également reproduits pour les parois hautes et basses de la chambre figure 6.11. La similitude entre 2D-RANS et DDES-a ainsi que la différence évoquée pour la LES concernant les niveaux et la distribution spatiale vaut également pour les coefficients de pression au niveau des parois. Au niveau des fluctuations RMS pour les calculs LES et DDES-a, le pic de fluctuation situé au niveau du recollement est plus important en LES, ce qui signifie que les structures turbulentes cohérentes développées dans la couche de mélange sont plus énergétiques, la recirculation étant plus courte qu'en DDES-a. De plus, on peut constater que le niveau de fluctuation en amont et au niveau de la marche n'est pas nul, ce qui traduit une variation du débit dans le canal amont au cours du calcul qui sera analysée par la suite. Il est également important de noter que les fluctuations du calcul LES présentent un premier plateau vers $X/h = 2,5$ pour la paroi basse alors qu'on observe un pic pour la paroi haute. Cela traduit l'influence de la recirculation supérieure sur les fluctuations de coefficients de pression.

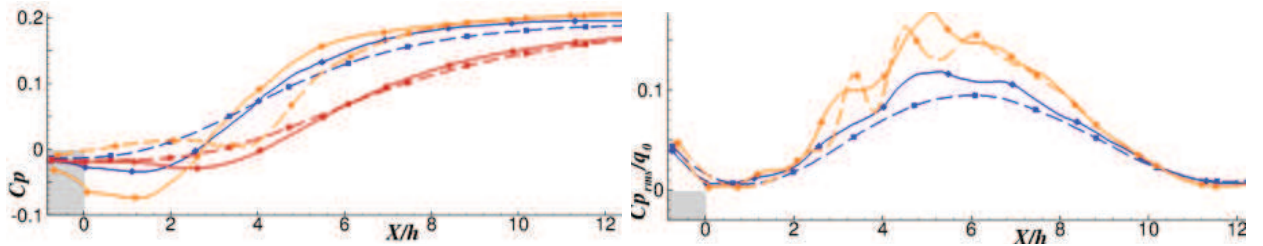


FIGURE 6.11 – Evolution de C_p (gauche) et $C_{pRMS}/0,5\rho U_0^2$ (droite) aux parois hautes et basses (—/- : DDES-a; - - - : 2D-RANS; —/- - : LES).

Critère de Pope

Afin d'évaluer la qualité des maillages employés, l'énergie cinétique turbulente de sous-maille est comparée à l'énergie cinétique turbulente grâce à un critère M_{Pope} (Pope [153]) défini par :

$$M_{Pope} = \frac{k_{SGS}}{k_{SGS} + k_{resol}}, \quad (6.5)$$

où k_{SGS} est l'énergie cinétique de sous-maille et k_{resol} est l'énergie cinétique des structures turbulentes résolues. Sagaut [166] propose une modélisation pour k_{SGS} :

$$k_{SGS} = \left(\frac{\nu_{SGS}}{C_m \Delta} \right)^2 \quad (6.6)$$

Cette modélisation est fondée sur des analyses de turbulence homogène isotrope. La constante C_m est évaluée à environ 0,0914. Dans le cas de la LES, ν_{SGS} est défini comme $\nu_{SGS} = (C_S \Delta)^2 \sqrt{\langle \tilde{\mathbf{S}} \rangle : \langle \tilde{\mathbf{S}} \rangle}$. Il faut noter qu'en DDES le critère de Pope n'est applicable que dans les zones décollées traitées en mode LES. Dans ces zones, et comme il a été montré dans le chapitre 1 (équation 3.47), on peut assimiler k/ω à une viscosité sous-maille. De plus, la définition de l'échelle Δ étant dépendante du modèle, on prendra $\Delta = D_h$ en LES et $\Delta = (V)^{1/3}$ pour la DDES. Enfin, k_{resol} est égal à $1/2 (\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_i \rangle - \langle \tilde{u}_i \rangle \langle \tilde{u}_i \rangle)$. Ce critère est par définition compris entre 0 et 1. Les valeurs proches de 0 correspondent aux zones où le maillage est suffisamment fin pour la résolution des grandes échelles et où la partie sous-maille est négligeable. En revanche lorsque M_{Pope} tend vers 1, la partie résolue devient négligeable devant la partie sous-maille. Des champs de M_{Pope} sont tracés pour les calculs DDES-a, DDES-c et LES figure 6.12. De façon générale, le critère de Pope est faible en aval de la marche pour les trois calculs. L'influence du raffinement du maillage se fait légèrement sentir entre les calculs DDES-a et DDES-c. Au coin de la marche le critère M_{Pope} prend des valeurs plus élevées dans les calculs DDES que dans le calcul LES. L'intérêt d'utiliser une approche RANS sur ce type de cas est confirmé par le fait que le critère de Pope prend des valeurs très élevées dans les couches limites attachées pour le calcul LES.

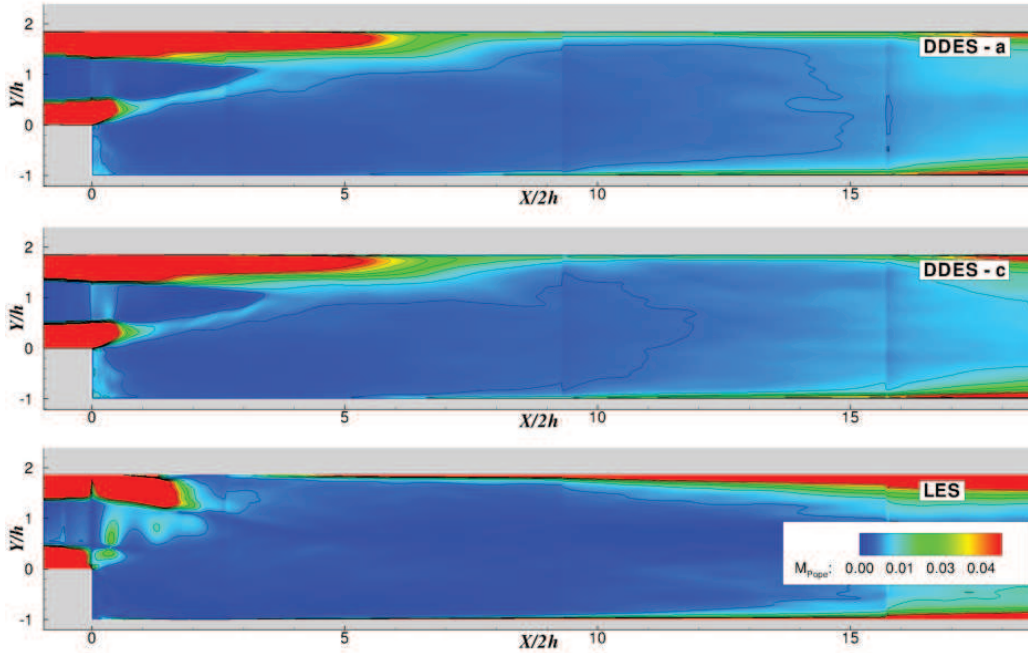


FIGURE 6.12 – Champs de critère de Pope pour les calculs DDES -a, DDES -c et LES

6.3 Etude de la dynamique du décollement

6.3.1 Dynamique de la couche de mélange

Comparaison des modèles

Les structures tourbillonnaires résolues dans les simulations instationnaires peuvent être matérialisées par une surface de critère $Q > 0$. Il s'agit du second invariant du tenseur de déformation, il est ainsi défini :

$$Q = -\frac{1}{2}(\tilde{\Omega} : \tilde{\Omega} - \tilde{S} : \tilde{S}) \quad (6.7)$$

où

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{2} [\nabla \tilde{u} - (\nabla \tilde{u})^t] \quad (6.8)$$

L'avantage de ce critère est d'isoler uniquement les composantes rotationnelles du tenseur de déformation. Ces structures instantanées sont tracées pour $Q(h/U_0)^2 = 0, 1$ pour les calculs DDES-a, DDES-c, DDES-d, LES.

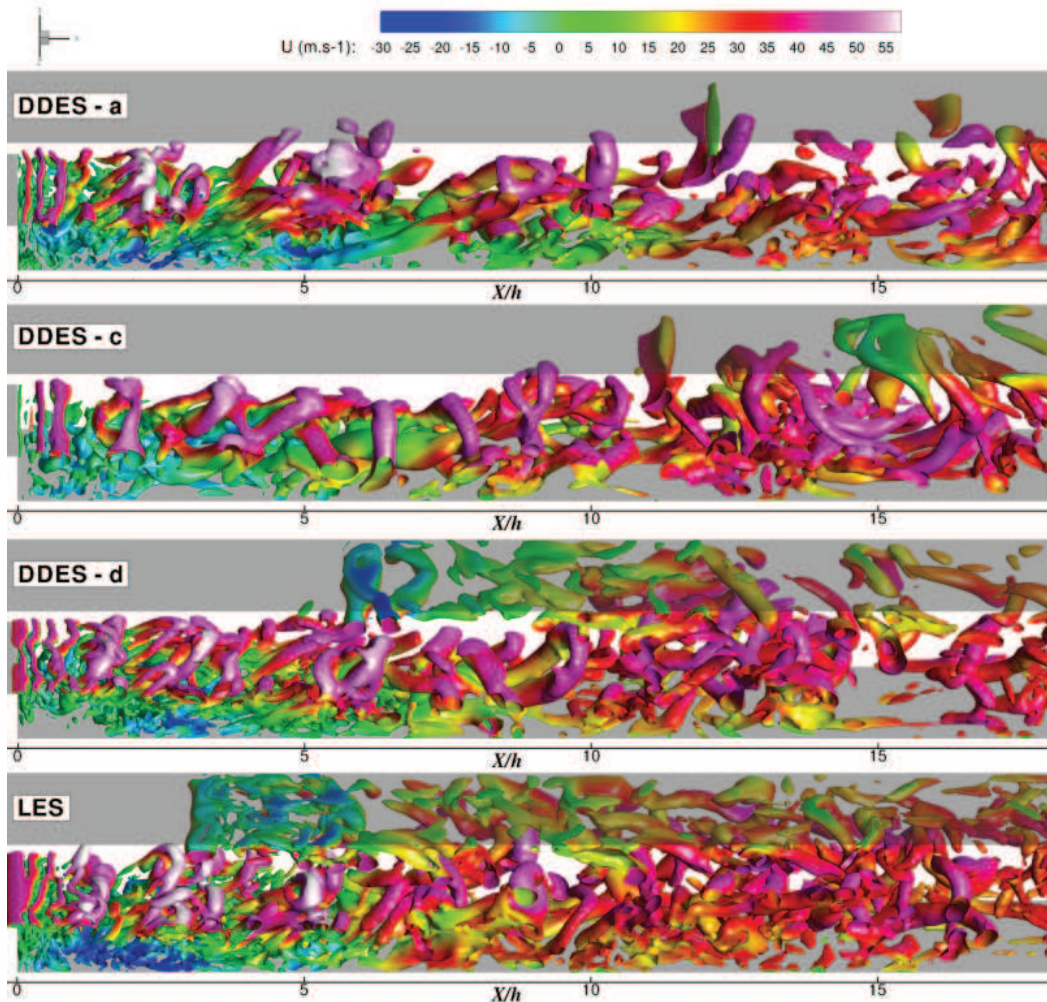


FIGURE 6.13 – Structures tourbillonnaires colorées par la vitesse longitudinale

Sur la figure 6.13, on observe un comportement équivalent pour les quatre cas. En particulier les structures observées sont en accord avec des études numériques réalisées par Silveira Neto *et al.* [127] et par Le *et al.* [108]. Au niveau de la marche, la forme des tourbillons est quasi 2D et ce comportement est caractéristique du lâcher tourbillonnaire lié à une instabilité de Kelvin-Helmoltz. En aval, ces structures

2D se désorganisent en larges structures 3D allongées dans le sens de l'écoulement. On peut noter l'apparition de structures particulières en forme de fer à cheval. Lorsque l'écoulement se rapproche de la paroi, la rencontre avec celle-ci se manifeste par l'éclatement et l'étirement de ces structures. En outre, de nombreuses structures plus fines alimentent la zone recirculée et se combinent avec les tourbillons de la partie haute de la couche de mélange. Il faut noter néanmoins quelques différences entre les quatre cas présentés figure 6.13. L'utilisation d'un maillage plus fin dans la direction transverse pour le calcul DDES-a se manifeste par des tourbillons plus fins dans le décollement ainsi qu'un écoulement de retour plus fourni en structures cohérentes comparativement au calcul DDES-c. On constate que la diminution du nombre de points dans cette direction produit des structures plus larges et davantage bidimensionnelles (DDES-c). De plus, l'analyse effectuée dans la section précédente concernant l'occurrence d'une recirculation au niveau de la paroi supérieure pour les calculs DDES-d et LES est ici vérifiée. En effet, pour ces deux calculs, l'apparition de tourbillons au niveau de la paroi supérieure caractérisent un décollement. Le décollement au niveau de la paroi supérieure est plus précoce pour le calcul LES.

Analyse du lâcher tourbillonnaire pour le calcul DDES-a

Pour mettre en évidence la dynamique de l'écoulement au cours du temps, il est intéressant d'observer sur la figure 6.14 l'évolution des structures tourbillonnaires et de la vitesse longitudinale. D'une part, le phénomène de lâcher tourbillonnaire lié à l'instabilité de Kelvin-Helmholtz au coin de la marche est ici clairement illustré. On peut évaluer la période de ce lâcher à environ 2,4 ms, ce qui correspond à une fréquence f_0 d'environ 420 Hz. Le nombre de Strouhal permet d'obtenir un adimensionnement d'une fréquence f basé sur une longueur caractéristique l et une vitesse caractéristique U_0 de la façon suivante :

$$St_l = \frac{fl}{U_0}. \quad (6.9)$$

Pour la fréquence f_0 , on obtient St_h égal à environ 0,29 et St_{L_r} à environ 1,48. Cette valeur de St_h est compatible avec la plage de Strouhal couramment obtenue pour ce type d'écoulement (allant de 0,06 à 2) comme l'indique Courtois dans sa thèse [36]. La comparaison en terme de Strouhal avec d'autres cas ne permet pas de conclure quant à l'origine purement hydrodynamique de cette fréquence étant donné la largeur de cette plage. L'analyse des spectres de pression et de vitesse verticale au paragraphe 6.3.2 permet quant à elle de mieux expliquer l'origine de cette fréquence.

L'interaction entre les tourbillons au niveau du décollement est également illustrée. Le phénomène de « pairing » *i.e.* d'appariement de tourbillons¹, est mis en évidence entre t_0 et $t_0 + 1,2$ ms (cercles rouges), le « flapping » qui correspond au macro-mouvement du décollement est observable au niveau du champs de vitesse (traits blancs). Enfin, plus en aval, des tourbillons allongés et obliques par rapport à l'écoulement sont caractéristiques du recollement, ils peuvent être observés de $t_0 + 3,6$ ms à $t_0 + 4,2$ ms (cercle blanc). Le caractère plus basse fréquence de ces phénomènes est également mis en évidence.

1. ce phénomène relève de la cascade inverse de l'énergie cinétique turbulente

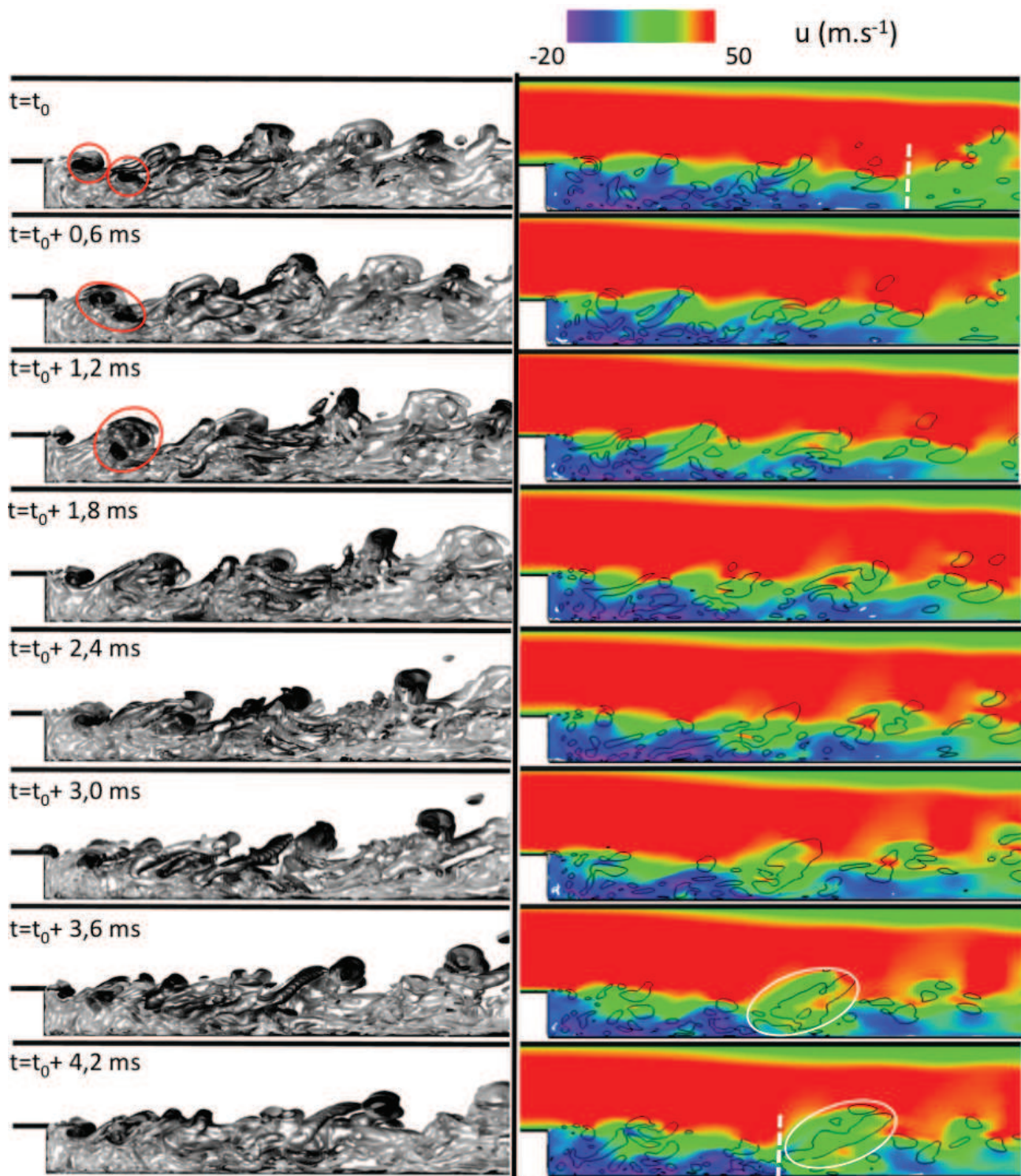


FIGURE 6.14 – Evolution des structures tourbillonnaires ($Q(h/U_0)^2 = 0.1$) colorées par $|\nabla\rho|$ (gauche) et du champ de vitesse longitudinale (les iso-lignes en noir correspondent à $Q(h/U_0)^2 = 0.4$) dans le plan médian (droite)

6.3.2 Analyse spectrale de l'écoulement décollé

Signaux de pression

Afin d'exhiber les propriétés spatio-temporelles de l'écoulement simulé, une analyse fréquentielle est réalisée au niveau de certains capteurs situés dans la recirculation et au niveau de la paroi. Les signaux de pression sont enregistrés au niveau des capteurs évoqués lors de la présentation du cas test durant un temps physique de 0,15 s. Deux zones distinctes font l'objet de cette analyse : la recirculation, d'une part, via les capteurs a, b, c et d, la paroi, d'autre part, grâce aux capteurs e, f, g et h. La position de ces capteurs est donnée au tableau 6.3 et figure 6.15.

TABLE 6.3 – Position des capteurs

Cap.	X/h	Y/h	Z/h	Cap.	X/h	Y/h	Z/h
a	0,11	0	1	e	0	-1	1
b	0,7	-0,005	1	f	1,1	-1	1
c	3,4	-0,4	1	g	2,3	-1	1
d	4,9	-1	1	h	3,4	-1	1

Les signaux de pression observés au niveau des capteurs étant périodique, des spectres de pression ont

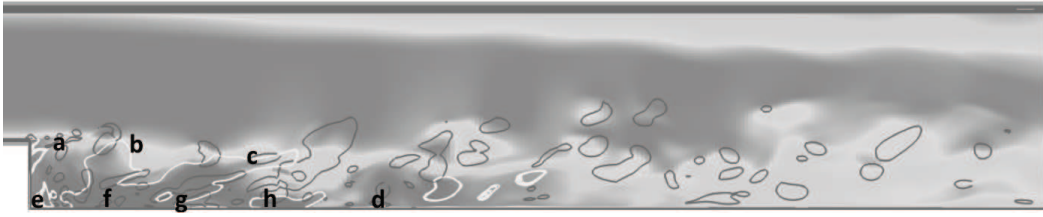


FIGURE 6.15 – Position des 8 capteurs retenus superposés sur un champ de vitesse présentant des iso-lignes de critère Q et de vitesse longitudinale nulle

été calculés par la méthode du périodogramme six blocs. La résolution fréquentielle est donc $\Delta f = 40$ Hz. Les niveaux sont exprimés en Sound Pressure Level ($SPL(f)$ en $\text{dB} \cdot \text{Hz}^{-1}$) définis par :

$$SPL(f) = 20 \log_{10} \left(\frac{\sqrt{G(f)}}{p_{ref}} \right) \quad (6.10)$$

où p_{ref} , égal à $20 \mu\text{Pa}$, est le seuil d'audibilité par l'oreille humaine et $G(f)$ la densité spectrale de puissance des fluctuations de pression. La figure 6.16 présente les spectres de pression au niveau de quatre capteurs situés dans le décollement (a, b, c, d) en DDES-a et DDES-b. Les résultats obtenus pour le calcul LES sont donnés pour les deux premiers capteurs. En général, on peut constater que les trois approches donnent des résultats similaires avec l'existence d'un pic principal à environ 440 Hz qui correspond à la fréquence de lâcher tourbillonnaire mise en évidence au paragraphe 6.3.1. Près de la marche, on constate que les niveaux sont plus élevés pour le calcul DDES-b que pour le calcul DDES-a. En revanche, lorsqu'on s'éloigne de la marche, les niveaux ont tendance à être inférieurs au calcul DDES-a. Cette observation s'explique par une intégration temporelle moins dissipative pour le cas DDES-b (schéma de Gear sous-itéré 5 fois). Pour le calcul DDES-a la perturbation provoquée par le décollement au niveau de la marche est plus intense, mais les tourbillons en aval ont tendance à se dissiper plus rapidement que pour les autres calculs.

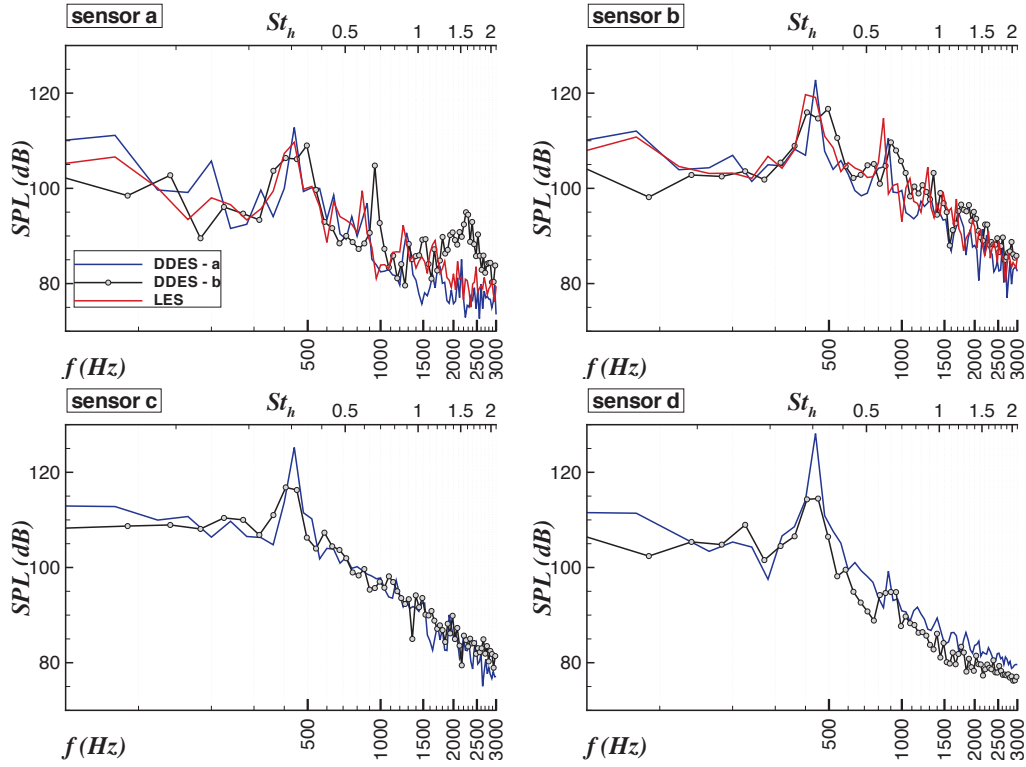


FIGURE 6.16 – Spectres de pression (en $\text{dB} \cdot \text{Hz}^{-1}$) pour les capteurs a, b, c et d situés au niveau de la ligne de recirculation moyenne

Signaux de vitesse verticale

Si l'on considère la densité spectrale de puissance de vitesse verticale $G_v(f)$ exprimée en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ on peut écrire,

$$\sigma^2 = \int_0^\infty G_v(f) df \quad (6.11)$$

où σ^2 représente la puissance totale des fluctuations de vitesse verticale (en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$). L'évolution de σ^2 est tracée au niveau des capteurs le long de la recirculation 6.17. Sur cette figure on peut constater que les fluctuations de vitesse augmentent progressivement dans la couche de mélange puis atteignent un plateau entre $X/h = 1$ et $X/h = 3,5$ avant de décroître à l'approche du recollement fluide. Cette observation est cohérente avec la forme des profils de v'_{RMS} représentés figure 6.8.

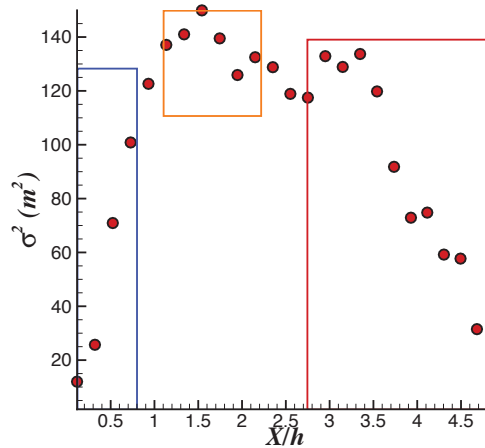


FIGURE 6.17 – Evolution de la puissance des signaux de vitesse verticale en fonction de la position longitudinale des capteurs le long de l'enveloppe de recirculation

Afin d'étudier la distribution dans l'espace fréquentiel de ces fluctuations et de les relier aux spectres de pression analysés au paragraphe précédent, des spectres normalisés ont été tracés dans les trois régions correspondant respectivement à la zone encadrée en bleu (de croissance de σ^2), en orange (plateau) et en rouge (décroissance) :

- dans la zone où la couche de mélange se développe à partir du coin de la marche (croissance de σ^2), la distribution spectrale des fluctuations de vitesse verticale est concentrée sur la fréquence de lâcher tourbillonnaire ;
- au niveau du plateau, c'est à dire dans la zone où les mécanismes de regroupement de tourbillon et d'oscillation de la couche de mélange permettent d'entretenir la turbulence, on peut observer un élargissement de la bande spectrale et un transfert vers les basses fréquences lorsqu'on avance dans la direction longitudinale comme l'illustre la flèche grise ;
- enfin dans la zone de décroissance c'est à dire à l'approche du recollement solide, les basses fréquences deviennent majoritaires, traduisant le mouvement à macro-échelle du bulbe de recirculation. Le spectre devient alors spectre à très large bande et le pic à 440 Hz disparaît.

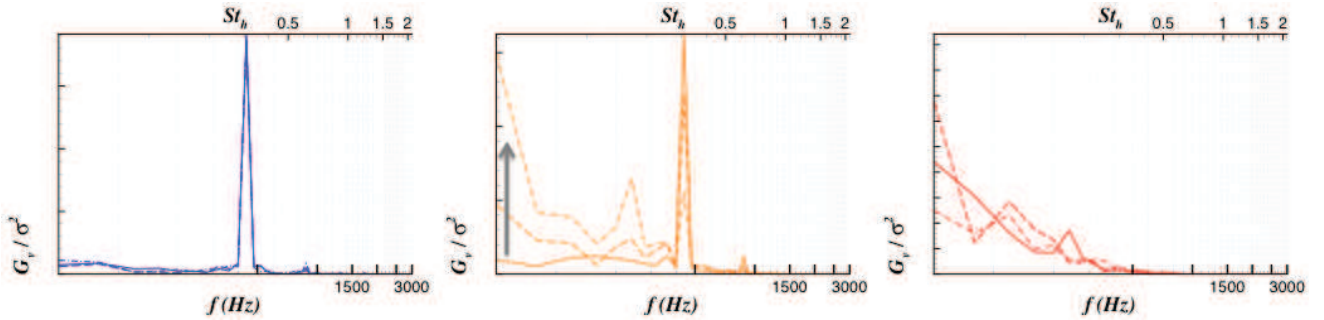


FIGURE 6.18 – Spectres de vitesse verticale pour des groupes de capteurs positionnés dans les trois zones distinguées à la figure 6.17

Bilan de l'étude de l'écoulement inerte

Plusieurs enseignements sont à tirer des simulations numériques de la chambre en forme de marche descendante en inerte :

- La comparaison des écoulements moyennés met en évidence une différence de topologie entre les trois approches RANS, LES et DDES. En particulier, les approches LES et DDES-d (utilisant la fonction de protection proposée à l'origine pour la DDES [190]) fait apparaître un décollement non physique au niveau de la paroi supérieure de la chambre. Ce résultat illustre le phénomène de séparation induite par le maillage (GIS) lié à une sous-évaluation de la viscosité turbulente modélisée dans la couche limite supérieure. Les résultats obtenus en DDES au niveau des profils de vitesses moyennes sont globalement en bon accord avec les mesures par LDV et, d'une façon générale, les propriétés aérodynamiques moyennes de l'écoulement sont correctement reproduites par les calculs DDES. Ces résultats sont par ailleurs d'une qualité nettement supérieure à ceux obtenus en RANS.
- Au niveau des fluctuations RMS pour les calculs instationnaires, on peut remarquer d'une manière générale une surestimation probablement provoquée par les conditions partiellement réfléchissantes au niveau de la condition au limite en sortie de chambre.
- Enfin, il a été montré que la résolution des structures tourbillonnaires en DDES est suffisante pour mettre en évidence un certain nombre de phénomènes permettant une analyse physique poussée.

En conclusion, on peut considérer que l'approche DDES a été validée pour l'écoulement inerte étant donné la qualité des résultats obtenus. Le prochain chapitre a comme objectif d'appliquer cette méthode à l'écoulement réactif de méthane-air prémélangé pauvre.

Chapitre 7

Simulation de l'écoulement réactif prémélangé pauvre dans la chambre A3C

Table des matières

7.1	Présentation des calculs et premières validations	86
7.1.1	Calculs réalisés	86
7.1.2	Choix du pas de temps	86
7.1.3	Validation de l'approche Dynamic Thickened Flame	87
7.1.4	Validation de la DDES	88
7.2	Analyse de l'écoulement moyen	89
7.2.1	Evolution de la température moyenne et fluctuante dans la chambre	89
	Comparaison avec les mesures	89
	Température à la paroi	90
7.2.2	Etude des champs de vitesses moyennes	92
	Analyse de la recirculation moyenne	92
	Comparaison des vitesses moyennes avec les mesures LDV pour les calculs DDES, LES et 2D-RANS	93
	Influence du mode quart d'onde sur les vitesses moyennes	93
	Épaisseur de quantité de mouvement et de vorticité	98
7.2.3	Positionnement des calculs sur des diagrammes de combustion turbulente	98
7.3	Dynamique de l'écoulement réactif en aval de la marche	100
7.3.1	Comparaison des approches	100
	Dynamique de la flamme	100
	Analyse statistique sur la position de la flamme	101
7.3.2	Analyse spectrale	102
	Comparaison DDES - LES	102
	Influence du mode quart d'onde	104

Dans ce chapitre, les résultats moyennés des simulations numériques de l'écoulement réactif dans la chambre A3C sont d'abord analysés et comparés aux expériences pour la vitesse et la température. Ensuite une analyse de la dynamique de la flamme en aval de la marche est réalisée et permet notamment d'illustrer l'influence du mode quart d'onde de la chambre sur la flamme.

In this chapter, the averaged results of the numerical simulations of the reacting flow in the A3C chamber are analyzed and compared to velocity and temperature measurements. Then, the dynamics of the flame is scrutinized and the influence of the quarter wave mode of the chamber is pointed out.

7.1 Présentation des calculs et premières validations

7.1.1 Calculs réalisés

L'objectif de ce chapitre est de comparer la capacité des approches RANS, LES et DDES pour la simulation de l'écoulement réactif dans la chambre A3C. Pour ce faire, quatre calculs dont les caractéristiques sont regroupées dans le tableau 7.1. Pour les calculs LES et DDES, des conditions de non réflexion ont été imposées en sortie de domaine afin d'éviter l'apparition d'instabilités liées au mode quart d'onde mis en évidence pour le calcul inerte. L'influence de ce mode est par ailleurs étudié grâce au calcul DDES-qw (« qw » pour quarter wave en anglais).

TABLE 7.1 – Tableau récapitulatif des calculs réalisés en réactif sur A3C

Cas	Maillage	Turbulence	Intégration temporelle	Combustion	NSCBC
DDES	II	DDES ($1 - F_1$)	Gear 2 sous-itérations	DTF	avec
LES	II	LES (Smago)	Gear 2 sous-itérations	DTF	avec
RANS	2D	$k - \omega$ SST	Euler implicite	Arrhenius	sans

La chimie est prise en compte via une réaction globale à une étape :



Les termes de production d'espèces $\dot{\omega}_i$ sont obtenus grâce à une loi d'Arrhenius dont les coefficients sont extraits des travaux de Westbrook et Dryer [210]. Ils vérifient $A = 6,7 \cdot 10^{+09}$, $\beta = 0$, $T_a = 24\,355\text{ K}$. Des coefficients exotiques sont utilisés pour CH_4 (0, 2) et O_2 (1, 3).

La validation de ce schéma cinétique et l'évaluation des paramètres du modèle DTF sont détaillés en annexe (D.2). Par ailleurs, dans cette annexe sont évoquées les difficultés liées à l'utilisation d'une approche Arrhenius sans modèle de flamme épaissie. Cette étude a notamment montré que sans prise en compte de l'extinction à la paroi les calculs instationnaires font apparaître un phénomène de remontée de flamme par les couches limites non physique. Pour le calcul 2D-RANS aucune modélisation de l'interaction chimie-turbulence n'est prise en compte.

7.1.2 Choix du pas de temps

En réactif, un pas de temps de $1,5\ \mu\text{s}$ a été choisi de façon à vérifier la condition $\max(CFL_a) < 12$. La figure 7.1 donne les champs de CFL_a et CFL_c pour le calcul DDES. Comme en inerte, les zones à fort CFL_a sont localisées au coin de la marche. De plus, ces cellules sont situées au niveau du front de flamme où l'augmentation de la température par rapport au cas inerte se traduit par une augmentation

de la vitesse du son. Pour une même valeur de CFL_a , il est donc nécessaire de baisser le pas de temps par rapport au cas inerte. Il est également intéressant d'observer la répartition des nombres de CFL en terme de densité en nombre de cellules et en volume de domaine de calcul. Cette densité est illustrée par la figure 7.2 où l'on peut constater que le pic de densité se situe à $CFL_a \approx 0,7$ et $CFL_c \approx 0,25$.

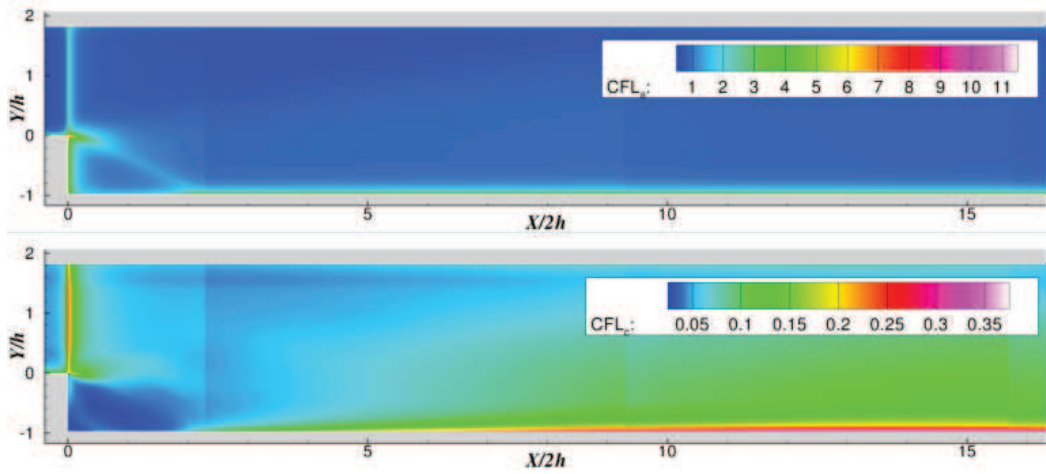


FIGURE 7.1 – Champs moyens de CFL pour le calcul DDES en réactif (haut) CFL_a et (bas) CFL_c

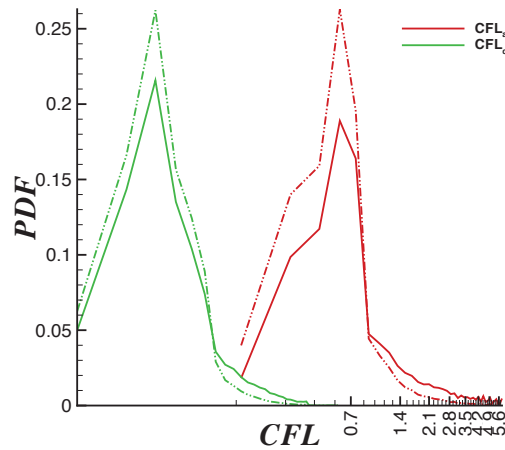


FIGURE 7.2 – PDF des nombres de CFL sur le nombre de cellules (traits pleins), sur le volume (pointsillés)

7.1.3 Validation de l'approche Dynamic Thickened Flame

L'approche TFLES servant de base à la DTF est décrite dans le paragraphe 2.4.2. Rappelons que dans sa version dynamique (DTF), l'épaississement introduit par la TFLES est limité au front de flamme grâce à un senseur α_{DTF} (équation 2.50). La thermique pariétale loin de la flamme n'est ainsi plus perturbée par une modification du terme de conduction thermique dans l'intégralité du domaine de calcul. La figure 7.3 permet d'illustrer le fonctionnement du senseur de flamme sur l'un des calculs instationnaires. Sur cette figure sont représentés dans la partie haute un champ de facteur d'épaississement F ainsi que des lignes d'iso-taux de dégagement de chaleur. Le fonctionnement du senseur de flamme ainsi que la dépendance de F à l'échelle locale de maillage sont ainsi clairement mis en évidence, le front de flamme étant continûment épaissi à mesure que le maillage se relâche en aval de la marche. De plus, hors du front de flamme matérialisé par les lignes iso-taux de dégagement de chaleur, F reste égal à 1, ce qui

illustre le bon fonctionnement du sensor. Dans la partie basse de cette figure est représentée la grandeur $E/F^{2/3}$. Le choix de représenter cette grandeur s'explique par le fait que la valeur maximale de E est $F^{2/3}$, valeur qui n'est d'ailleurs atteinte que pour $E = F = 1$. On peut ainsi constater que E prend des valeurs élevées lorsque le plissement de la flamme est important.

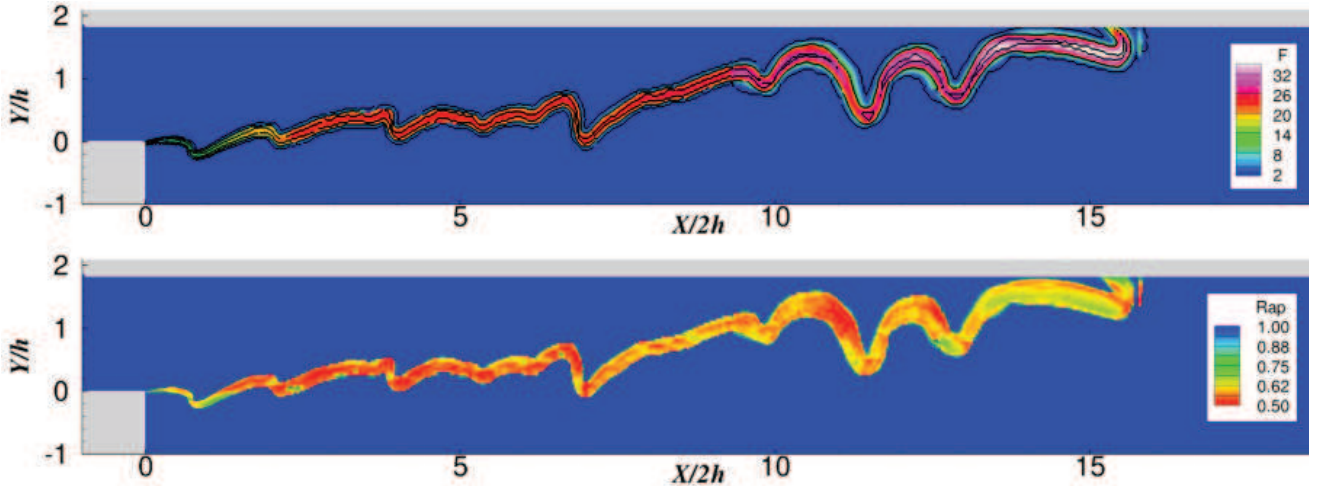


FIGURE 7.3 – (haut) Champ de F et isolignes de taux de dégagement de chaleur, (bas) champ de $E/F^{2/3}$

7.1.4 Validation de la DDES

De la même manière qu'en inerte (paragraphe 6.1.3), il convient de vérifier le bon fonctionnement de la DDES. La figure 7.4 met en évidence les régions pour lesquelles les approches RANS ou LES de la DDES sont appliquées, de plus la position de la flamme est matérialisée par des lignes d'iso-valeur de sensor de flamme. Après analyse de cette figure, il apparaît que les couches limites amont et aval sont bien traitées en RANS. En revanche, au niveau de la partie basse de la chambre, la zone RANS semble légèrement trop épaisse et, par ailleurs, une zone RANS persiste au centre de la chambre comme pour le cas inerte. Il ressort également de cette figure que la flamme prise en compte par le modèle DTF traverse cette zone, alors que ce modèle est à l'origine conçu pour la LES. On vérifiera, lors de l'analyse des calculs, que dans cette région, située entre $X/h = 12$ et $X/h = 32$, cette spécificité n'a qu'un impact limité sur l'écoulement global.

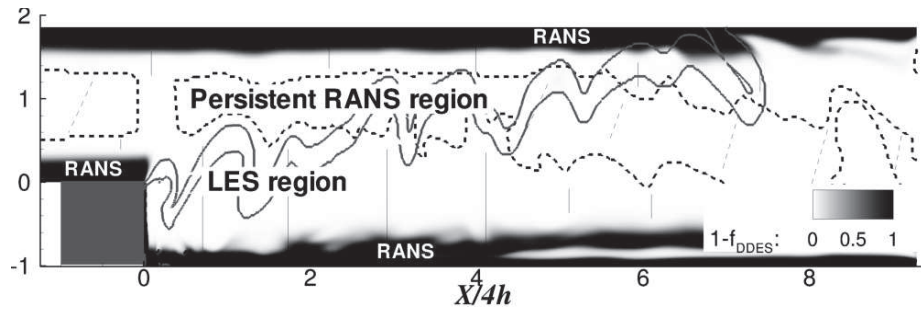


FIGURE 7.4 – Visualisation instantané des modes utilisés par le modèle DDES : $l_{DDES} = l_{RANS} \rightarrow$ mode RANS, $l_{DDES} = C_{DES}\Delta \rightarrow$ mode LES pour l'écoulement réactif, l'iso-ligne du sensor de flamme $\alpha_{DTF} = 0,8$ est également reproduite

7.2 Analyse de l'écoulement moyen

7.2.1 Evolution de la température moyenne et fluctuante dans la chambre

Comparaison avec les mesures

La localisation de la flamme moyennée et la zone balayée par la flamme au cours du calcul instationnaire constituent des éléments importants permettant de mesurer la qualité des résultats en réactif. La position moyenne du front de flamme peut-être déterminée de façon approximative par le biais d'une surface iso-température pour une température comprise entre celle des gaz frais et celle des gaz brûlés. Sur la figure 7.5, une ligne d'iso-température à $\tilde{T} = 1500$ K est tracée dans le plan médian pour l'ensemble des calculs réalisés afin de comparer les résultats moyennés aux mesures par DRASC. Le volume balayé par la flamme au cours des calculs instationnaires est délimité de façon approximative par les deux iso-lignes vérifiant $T'_{RMS} = 50$ K. Ces lignes ont donc été représentées en même temps que les points de mesures correspondants sur la partie inférieure de la figure. Il apparaît que les résultats en DDES et LES sont en bon accord avec les mesures tant au niveau de la position moyenne que de l'enveloppe des fluctuations, contrairement au calcul DDES-qw dont la tendance est de surestimer la taille de cette enveloppe ainsi que l'angle de la flamme moyenne avec l'horizontale. En 2D - RANS cet angle est par ailleurs sous-estimé, particulièrement vers l'aval.

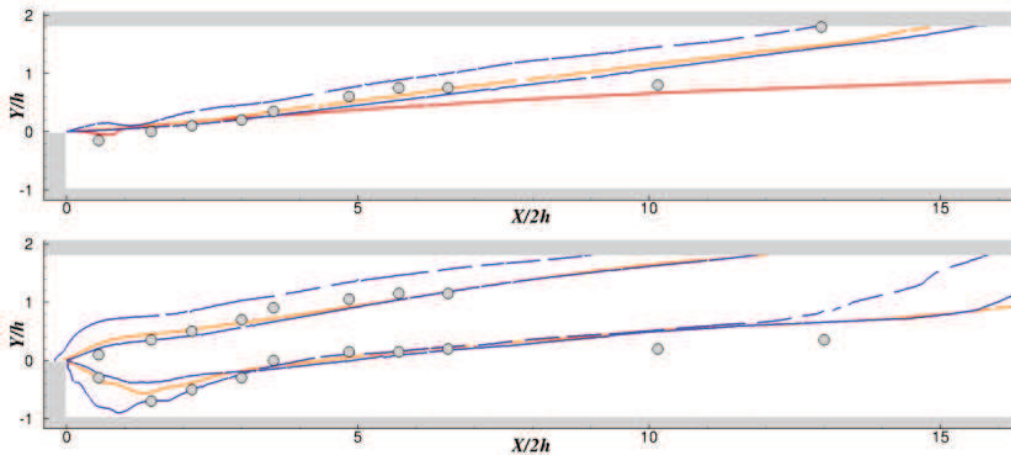


FIGURE 7.5 – (haut) Position moyenne de la flamme (iso-ligne de $T = 1500$ K) (haut) et fluctuante (iso-ligne de $T'_{RMS} = 50$ K) dans le plan médian ; (—) : DDES, (---) : DDES-qw ; — : 2D-RANS ; — : LES)

Après avoir observé le comportement général de la flamme et l'avoir comparé à l'expérience, il peut être judicieux de confronter les profils de température moyenne et de fluctuation de température obtenus dans la chambre par les calculs à ceux obtenus par les mesures DRASC. Ces profils sont présentés figures 7.6 et 7.7.

On peut constater sur ces figures que, conformément aux remarques formulées sur les positions moyennes et fluctuantes de la flamme, les calculs DDES et LES sont en bon accord avec les mesures de manière générale, les calculs DDES-qw et 2D - RANS ayant respectivement tendance à surévaluer et sous évaluer l'angle de flamme avec l'horizontale. Jusqu'à $X/h = 3, 4$ on peut néanmoins constater que, pour l'ensemble des calculs, la température dans la partie basse de la chambre est supérieure à celle donnée par les mesures DRASC. Cet écart est lié à l'hypothèse de parois adiabatiques adoptée dans le calcul, aucune information n'étant disponible quant au refroidissement des parois. Il est intéressant d'observer que pour le calcul DDES-qw, l'épaisseur du pic de T'_{RMS} est très surestimée près de la marche, ce qui traduit une amplitude importante du battement de la flamme sous l'influence du mode quart d'onde analysé au paragraphe 7.3.2.

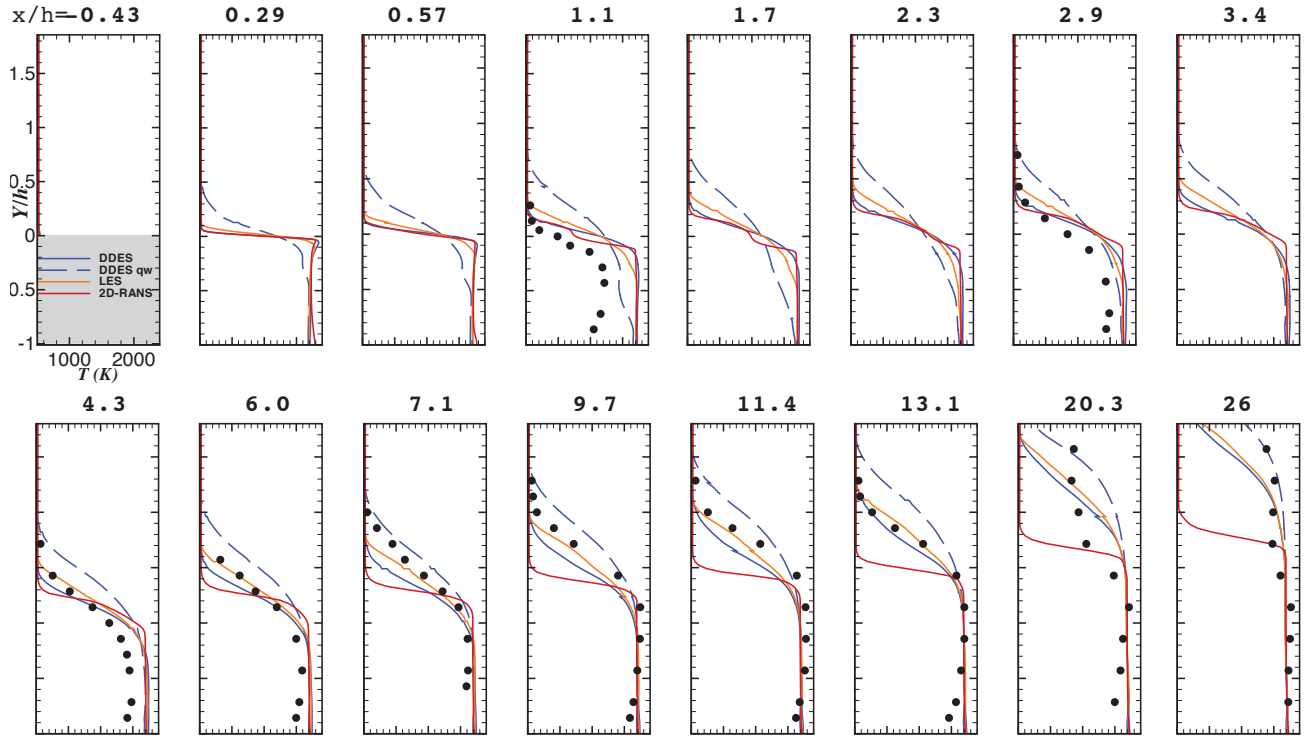


FIGURE 7.6 – Profils de température moyennés

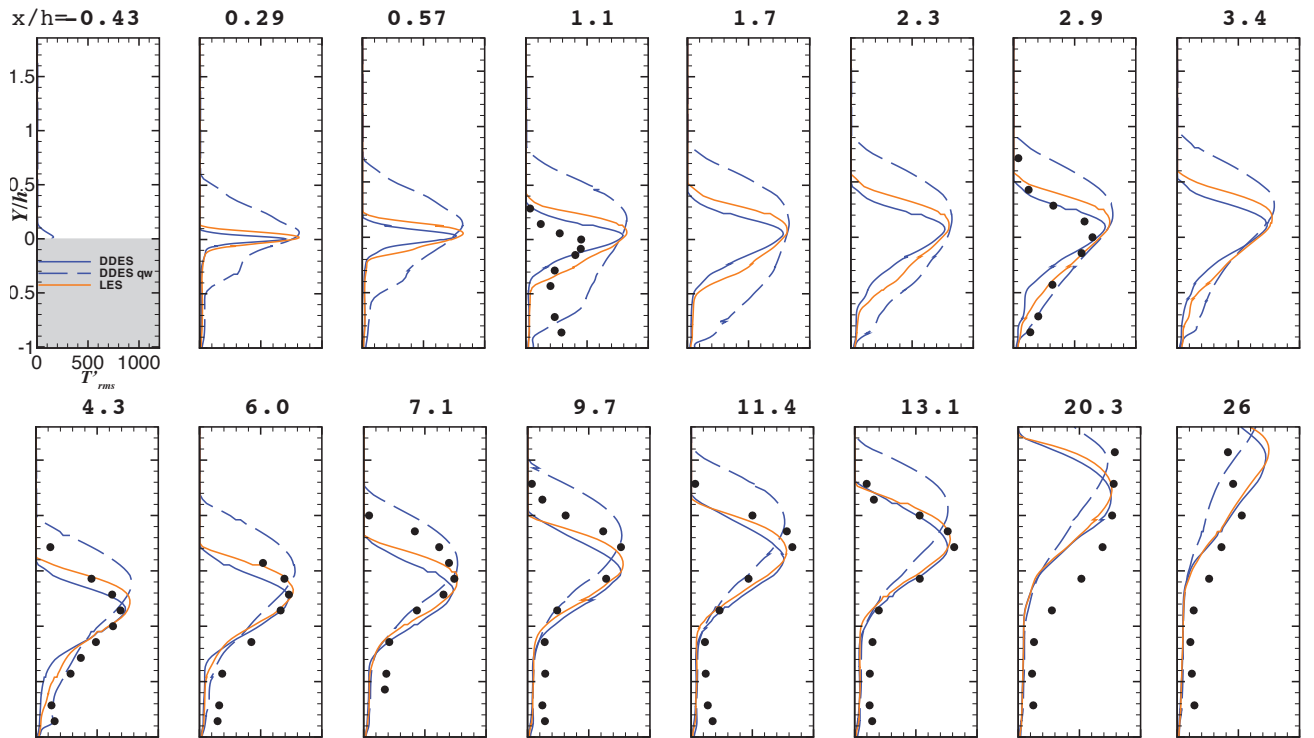


FIGURE 7.7 – Profils de fluctuations RMS de température

Température à la paroi

L'influence de la méthode de calcul peut également être observée au niveau de la température de la paroi basse, en aval de la marche (figure 7.8). Rappelons que, dans ces calculs, des parois adiabatiques sont

utilisées et par conséquent aucun phénomène de refroidissement ne permet de faire baisser la température près de la paroi, dont les valeurs sont supérieures à la température de fusion de l'acier (1470 K). On peut néanmoins formuler les commentaires suivants :

- pour les simulations DDES, DDES-qw et LES, les profils ont une allure similaire : Lorsque l'on part du coin inférieur de la marche, la température est d'abord décroissante puis croissante vers une valeur maximale jusqu'au point de recollement et redécroît par la suite pour se stabiliser vers une valeur constante ;
- en 2D-RANS, la température pariétale décroît plus brutalement puis croît vers une valeur plateau plus élevée que pour les autres calculs.

Les valeurs plateaux obtenues sont de 2200 K pour le calcul DDES-qw, 2215 K pour le calcul LES, 2225 K pour le calcul DDES et enfin 2240 K pour le calcul 2D-RANS. Les températures moyennes obtenues sont en fait proche de la température de fin de combustion. En ce qui concerne les fluctuations, l'allure des différentes courbes est similaire. En revanche les niveaux sont plus importants en LES qu'en DDES, ce comportement rappelle celui des Cp_{RMS} (fluctuations de pression) en inerte (figure 6.11). L'influence de l'excitation acoustique liée aux modes quart d'onde (calcul DDES-qw) se manifeste par des niveaux de fluctuations 3 fois plus importants.

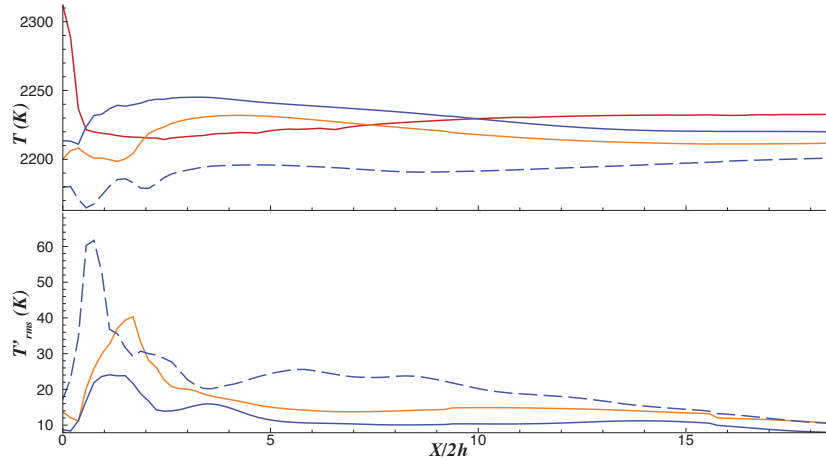


FIGURE 7.8 – Evolution de température moyennes et fluctuante au niveau de la paroi basse, légende : idem 7.6

7.2.2 Etude des champs de vitesses moyennes

Analyse de la recirculation moyenne

Les lignes de courant moyennes sont tracés dans le plan médian pour les différents calculs figure 7.9. La durée pendant laquelle les moyennes sont réalisées pour les calculs instationnaires correspond à un temps physique simulé de 0,15 s (ce qui correspond à environ dix traversées de canal en se basant sur la vitesse des gaz brûlés). Qualitativement, les calculs LES et DDES avec des conditions de non réflexion en sortie conduisent à des recirculations similaires. Comme pour l'écoulement inerte, on constate que la recirculation obtenue en 2D-RANS présente une forme plus allongée. Enfin, le calcul DDES sans condition de non réflexion en sortie se distingue par une forme plus bombée et raccourcie de la recirculation.

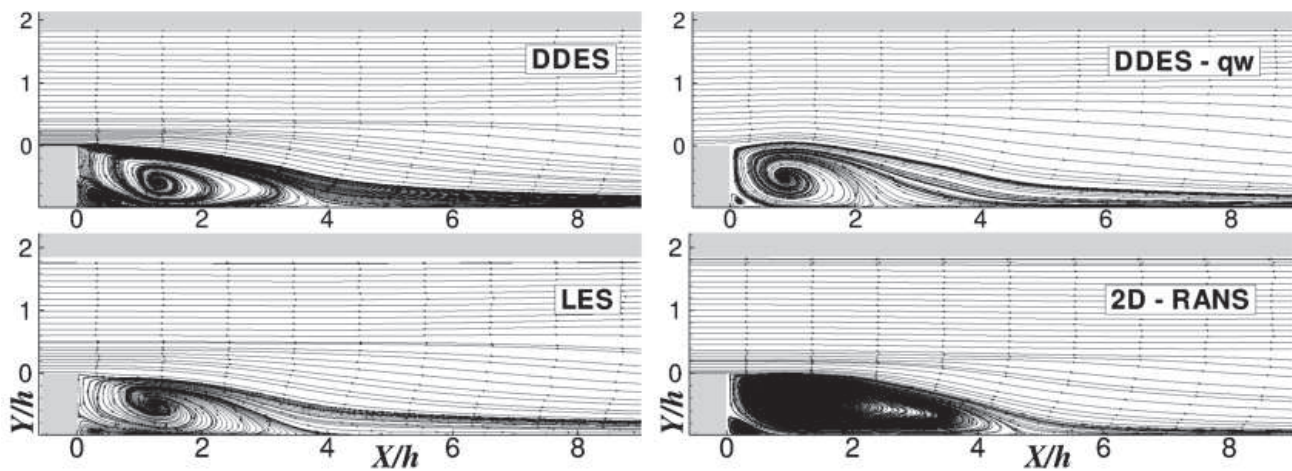


FIGURE 7.9 – Lignes de courant moyennées pour l'ensemble des calculs réactifs

Un estimateur global de la qualité des résultats est la longueur de recirculation. Le tableau 7.2 permet de comparer des valeurs moyennes obtenues par le calcul et par les mesures LDV. Expérimentalement la longueur de recirculation L_r normée par la hauteur de marche vérifie $2,9 < L_r/h < 3,4$. On peut constater que cette valeur est légèrement surestimée par les calculs LES et DDES et davantage par le calcul 2D - RANS. L'utilisation de conditions partiellement réfléchissantes en sortie de domaine (calcul DDES-qw) a pour effet de diminuer la longueur de recirculation. Enfin, si l'on s'intéresse au ratio $L_r(\text{inerte})/L_r(\text{réactif})$, on constate que les calculs reproduisent bien la valeurs expérimentale. On peut également comparer cette valeur à celles obtenues sur d'autres expériences avec marche comme celle de Berkeley. Sur cette expérience, la valeur obtenue est de l'ordre de 1,6 [146, 65, 66], valeur avec laquelle les résultats numériques présentés sont cohérents.

TABLE 7.2 – Longueurs de recirculation moyennes normées par la hauteur de la marche pour le cas réactif

	LDV	DDES	LES	2D - RANS	DDES-qw
L_r/h	$2,9 < - < 3,4$	3,8	3,6	4,7	2,8
$L_r(\text{inerte})/L_r(\text{réactif})$	$1,26 < - < 2,06$	1,34	1,11	1,66	1,82

Comparaison des vitesses moyennes avec les mesures LDV pour les calculs DDES, LES et 2D-RANS

Les profils de vitesses longitudinale et verticale moyennées au sens de Reynolds sont à présent comparés aux mesures LDV pour les calculs DDES, LES et 2D-RANS (figures 7.10 et 7.11). On compare également les profils de fluctuations RMS (figures 7.12 et 7.13).

Pour les vitesses longitudinales moyennes, les résultats obtenus en DDES et LES sont en bon accord avec les mesures. Le calcul 2D-RANS est en revanche plus éloigné de celles-ci avec notamment une sous-évaluation de la vitesse en aval. Ces résultats sont cohérents avec ceux obtenus concernant la position moyenne de la flamme. En effet, pour les calculs LES et DDES, un angle plus élevé de la flamme entraîne une dilatation des gaz plus précoce dans la direction longitudinale et par conséquent des vitesses plus élevées dans la chambre.

Concernant les vitesses verticales moyennes, on peut constater que l'écoulement est davantage dévié vers le bas pour les calculs DDES et LES. Des écarts plus importants sont en revanche à noter entre les valeurs expérimentales et les calculs. L'existence de parois latérales dans l'expérience et un angle de flamme sous-estimé plus en aval dans la chambre peut expliquer cette différence.

D'une façon générale, comme pour les résultats en inerte, les niveaux de fluctuation de vitesse obtenus en LES sont plus élevés qu'en DDES. Plus particulièrement, en ce qui concerne les niveaux des fluctuations RMS de vitesse longitudinale, les résultats sont en bon accord avec l'expérience. Il faut souligner que les résultats obtenus en réactif sont de meilleure qualité qu'en inerte. Cela peut s'expliquer par le fait qu'aucune condition de non réflexion au niveau de la sortie n'étaient utilisées en inerte.

Influence du mode quart d'onde sur les vitesses moyennes

Sur les figures 7.14, 7.15, 7.16, 7.17, les profils de $\tilde{u}$, $\tilde{v}$, u'_{RMS} et v'_{RMS} pour le calcul DDES-qw sont comparés aux profils mesurés et à ceux du calcul DDES. L'influence du mode quart d'onde y est mise en évidence, les résultats obtenus étant très éloignés de ceux du calcul DDES. Cela se traduit au niveau des profils de $\tilde{u}$ près de la marche par un écoulement de retour très important de l'ordre de 25% de la vitesse débitante entre $X/h = 0.57$ et $X/h = 1.1$ contre 10% pour la DDES et les mesures LDV. Le calcul DDES-qw donne des niveaux de fluctuation très supérieurs à ceux obtenus par les mesures et le calcul DDES.

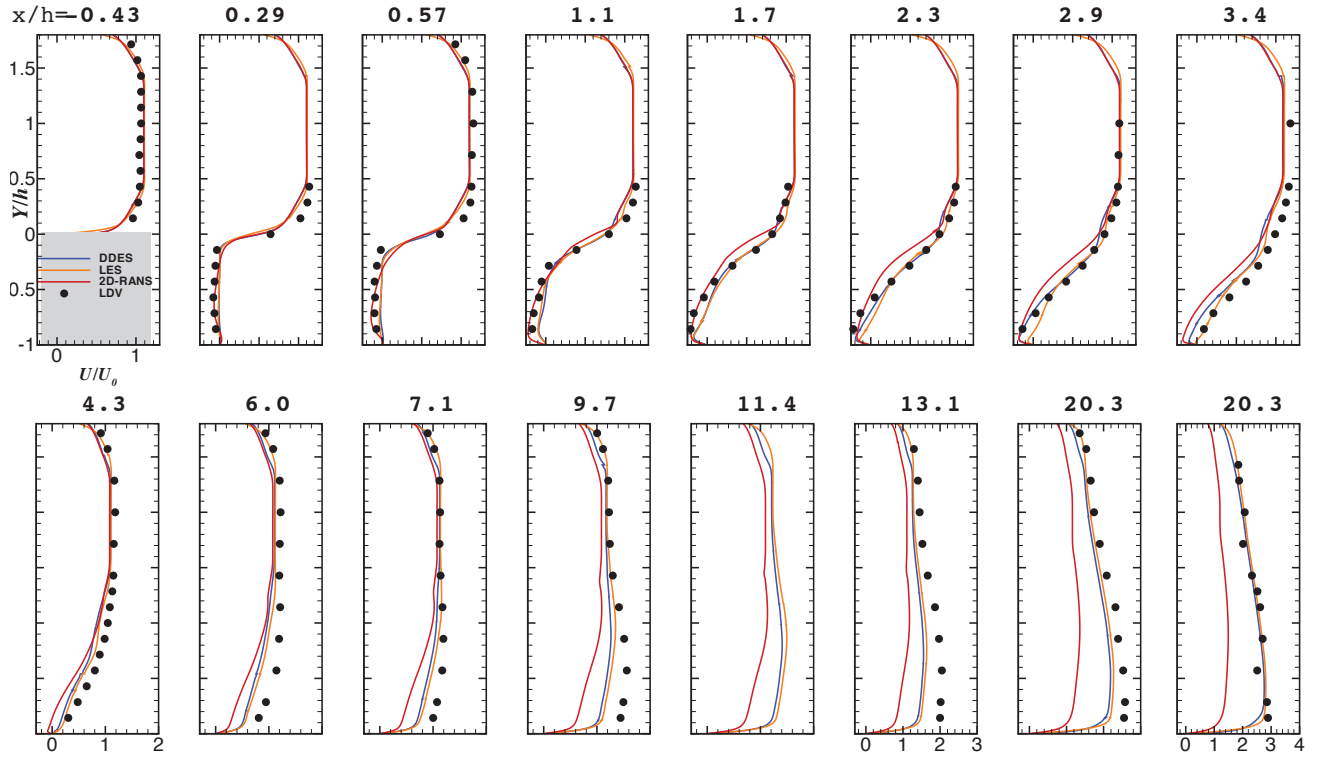


FIGURE 7.10 – Profils de vitesse longitudinale moyenne normée par U_0 pour le cas réactif (légende sur la figure)

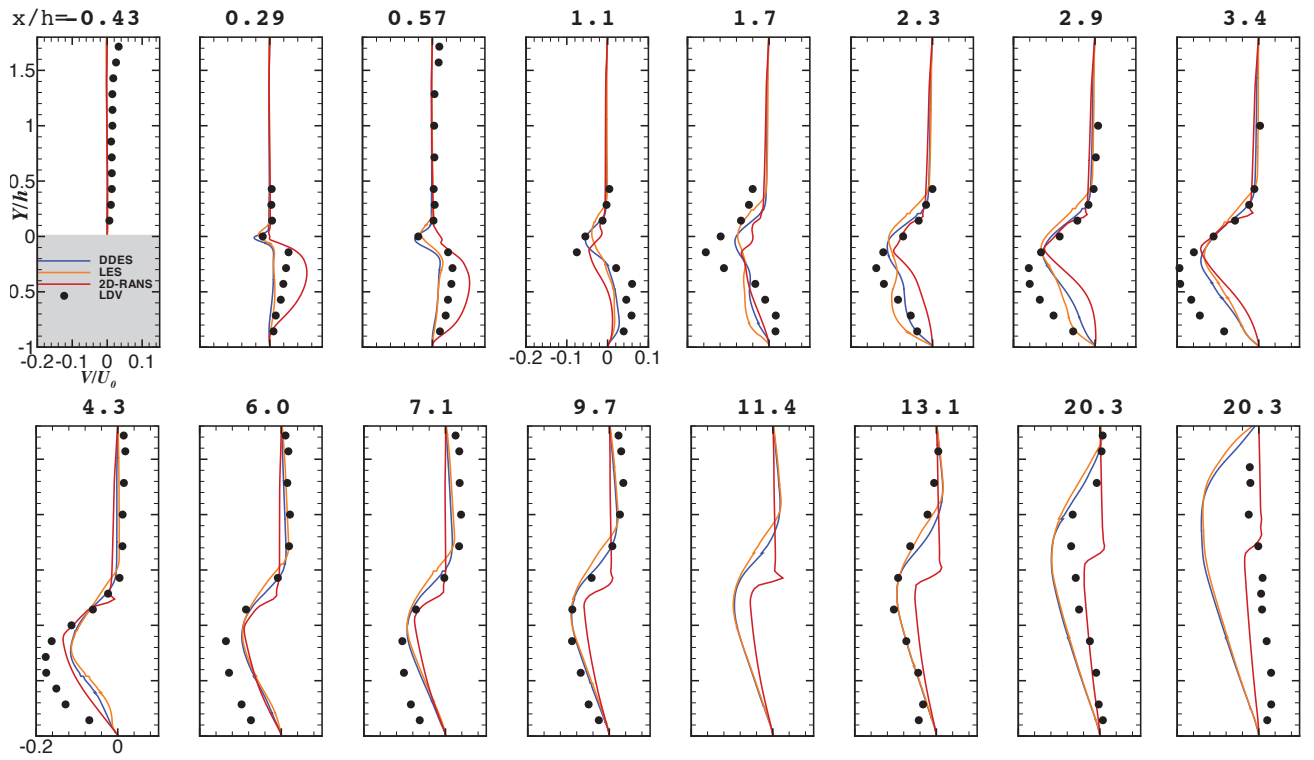
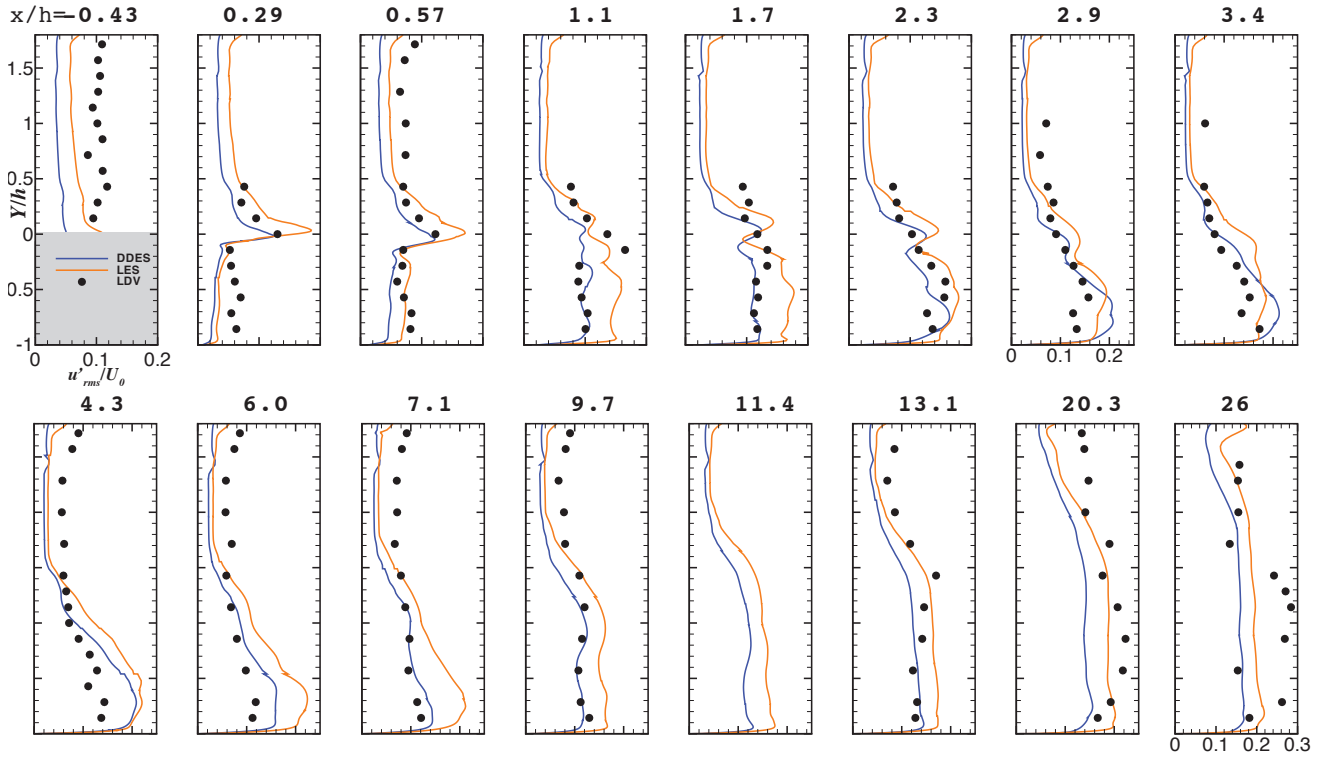
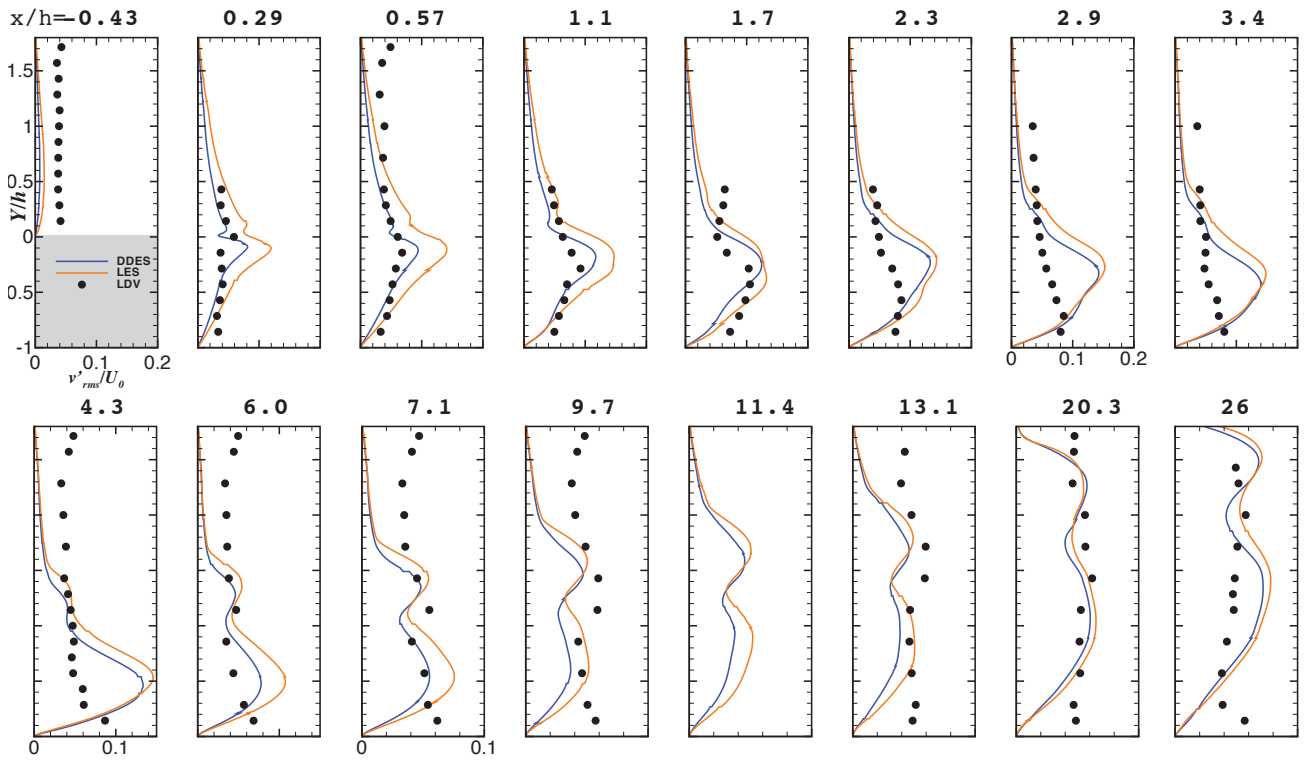


FIGURE 7.11 – Profils de vitesse verticale moyenne normée par U_0

FIGURE 7.12 – Profils de fluctuations RMS de vitesse longitudinale normée par U_0 FIGURE 7.13 – Profils de fluctuations RMS de vitesse verticale normée par U_0

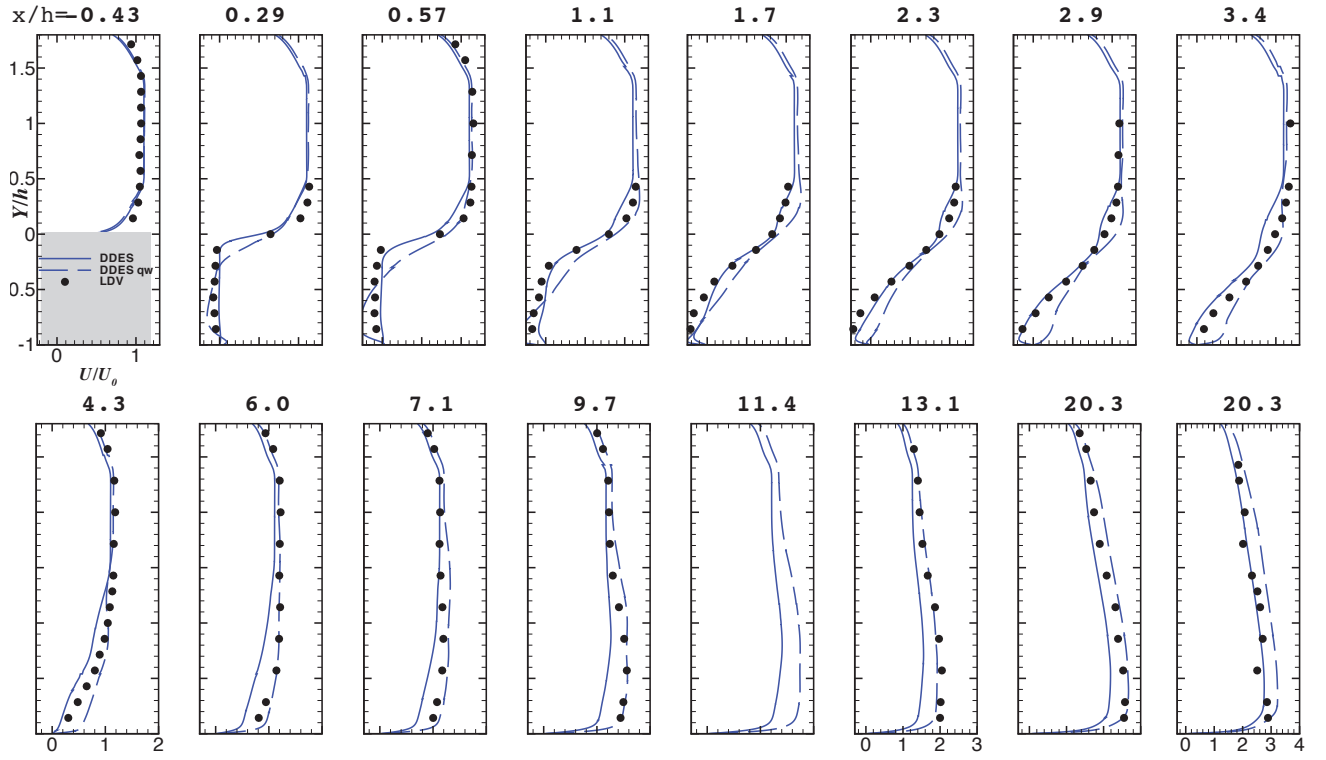


FIGURE 7.14 – Profils de vitesse longitudinale moyenne normée par U_0 DDES , DDES-qw (légende sur la figure)

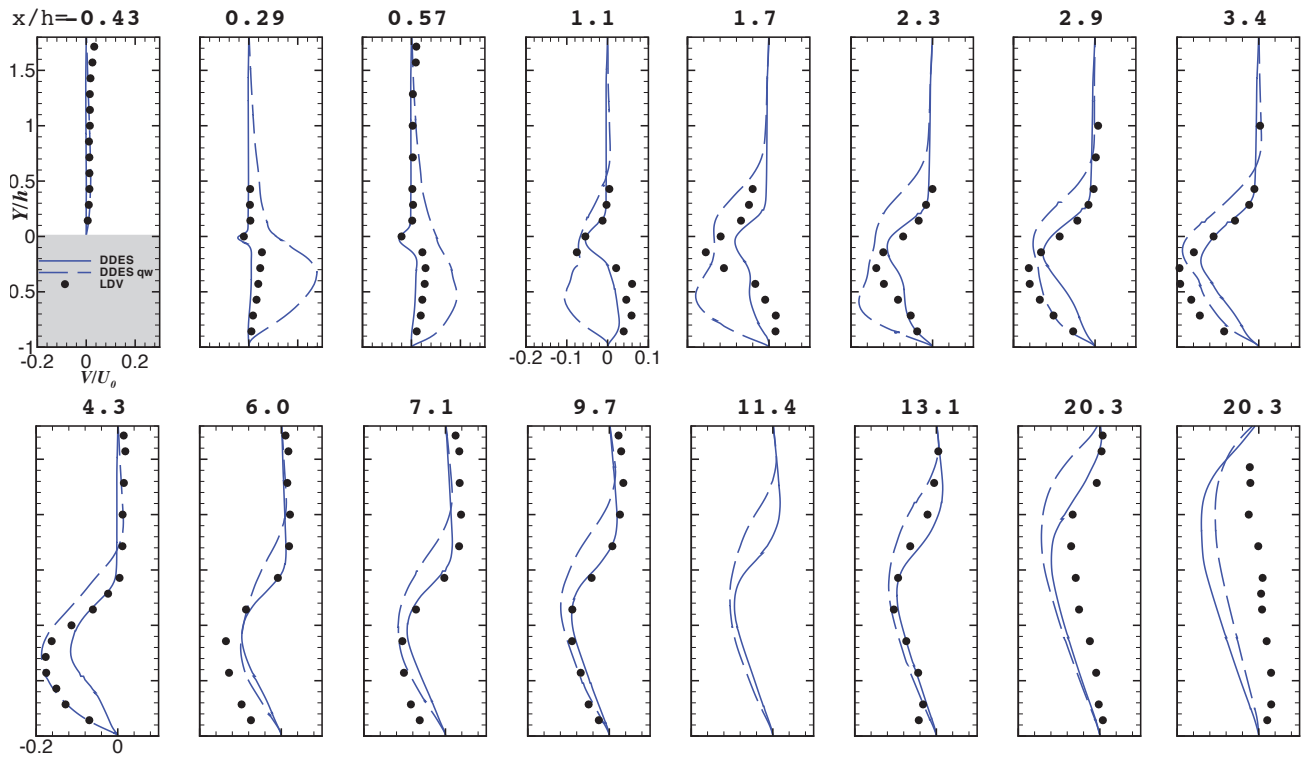
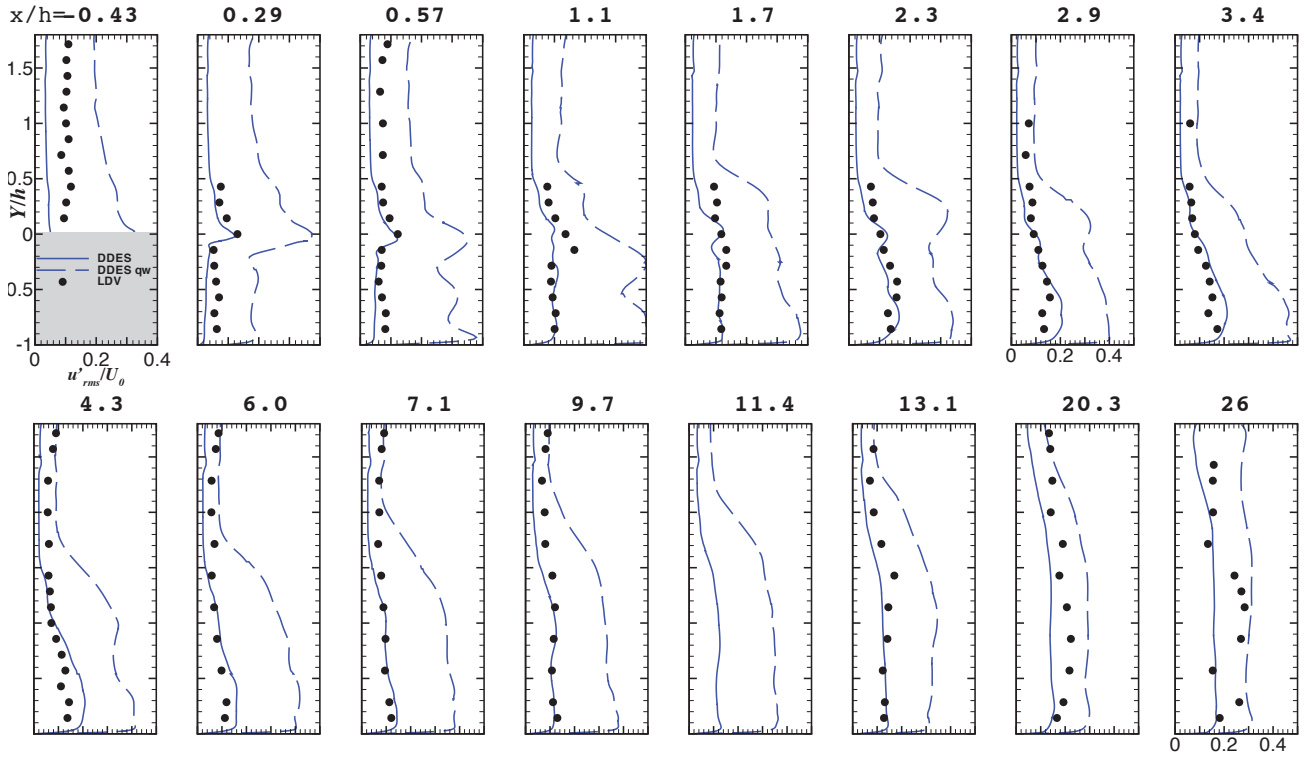
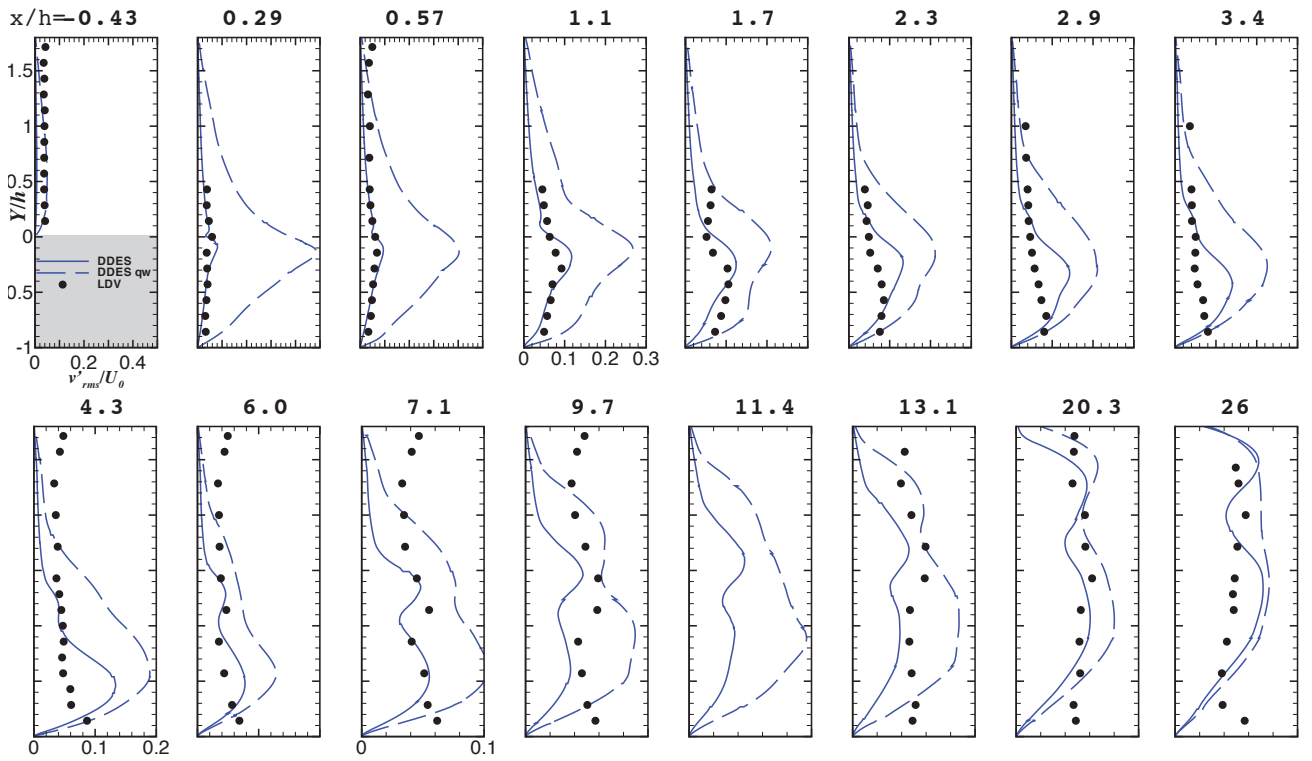


FIGURE 7.15 – Profils de vitesse verticale moyenne normée par U_0 DDES , DDES-qw

FIGURE 7.16 – Profils de fluctuations RMS de vitesse longitudinale normée par U_0 DDES , DDES-qwFIGURE 7.17 – Profils de fluctuations RMS de vitesse verticale normée par U_0 DDES , DDES-qw

Épaisseur de quantité de mouvement et de vorticit 

Comme pour les calculs en inerte (*c.f.* paragraphe 6.2.3) il est int ressant d'analyser l' volution de θ et δ_ω pour l' coulement r actif. L' paisseur de vorticit  de la couche de m lange – d velopp e en aval de la marche – est trac e figure 7.18 pour les calculs LES, DDES, 2D-RANS. On a  galement repr sent  l' volution des r sultats issus de la LDV.

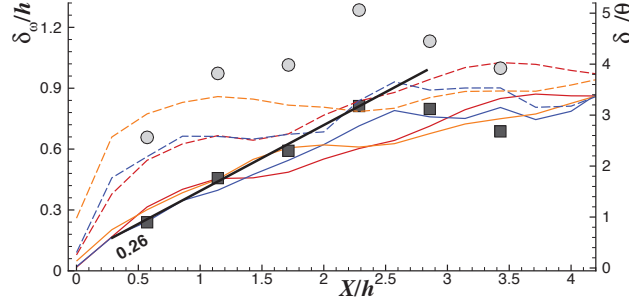


FIGURE 7.18 – * paisseur de vorticit  norm e par la hauteur de marche /  paisseur de quantit  de mouvement (—/— : DDES; —/— : 2D - RANS; —/— : LES; ■/● : LDV).*

Sur cette figure, il appara t que l' paisseur de vorticit  norm e ne suit plus l' volution exponentielle mise en  vidence en inerte pr s de la marche. Ceci est d    une acc l ration des gaz pr sents dans l' coulement de retour, combin    une diminution du gradient de vitesse. Plus en aval, le d veloppement de la couche de m lange suit une loi lin aire de pente 0,26 pour les mesures, bien reproduite par les calculs. On constate que cette valeur est sup rieure   celle obtenue en inerte (0,19) cette diff rence est  galement provoqu e par l'acc l ration des gaz chauds. Conform ment au cas inerte, de plus grands  carts apparaissent au niveau du profil d' paisseur de vorticit  norm e par l' paisseur de quantit  de mouvement. Cela est d    une surestimation de l' paisseur de quantit  de mouvement provoqu e par la non prise en compte des parois lat rales.

7.2.3 Positionnement des calculs sur des diagrammes de combustion turbulente

Dans ce paragraphe les m thodes d crites   la section 2.3.2 pour  valuer les fluctuations de vitesse u' ainsi que l' chelle int grale l_t sont appliqu es aux calculs RANS et DDES. En DDES, la valeur prise par l' paisseur de flamme laminaire une fois  paissie est  gale   $F\delta_l^0$ avec $\delta_l^0 = 3,9 \cdot 10^{-4}$ m (se reporter aux calculs de flammes laminares en annexe D). Ainsi, ces valeurs sont calcul es en chaque point de la flamme (identifi s par un taux de d gagement de chaleur sup rieur   $1 \cdot 10^{-7}$ W · m⁻²) puis reproduites sous forme de scatter-plot figure 7.19. Les droites caract ristiques issus du diagramme de Poinot et Veynante [150] (figure 2.9) sont  galement trac es dans ces figures. Apr s analyse de cette figure on peut constater que, pour les deux calculs, le r gime est majoritairement celui des flammelettes avec poche. Dans cette r gion, on se trouve par cons quent dans le cadre des hypoth ses de validit  du mod le DTF. Alors que les niveaux de u' sont  quivalents pour les deux calculs, on peut constater que la valeur de l_t est beaucoup plus importante en DDES. En fait, il est probable qu'une telle diff rence soit li e   la fa on de d terminer l_t , en effet celle-ci est obtenue en se basant sur l'hypoth se l_t se situe dans la zone inertielle du spectre au m me titre que Δ et par cons quent v rifie la relation :

$$\frac{u'_{\Delta}}{\Delta} \approx \frac{u'^3}{l_t}, \quad (7.2)$$

ce qui constitue une approximation assez lourde. Afin d' valuer la capacit  du maillage   r soudre l'interaction flamme-turbulence, la repr sentation de Dusing *et al.* [58] est employ e (se r f rer   la figure 2.6) pour le calcul DDES sur la figure 7.20. Le ratio entre l' chelle de maillage et l' paisseur du front de flamme laminaire  tant fix e via le facteur d' paississement   1/5 dans le calcul, la repr sentation de gauche apporte peu d'information car Δ/δ_l^0 est constant. Par cons quent, il est plus int ressant de tracer

l'évolution du nombre de Karlovitz (on rappelle que dans ce diagramme $Ka = (\delta_l^0/\eta_K)^2$ en fonction de la position en X (la position des limites entre régions est également reproduite). À partir de cette figure on peut constater que la majorité des points se situent au niveau de la frontière entre DNS et LES et dans la région flamme épaissie. De plus on peut noter le déraffinement progressif du maillage qui tend à dévier l'enveloppe des points vers le haut.

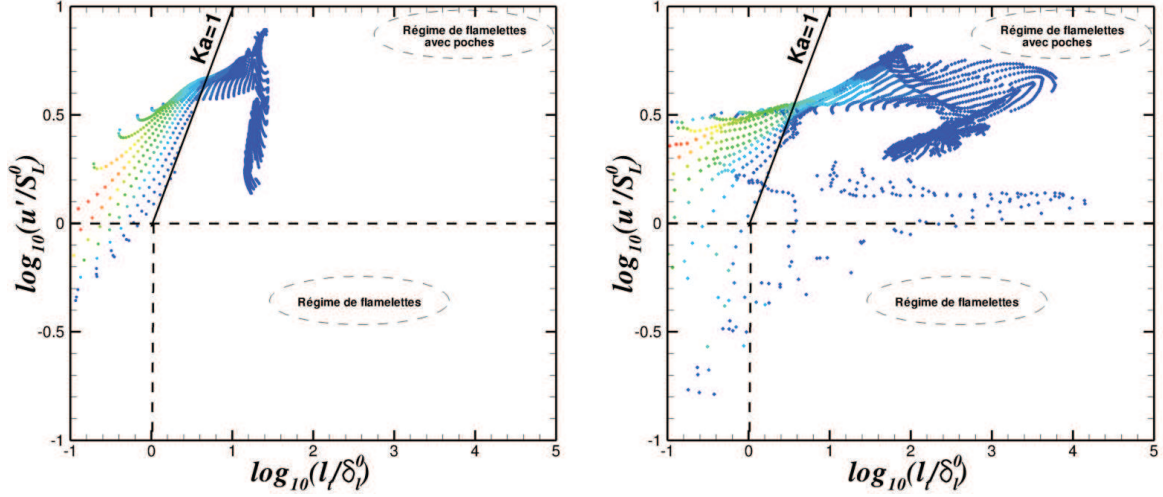


FIGURE 7.19 – Points situés dans le front de flamme (colorés par le dégagement de chaleur $1 \cdot 10^{+7} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} < \dot{\omega}_T < 1 \cdot 10^{+9} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$) pour les calculs RANS (gauche) et DDES (droite)

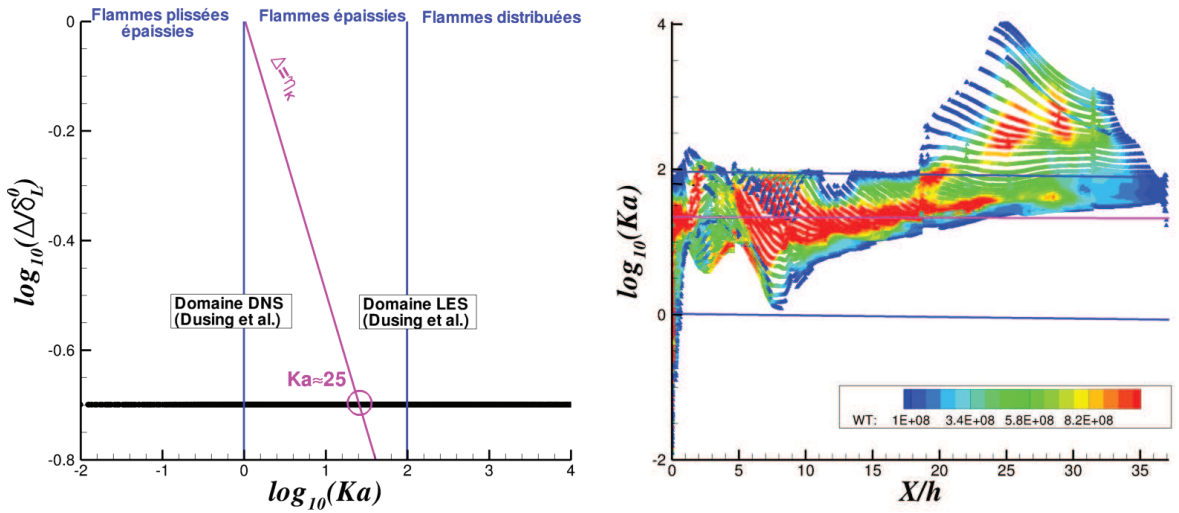


FIGURE 7.20 – Points situés dans le front de flamme (colorés par le dégagement de chaleur $1 \cdot 10^{-7} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} < \dot{\omega}_T < 1 \cdot 10^{+9} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$) selon la représentation de Dusing et al. [58] (gauche) et dans la direction longitudinale (droite)

7.3 Dynamique de l'écoulement réactif en aval de la marche

7.3.1 Comparaison des approches

Après avoir mis en évidence les différences entre les calculs au niveau des champs moyens, il est intéressant de comparer l'effet des approches sur la dynamique de l'écoulement en aval de la marche.

Dynamique de la flamme

Pour les trois calculs instationnaires (DDES, LES et DDES-qw), la figure 7.21 met en évidence la position instantanée de la flamme par le biais d'une surface de iso-température à $T = 1500$ K, les tourbillons sont eux matérialisés par des surfaces iso- $Q(h/U_0)^2$ (valeur égale à 0,2). Ces surfaces sont colorées par la température. On peut constater sur cette figure que, conformément à ce qui a été observé pour la température moyenne (figures 7.6 et 7.8), la température dans la zone recirculante a tendance à être plus élevée en DDES qu'en LES. De plus l'existence du mode quart d'onde a tendance à donner de résultats plus faibles.

Concernant la forme de la flamme, on peut constater que son plissement est beaucoup plus important pour le calcul DDES-qw. La comparaison de cette figure avec son équivalent pour un écoulement inerte (figure 6.13) met en lumière un effet connu de la combustion qui est de rendre l'écoulement davantage bi-dimensionnel. En effet, la forme des tourbillons est beaucoup plus allongée dans la direction transverse pour le calcul réactif.

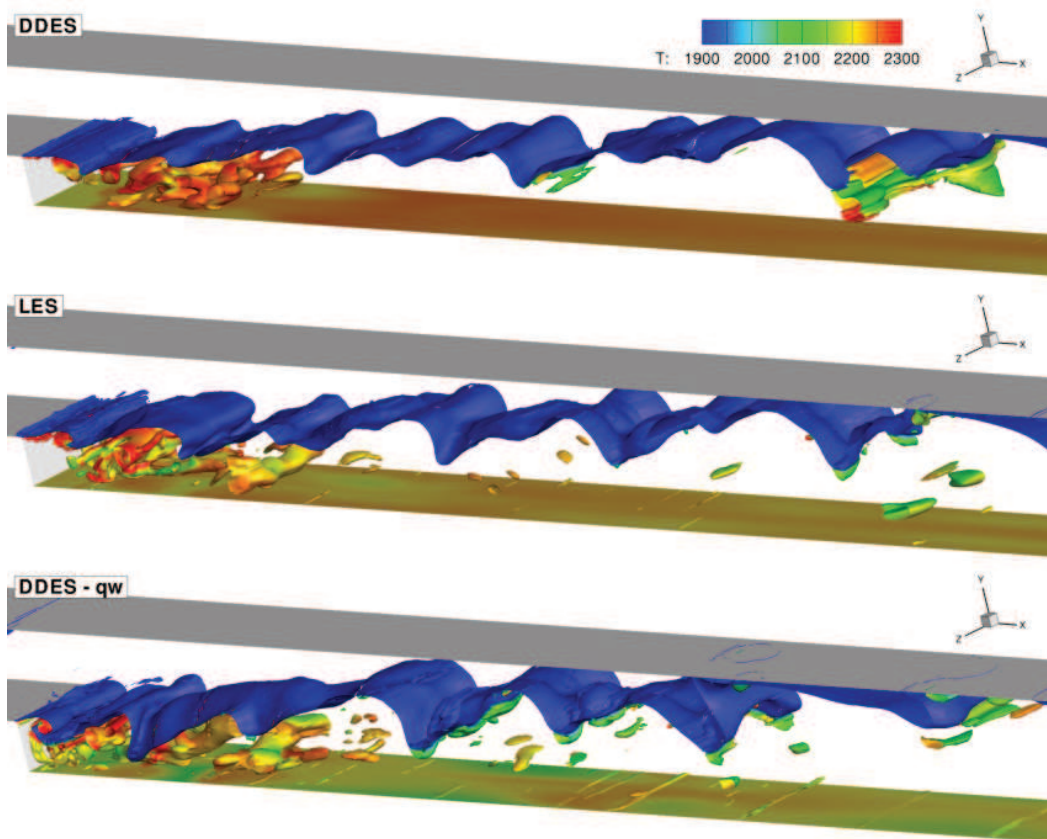


FIGURE 7.21 – Iso-surface de température à 1500 K et de $Q.(h/U_0)^2 = 0,2$, colorés par la température, pour les trois calculs instationnaires

Analyse statistique sur la position de la flamme

Les mesures DRASC permettent d'obtenir la densité de probabilité de la température en un point donné de l'écoulement. Cela permet une comparaison approfondie des calculs LES et DDES avec les mesures [172]. La densité de probabilité en un point de coordonnées (X, Y) dans le plan médian de mesure est définie par ;

$$PDF(X, Y, T) = \text{prob}(T < T'(X, Y) < T + \Delta T) \quad (7.3)$$

Cette densité de probabilité a été calculée pour T compris entre 450 K et 2500 K en discrétisant avec des intervalles de 50 K. La figure 7.22 présente la distribution de PDF dans la direction verticale (Y) à quatre abscisses le long de la chambre. Il est à noter que compte tenu de la définition de la densité de probabilité $\int_{450}^{2500} PDF(X, Y, T).dT = 1$.

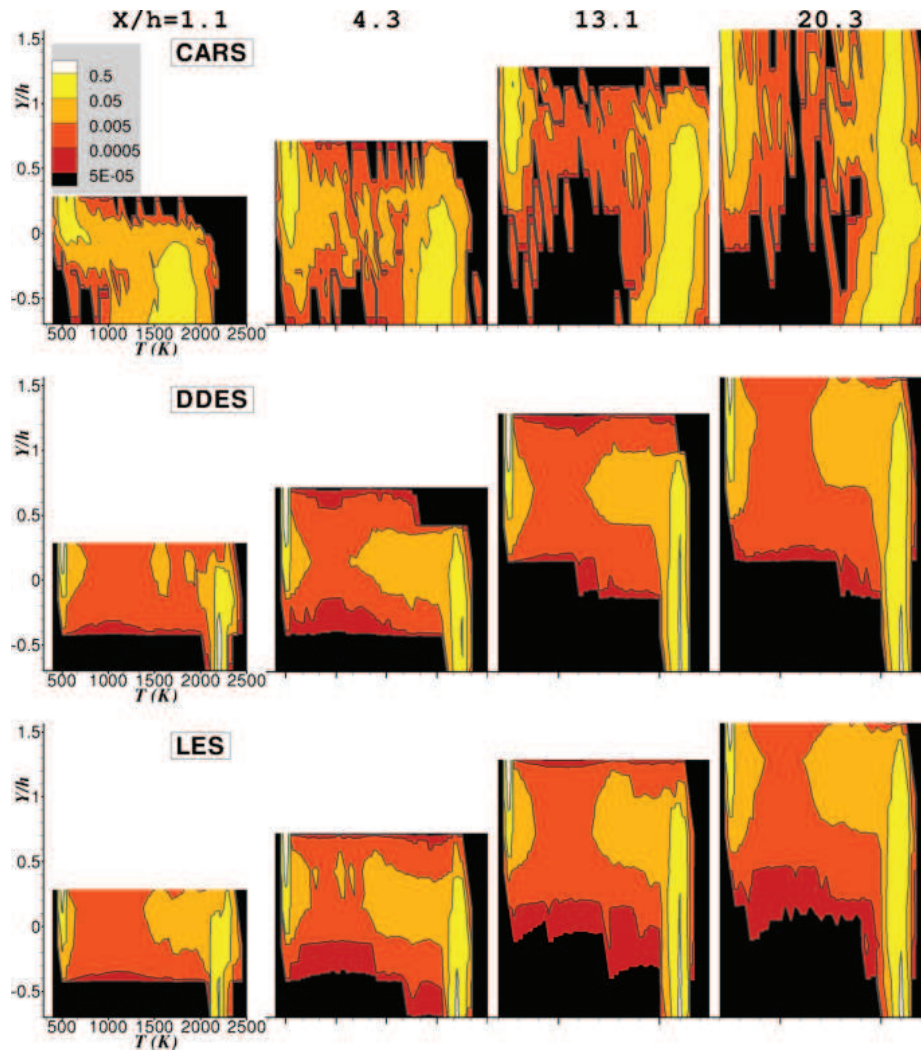


FIGURE 7.22 – Map de PDF à différentes positions dans la longueur de la chambre (en abscisse : $T(K)$ et en ordonnée Y/h) (de haut en bas) mesures DRASC, DDES et LES

Sur cette figure, les zones à forte densité de probabilité sont obtenues pour les températures basses dans la partie haute de la chambre (gaz frais à 520 K et pour les températures élevées dans la partie basse (gaz brûlés à plus de 1500 K. Si l'on compare les approches LES et DDES entre elles on peut constater une très grande similarité, ce qui est conforme aux observations précédentes concernant les températures moyennes et fluctuantes. Elles sont en outre en bon accord avec l'expérience en $X/h = 13,1$ et $X/h = 20,3$. En revanche, plus près de la marche on peut constater une surestimation de la température dans les gaz brûlés par rapport à l'expérience et un refroidissement à la paroi qui n'est pas pris en compte dans les calculs.

7.3.2 Analyse spectrale

Afin d'évaluer l'influence de l'approche de calcul sur le contenu spectral des fluctuations de pression, de vitesse et de température dans la chambre, il est intéressant de comparer les spectres obtenus pour ces différentes quantités en différents points le long de la chambre (dans le plan médian). On définit quatre capteurs numériques dont les coordonnées sont données dans le tableau 7.3 et la position indiquée figure 7.23.

TABLE 7.3 – Position des capteurs

Cap.	X/h	Y/h	Z/h
a	1, 1	0, 14	1
b	4, 3	0, 14	1
c	13, 1	0, 14	1
d	20, 3	0, 14	1

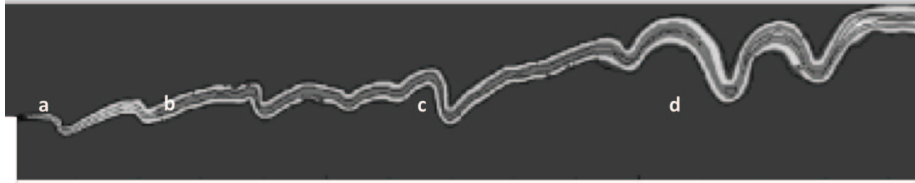


FIGURE 7.23 – Position des 4 capteurs retenus

Comparaison DDES - LES

Les signaux de pression, de vitesse verticale et de température au niveau des capteurs a, b, c et d sont enregistrés durant un temps physique de 0,15 s pour les calculs LES et DDES. Des spectres de pression, température et de vitesse verticale sont tracés figure 7.24. Il faut noter que sur cette figure, les spectres de vitesse verticale et de température sont prémultipliés par la fréquence, *i.e.* $f \cdot G_v(f)$ et $f \cdot G_T(f)$ sont représentés. On peut faire les observations suivantes :

- les approches DDES et LES donnent des résultats semblables pour l'ensemble des spectres tracés, ce qui est cohérent avec les différentes analyses proposées dans ce chapitre ;
- sur les spectres de pression, une contribution importante des basses fréquences est mise en évidence ; aucune différence majeure n'est à noter d'un capteur à l'autre par ailleurs ;
- on constate que les spectres de vitesse verticale et de température ont une forme semblable pour l'ensemble des capteurs particulièrement pour le capteur a, cela traduit l'important couplage entre la flamme et l'évolution des tourbillons ;
- près de la marche, un pic à environ 350 Hz prédomine, les spectres étant de manière générale large bande ; plus on s'éloigne de la marche plus l'énergie est contenue dans les hautes fréquences, ce qui traduit que la taille des tourbillons les plus énergétiques a diminué.

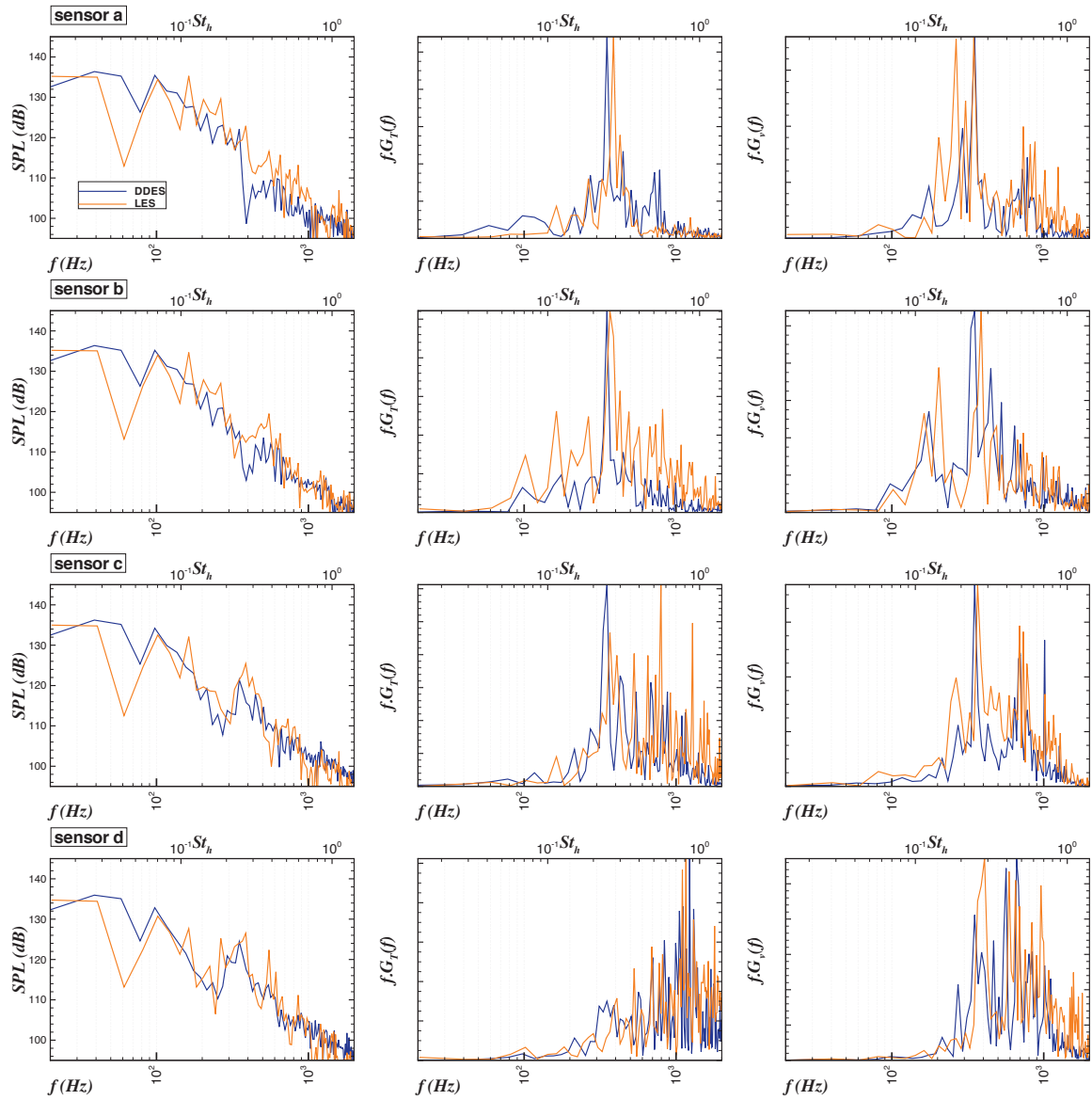


FIGURE 7.24 — (De gauche à droite) Spectres de pression ($SPL(f)$ en $\text{dB} \cdot \text{Hz}^{-1}$), spectres prémultipliés de température ($fG_T(f)$) et de vitesse verticale ($fG_v(f)$) pour les calculs DDES et LES (légende sur la figure), et les capteurs a, b, c et d (de haut en bas).

Influence du mode quart d'onde

Dans ce paragraphe, l'influence de l'utilisation de conditions partiellement réfléchissantes permettant l'apparition d'un mode quart d'onde au sein de la chambre est mise en évidence sur les spectres de pression, de vitesse et de température présentes sur la figure 7.25 :

- L'existence du mode quart d'onde est clairement identifiée sur les spectres de pression. On peut notamment distinguer plusieurs harmoniques à 175 Hz, 350 Hz, 525 Hz *etc.*. On peut comparer ces fréquences à celles données par l'expression analytique $f_n = nc/4L$ où c est la vitesse du son dans les gaz brûlés et L la longueur de la chambre, soit $f_1 = 174$ Hz, $f_2 = 348$ Hz, $f_3 = 522$ Hz *etc.*.
- L'excitation acoustique liée au mode quart d'onde et en particulier à la seconde harmonique se traduit au niveau des spectres de vitesse et de température liés au capteur a par un pic à cette fréquence. Cela signifie que le lâcher tourbillonnaire est excité à cette fréquence et est à l'origine du battement de la flamme.
- On peut constater que, au niveau des autres capteurs, des pics représentant des harmoniques du mode quart d'onde sont toujours visibles. Cependant, il peut arriver que l'énergie se retrouve sur une autre harmonique comme l'illustre le spectre de vitesse pour le capteur b.
- Au niveau du capteur d, comme pour les calculs LES et DDES, on constate l'apparition de hautes fréquences dans le contenu des spectres de vitesse et de température.

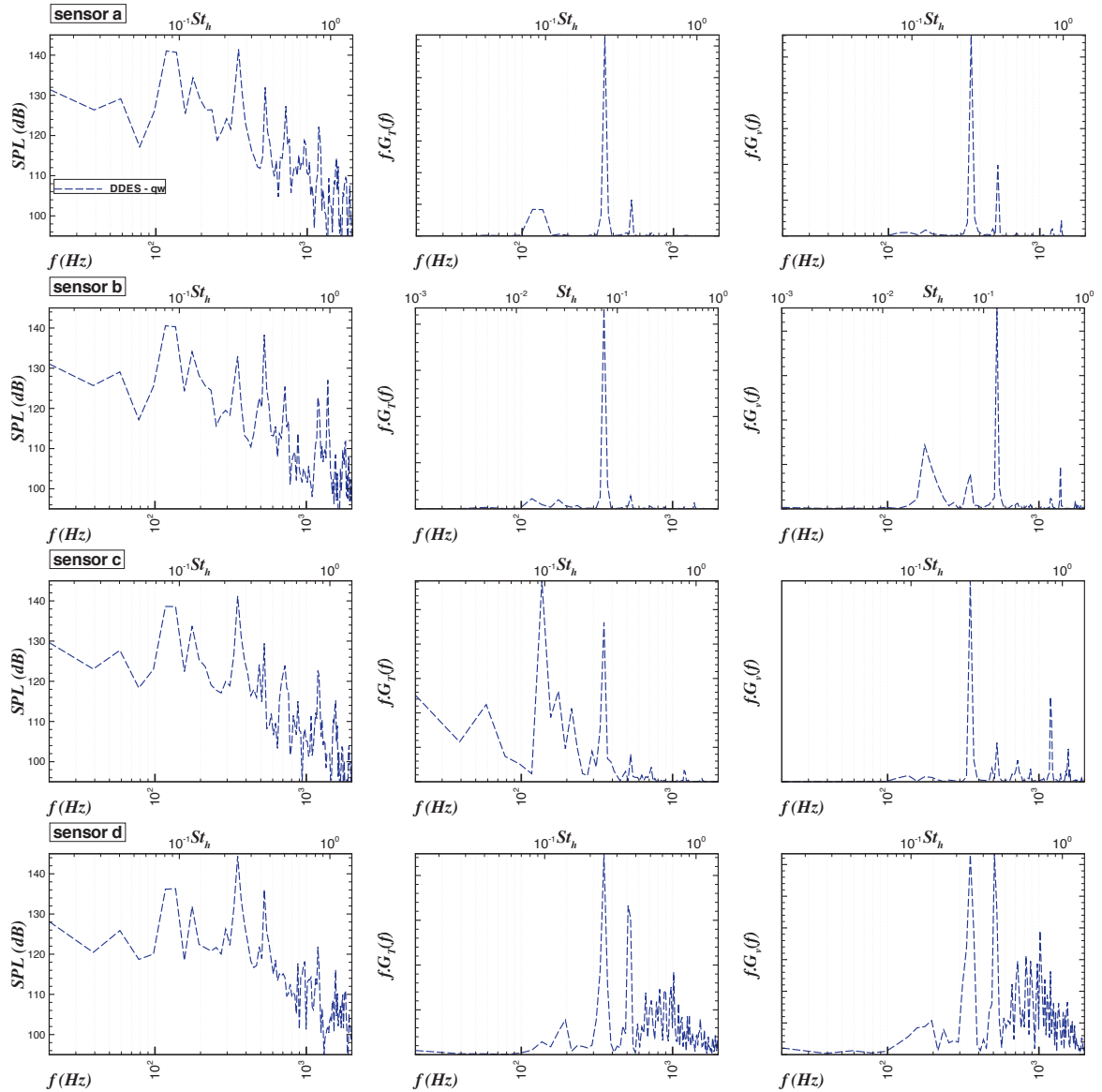


FIGURE 7.25 – Idem figure 7.24 pour le calcul DDES-qw

Bilan de l'étude de l'écoulement réactif

Plusieurs enseignements peuvent être tirés des simulations numériques de la chambre en forme de marche descendante pour un écoulement de méthane-air prémélangé pauvre :

- D'une manière générale on peut constater que les résultats obtenus par les deux méthodes DDES et LES sont d'une qualité comparable et en bon accord avec les mesures de vitesse et de température. Comme en inerte, la DDES a tendance à donner des niveaux de fluctuations plus faibles qu'en LES. En revanche, l'approche RANS utilisée s'avère très peu prédictive sur ce cas.
- L'absence de refroidissement au niveau de la paroi basse a tendance à détériorer la qualité des températures moyennes obtenues par le calcul par rapport aux mesures, notamment près de la marche où l'écoulement de retour est important comparativement aux mesures expérimentales.
- La dynamique de l'écoulement est également très similaire pour les approches LES et DDES. En effet, les analyses statistiques et spectrales des deux calculs montrent des différences mineures.
- Enfin, l'influence de conditions aux limites partiellement non-réfléchissantes en sortie est beaucoup plus marquée qu'en inerte. En effet, cette modulation de pression a un impact direct sur le battement de la flamme et sur la dynamique du décollement. Les fluctuations de vitesse sont ainsi largement augmentées ainsi que l'intensité du courant de retour. Cette observation est en accord avec les résultats obtenus par Courtois dans sa thèse [36].

En conclusion, l'utilisation d'une approche DDES en milieu réactif donne des résultats comparables à ceux obtenus en LES avec le même modèle de combustion turbulente. L'utilisation de cette approche pour un écoulement surdétendu dans le chapitre suivant constitue un exemple d'utilisation naturel de la DDES en écoulement réactif.

Troisième partie

Ecoulement réactif décollé de $H_2 - O_2$ dans
une tuyère surdétendue

Chapitre 8

Article : Numerical simulations and physical analysis of an overexpanded reactive flow

Table des matières

8.1	Introduction	111
8.1.1	Context	111
8.1.2	State-of-the art	112
8.1.3	Outline of the paper	113
8.2	Experimental set-up	113
8.3	Numerical methods	115
8.3.1	Turbulence modelling	116
8.3.2	Chemistry model	117
8.3.3	Numerical schemes	118
8.4	Numerical test case	119
8.4.1	Meshing strategy	119
8.4.2	Conditions of the computations	120
8.5	Results and discussion	121
8.5.1	Description of the flow	121
8.5.2	Analysis of the time-averaged aerodynamic flowfield and wall pressure	122
8.5.3	Analysis of the time averaged thermochemical flowfields	125
8.6	Analysis of the flow oscillations	126
8.6.1	Spectral analysis	126
8.6.2	Dynamics of the separated region	130
8.6.3	Analysis of the propagating disturbances	132
8.7	Analysis of the unsteady reacting region	134
8.7.1	Comparison with flowfield visualizations	134
8.7.2	Discussion on the combustion regime	134
8.7.3	Dynamics of the reacting region	135
8.8	Conclusions	137
8.9	Additional considerations	138
8.9.1	Experimental mock-up	138
8.9.2	Numerical tools	138
	Validation of the DDES approach	138
	Discussion on the time integration	138
	Comparison between chemical and turbulent time scale	140
8.9.3	Additional averaged quantities in the flow field	140
	Flame outside of the bench	140

	Averaged acoustic velocities	141
8.9.4	Wall transfers	142
	Skin friction on the upper and lower walls	142
	Heat fluxes on the upper and lower walls	142
	Heat fluxes and skin friction on the lateral walls	143
8.9.5	Additional signal processing	144
	Phase averaged wall pressure distribution	144
	Phase average evolution of NPR and pressure profiles	145
	Spectra in the separated region	146
	Pressure spectra outside the bench	146

Cette partie constitue la version allongée d'un article soumis pour publication dans un journal à comité de lecture. Dans cette article, la simulation numérique de l'écoulement réactif surdétendu dans une tuyère plane de l'Onera, expérimentée dans le cadre du programme ATAC, est réalisée. Des approches stationnaires RANS et instationnaires DDES sont utilisées et comparées. L'effet de la prise en compte ou non de la combustion (chimie figée) sur la dynamique de l'écoulement est analysé. Les résultats de calcul sont comparés à des mesures de pression pariétales et aux visualisations par PLIF-*OH* et émission spontanée de *OH* haute cadence. Une oscillation auto-entretenue de l'écoulement à environ 1 kHz est mise en évidence dans les calculs instationnaires, en bon accord avec les mesures instationnaires de pression pariétale. Une analyse des caractéristiques spatio-temporelles de l'écoulement permettent une meilleure compréhension de ce phénomène. Une étude préliminaire en 2D a été menée pour mettre en évidence l'influence de la résolution de la couche limite et de la température pariétale sur l'écoulement moyen en RANS d'une part, et pour analyser l'effet d'une particularité géométrique sur la dynamique de l'écoulement en DDES d'autre part. Ce travail est détaillé à l'annexe E

This part consists of the extended version of an article submitted for publication in a peer reviewed journal. In this article, a numerical investigation of the overexpanded reactive gas flow in the Onera planar nozzle, experimented in the ATAC program, is carried out. Both steady RANS and unsteady DDES approaches are used to model turbulence and compared to each other. The effect of the chemical nature of the mixture (either frozen or reacting) on the flow dynamics is discussed. The computations are compared to wall pressure measurements and flowfield visualizations by instantaneous Planar Laser Induced Fluorescence of OH (PLIF OH) and high frequency OH spontaneous emission. A self-sustained flow oscillation at a frequency of around 1 kHz is found numerically, in good agreement with the unsteady wall pressure measurements. An analysis of the space - time characteristics of the propagating disturbances contributes to a better understanding of this phenomenon. Note that a preliminary 2D study has been conducted both to investigate the influence of the boundary layer resolution and wall temperature on the averaged flowfield in RANS and to analyze the effect of a distinctive feature of the geometrical set-up on the flow dynamics in DDES. This work is detailed in appendix E.

8.1 Introduction

8.1.1 Context

In order to increase rocket launcher performances and payload capability, the area ratio between exit and throat section of the engine nozzle is made as large as possible. Furthermore, this nozzle needs to work from sea - level with about one bar ambient pressure to near vacuum. At ground and at the very beginning of the flight, the nozzle operates in overexpanded flow conditions, *i. e.* with an ambient pressure higher than the nozzle exit pressure. In such conditions, a shock structure, created in the nozzle extension to adapt the flow to the outside pressure, interacts with the upstream boundary layer. This so-called Shock Wave Boundary Layer Interaction (SWBLI) creates unsteady flow separations and the resulting instantaneous asymmetric pressure distribution gives birth to forces called side-loads [126]. For rocket engines working with liquid oxygen as oxidizer, the hot gases expanding in the nozzle contain an important amount of unburnt fuel, hydrogen for example. This fuel can burn with atmospheric oxygen if outside air is engulfing in the rear part of the nozzle where flow separation takes place. As a consequence, the rise of the temperature downstream due to this secondary combustion creates additional thermal loads which may burn the nozzle lip. A schematic description of these two phenomena is provided in Fig. 8.1. Furthermore, these unsteady loads can become very intense and critical for the propulsive system. Thus, in the design path of future launcher rockets with higher thrust, these issues have to be tackled thanks to a joint effort on both experiments and numerical simulations.

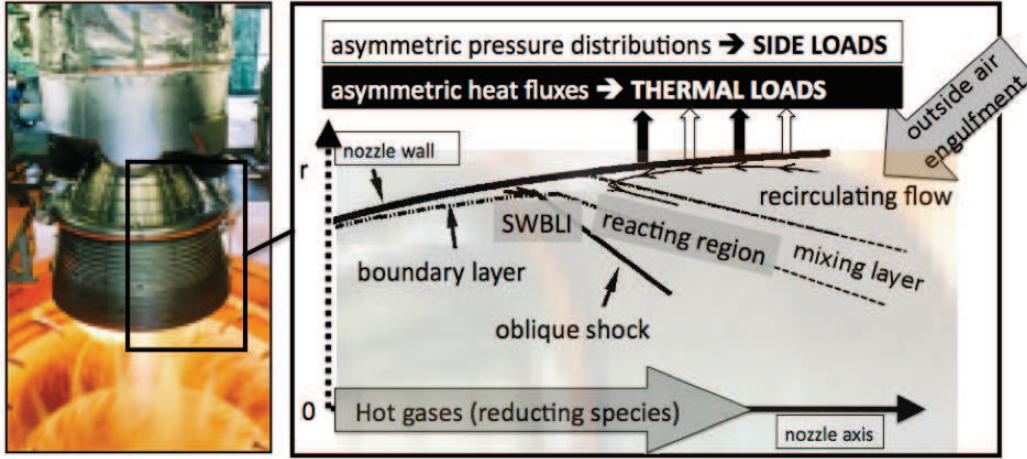


FIGURE 8.1 – Sketch of the flow structure in an overexpanded nozzle flow in hot gas conditions

8.1.2 State-of-the art

Several overexpanded nozzle inert flows have been experimentally studied during the past decade. The investigations concern the flow structure of axisymmetric [63, 125] and planar nozzles [15, 135]. The authors observed that the variation of the Nozzle Pressure Ratio number (NPR) equal to $p_{chamber}/p_{ambient}$ can lead to different separation shapes. One can distinguish two main regimes : Free Shock Separation (FSS) regime where the flow separates without reattaching to the wall and Restricted Shock Separation (RSS) where the flow reattaches before the exit of the extension. Side loads measurements have also been carried out on subscale laboratory nozzles [128]. Therefore the link between the flow structure and the side loads dynamics was made possible. A review of the state-of-the art knowledge on nozzle flow separation can also be found in [82]. Very few experimental campaigns have been conducted to investigate thermal loads occurring with hot gases. Two specific programs currently following this objective are known by the authors : the Calorimeter [83] and the ATAC¹ programs. In the framework of the Calorimeter test campaign a large unsteady heat fluxes and wall pressure measurement database is built for a wide range of operating conditions on a subscale axisymmetric nozzle [84]. However, in this work, no diagnostics of the reacting flow field inside the nozzle is available. On the other hand, the planar structure of the nozzle in the ATAC program makes possible the visualization of the reacting flow field both with Planar Laser Induced Fluorescence (PLIF) and spontaneous emission of the OH radicals. Wall pressure and heat fluxes were also measured during this campaign [133]. It is worthwhile to note that side loads measurements have been conducted by Tomita *et al.* both with cold and hot gases on an engine prototype [197].

Concerning numerical simulation, numerous studies are available in the litterature for overexpanded inert flows in axisymmetric [29, 78, 48] and planar nozzles [48, 213]. These studies highlight the capability of Reynolds Averaged Navier Stokes models (RANS) to describe the averaged flow in terms of separation position and shock structure. In particular, for axisymmetric cases, 2D grids reduce the cost of the computations hence allowing the investigation of a wide range of flow conditions. Moreover, this allows parametric studies on technological features such as the effect of film cooling [136]. The influence of the thermochemical state of the hot gases is also examined, see [77]. Nonetheless, for unsteady phenomena such as side-loads or transient regimes, 3D computations and time dependent description of the flow are required. As a consequence, one can naturally use a Large Eddy Simulation (LES) approach which is very efficient to reproduce the unsteady dynamics of the energetic turbulent structures if the grid spacing is fine enough [154, 112]. However, in such conditions of very high Reynolds numbers, Large Eddy

1. Aérodynamique des Tuyères et Arrières Corps (Nozzles and Afterbodies Aerodynamics)

Simulations (LES) of the whole overexpanded flow are unfeasible at an affordable computational cost. As a matter of fact attached boundary layers are the weak point of LES [166, 21] since the resolution by LES of the eddies in this flow region, which are very thin (of the order of ten wall units in all directions near the wall), is required and is drastically grid-points consuming. To cope with this limitation, wall layer models have been formulated [129, 141, 179, 140] but are still insufficient to model the behaviour of the boundary layer facing adverse pressure gradients, hence unable to solve a SWBLI on a complex configuration reasonably. That is why hybrid RANS/LES approach [188] is a good compromise to obtain an accurate description of the attached boundary layers thanks to the RANS modelling (Unsteady RANS precisely) while solving the unsteady dynamics of the larger energetics scales in the detached region thanks to LES. Therefore, for a DES grid, the meshing effort can be focused on the detached regions while keeping a RANS like boundary layer meshing strategy close to the walls. This considerably reduces the number of grid points required.

For cold flows, side loads computations have been initiated by Deck *et al.* for FSS conditions [47] in an Ideal Truncated Nozzle using URANS with an algebraic model. The occurrence of side loads during the hysteresis between FSS and RSS and the end-effect regime are scrutinized respectively in [49] and [44]. In the first study, original DES is employed with the Spalart-Allmaras model [189, 191] while Delayed DES [190] is used in the second. Side loads during the transient regime are treated by Wang [205] using URANS with hot gases. Nonetheless, to the author's knowledge, no unsteady computations of the reacting flow inside an overexpanded nozzle have been yet published. In that global framework, the current study is dedicated to the numerical investigation of the flow in the ATAC planar nozzle fed by hot gases in overexpanded conditions.

8.1.3 Outline of the paper

This paper is organized as follows : The experimental set-up and measurements are briefly described in section 8.2. In section 8.3, turbulence, chemistry models and numerical schemes are presented. Section 8.4 is dedicated to the description of the methodology employed to generate the calculation grid and the conditions of the computations. The averaged results are presented in section 8.5 and compared to the experimental values for both flowfield and wall pressure. The oscillating behaviour of the flow is scrutinized in section 8.6 and an analysis of the reacting region inside the nozzle is finally given in section 8.7.

8.2 Experimental set-up

The experimental apparatus consists in a planar half nozzle designed to investigate some of the processes encountered in reactive overexpanded nozzle flows [133]. The nozzle is fed by hot gases coming from a $LOx - GH_2$ axisymmetric co-axial combustor so called MASCOTTE which has been used for almost ten years and was very helpful in numerous key advances on the understanding of cryogenic combustion [22, 80, 23, 183]. Fig. 8.2 gives an overall view of the computational domain which corresponds to the downstream region of the test bench ; the zones distinguished by the colormap and boundary conditions will be discussed in section 8.4. The geometry of the nozzle and its main dimensions are given in Fig. 8.3. The distinctive features of this experiment are :

- an extension with a ratio equal to 11 between the outlet and the throat's heights creating an overexpanded flow for a NPR range from 20 to 60 ;
- a H_2 or He film is injected at half of the extension ;
- the length L_x of the extension is equal to 122.7 mm, the height of the exit measures $L_y = 28.2$ mm and the width of the nozzle is $L_z = 26$ mm hence verifying $L_x/L_y \approx 4.35$ $L_x/L_z \approx 4.72$.

As described in Fig. 8.4, the upper wall of the nozzle is equipped with unsteady pressure Kulite probes (40 kHz), steady pressure Statham and unsteady heat flux transducers (1 kHz), the location of these probes is given in table 8.1. A rectangular glass window on one of the side walls and on the bottom

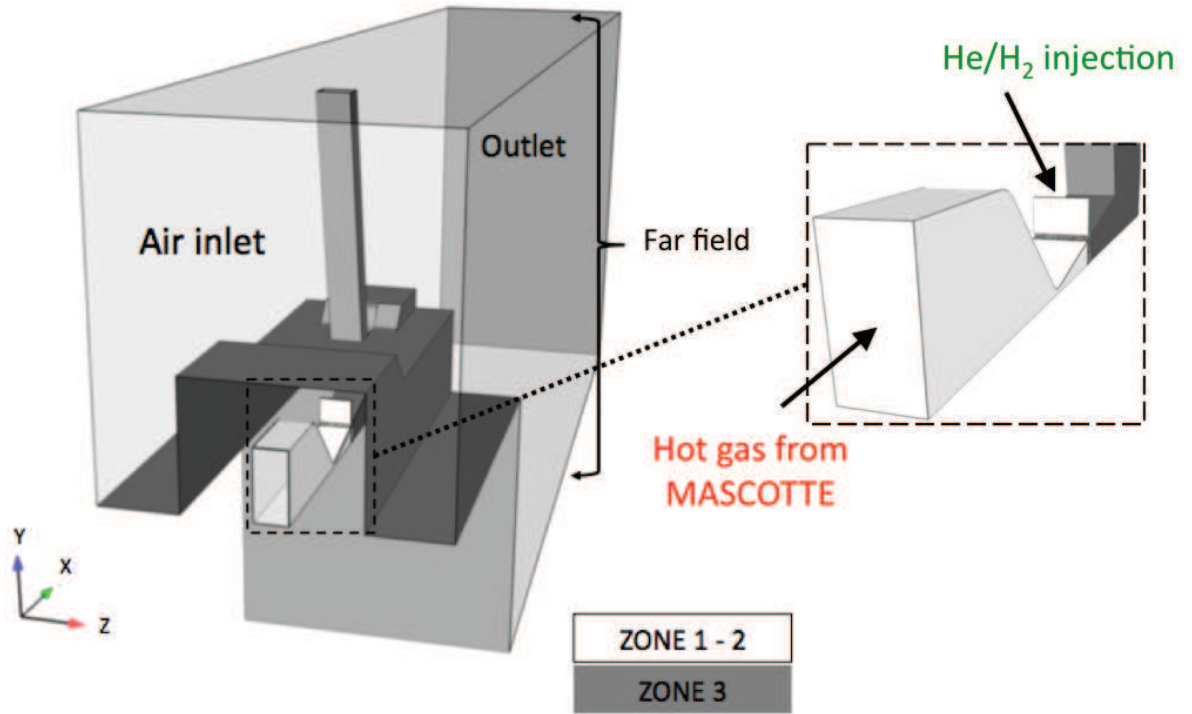


FIGURE 8.2 – Overall view of the computational domain with the main fluid boundary conditions

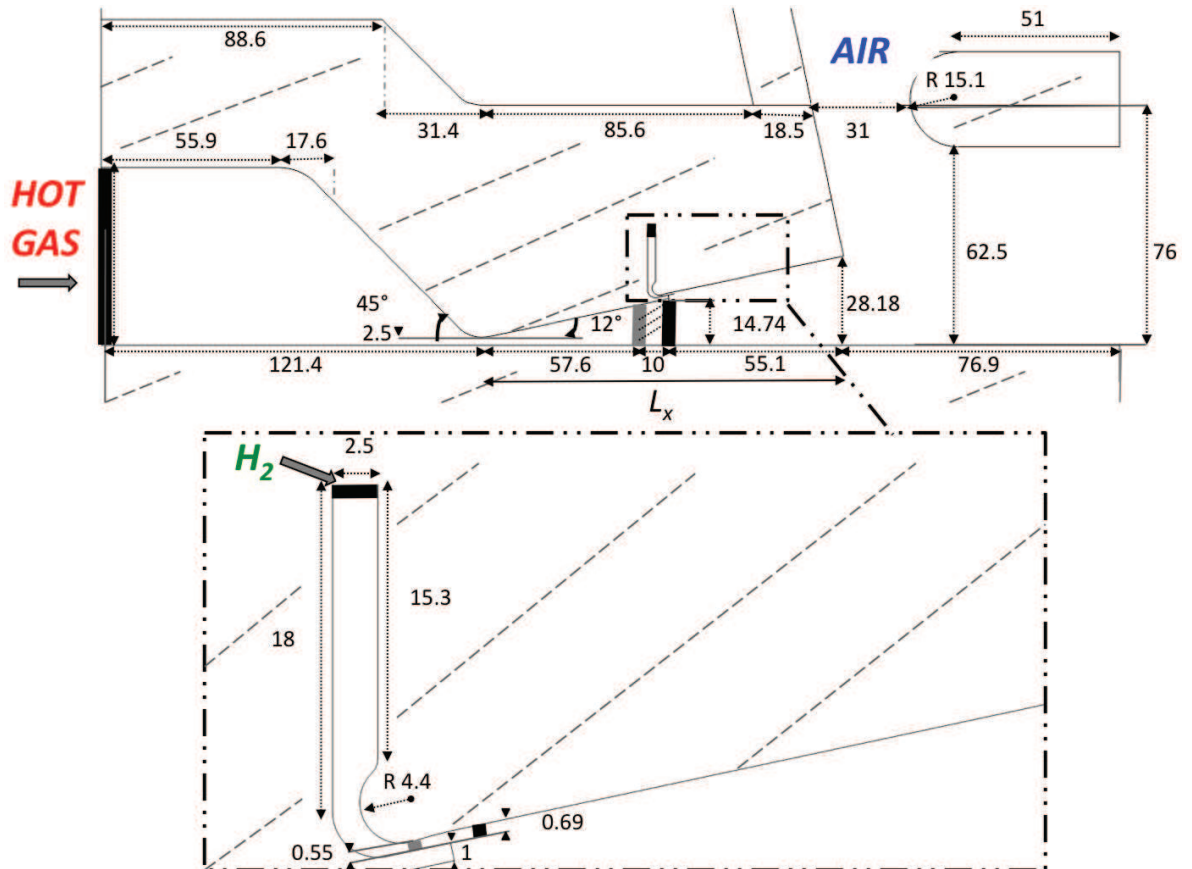


FIGURE 8.3 – Dimensions of the planar nozzle in the midspan, the black and grey thick lines indicate the boundaries of respectively zones 1 – 2 and zone 3

wall (Fig. 8.4) enables *OH* PLIF diagnostics at a low frequency (4 Hz) in the mid span section. *OH* spontaneous emissions are also recorded in the spanwise direction with a high speed camera (8 kHz).

TABLE 8.1 – Location of the pressure sensors

Probe name	X/L_x	Z/L_z
K_1	0.895	0.385
K_2	0.793	0.385
K_3	0.680	0.385
S_1	0.761	0.500
S_2	0.610	0.500

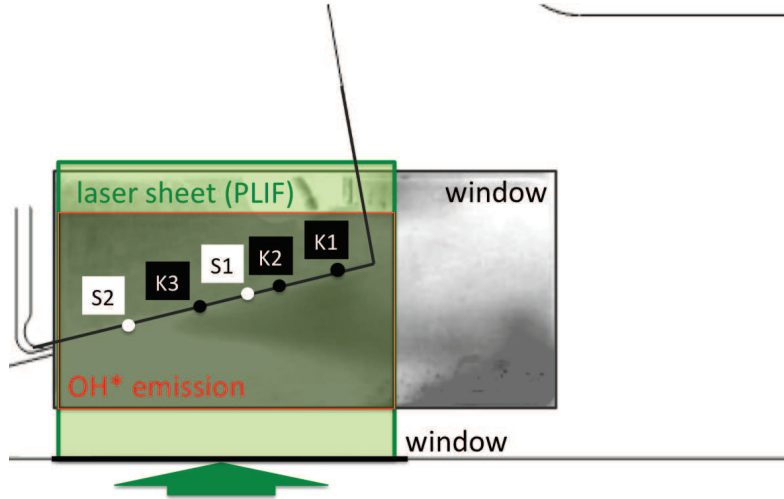


FIGURE 8.4 – Optical access, location of the laser sheet for PLIF visualization and recording window of OH emission. Position of the Kulite and Statham probes.

During the experimental campaign, in the combustor, several conditions of mixture ratio (MR) and NPR values were covered [133]. As illustrated in Fig. 8.5, a larger reacting region is evidenced as NPR decreases whatever the type of the additional injection (H_2 or He). Combustion inside the nozzle is enhanced with an injection of H_2 . In the present numerical study, emphasis is put on case $MR \approx 2.7$ and $NPR \approx 20$.

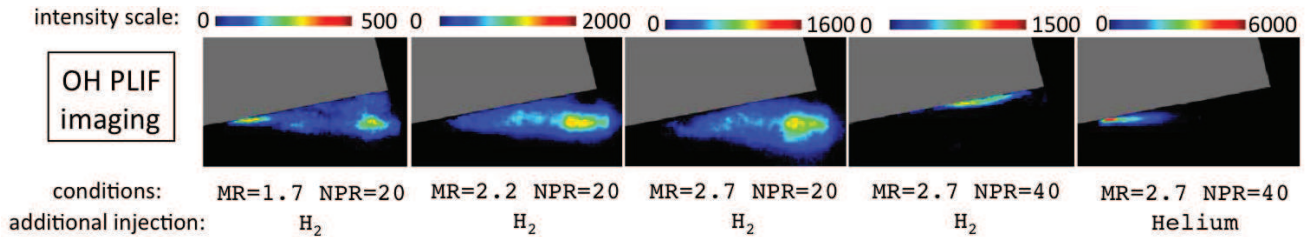


FIGURE 8.5 – Averaged PLIF OH images for different conditions in the combustion chamber

8.3 Numerical methods

This section is dedicated to the description of turbulence and combustion models and numerical schemes used in the CEDRE code used for the present computations. This code developed by Onera is dedicated to energetics problems involving turbulent reactive multiphase flows undergoing radiative transfer [30]. In particular, it was successfully used to compute turbomachinery [5, 120], air-breathing combustion systems [163, 176, 171] and atmospheric vehicle entry [164]. The code solves mass, momentum and total energy conservation equations as well as transport equations for turbulent (RANS) chemical species and other useful scalar quantities.

8.3.1 Turbulence modelling

The Reynolds stress tensor $-\widetilde{u_i''u_j''}$ of the RANS aerothermochemical equations is evaluated according to the Boussinesq approximation as :

$$-\widetilde{u_i''u_j''} = \nu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij}, \quad (8.1)$$

where ν_t is the turbulent viscosity. In this study, steady RANS and unsteady DDES approaches are based on the $k - \omega$ Shear Stress Transport (SST) turbulence closure for the RANS equations, where k is the turbulent kinetic energy and ω is the pseudo-dissipation. In the SST model, Menter proposes a two - equation closure [117] by expressing ν_t as :

$$\nu_t = \frac{k}{\omega} \quad (8.2)$$

The detailed transport equations and closure used for k and ω can be found in [117].

The DDES model employed in this paper is a hybrid RANS/LES approach consisting in a modification of the dissipation term ε in the k equation of the RANS SST model. In fact, the source terms of the turbulent kinetic energy equation is expressed as $P_k - \varepsilon$ where :

$$\varepsilon = \beta^* k \omega \quad (8.3)$$

$$P_k = 2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}\nu_t \quad (8.4)$$

where P_k is the production term. β^* is constant and equal to 0.09. Let us be reminded that $\widetilde{\mathbf{S}}$ is the symmetric tensor of $\nabla \widetilde{\mathbf{u}}$. In Eq. 8.3 a RANS length scale (l_{RANS}) can be introduced as $l_{RANS} = \sqrt{k}/\beta^*\omega$ and consequently ε can be written as $k^{3/2}/l_{RANS}$. Originally and similarly to the first version of Detached Eddy Simulation (referred to as DES97) of Spalart *et al.* [191, 188], Strelets [193] suggests to replace l_{RANS} in the expression of ε by the quantity $\min(l_{RANS}, C_{DES}\Delta)$ written down l_{DES} , l_{RANS} being equal to d the distance from the wall in the Spalart-Allmaras model [189]. The other terms and equations of the SST model remain unchanged. The subgrid parameter C_{DES} is equal to $(1 - F_1)C_{DES}^{k-\varepsilon} + F_1C_{DES}^{k-\omega}$, where $C_{DES}^{k-\varepsilon} = 0.61$, $C_{DES}^{k-\omega} = 0.78$ and F_1 is a function defined in the SST model as :

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (8.5)$$

$$\arg_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500 \nu}{d^2 \omega} \right), \frac{4 \sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} d^2} \right] \quad (8.6)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\sigma_{\omega} \frac{1}{\omega} \nabla k \cdot \nabla \omega \right) \quad (8.7)$$

$$\sigma_{\omega} = F_1 \sigma_{\omega 1} + (1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \quad (8.8)$$

where $CD_{k\omega}$ is a cross diffusion term and $\sigma_{\omega 1}$ and $\sigma_{\omega 2}$ are constants equal to 2.0 and 1.168 respectively. Nevertheless, a special concern was devoted to the region named the grey area where the model switches from RANS to LES, *i. e.* where l_{RANS} is close to $C_{DES}\Delta$. The treatment of this region needs a careful monitoring and has motivated the improvement of the original method leading to the introduction of DDES [190]. Indeed, while the DES97 length scale depends only on the mesh spacing and on l_{RANS} resulting in a grid-dependent switching region, the DDES ensures that boundary layers are included in the RANS region avoiding an early switch to LES which can lead to unphysical outcomes like artificial relaminarisation, also called Modelled Stressed Depletion (see [168] for a review). A new length scale l_{DDES} is given by Spalart *et al.* in [190] as :

$$l_{DDES} = l_{RANS} - f_{DDES} \times \max(0, l_{RANS} - C_{DES}\Delta) \quad (8.9)$$

where f_{DDES} was defined as :

$$f_{DDES} = 1 - \tanh[(8r_{DDES})^3] \quad (8.10)$$

$$r_{DDES} = \frac{\nu_t + \nu}{\kappa^2 d^2 \sqrt{\nabla \widetilde{\mathbf{u}} : \nabla \widetilde{\mathbf{u}}}} \quad (8.11)$$

The function f_{DDES} is introduced to make sure that the boundary layer is treated by the RANS approach since by definition f_{DDES} is equal to 0 in the boundary layer and 1 elsewhere. Away from the wall, if the destruction term balances the production one then the eddy viscosity ν_t reduces to :

$$\nu_t \approx \beta^{*3/2} C_{DES}^{k-\varepsilon} \Delta^2 |\tilde{S}| \quad (8.12)$$

This expression is similar to a Smagorinsky subgrid scale viscosity (SGS) [185] where $\nu_t = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}(C_{SGS}\Delta)^2$. On a theoretical ground, all RANS models can be efficiently derived into (D)DES using a similar methodology. Moreover, specific modifications are proposed in this paper to the original DDES approach. In the reference paper, Δ is equal to $\max(\Delta_{x,y,z})$ which was first proposed for DES97 whereas, in our case, we take Δ equal to the cubic root of the cell volume which is the classical filter width used in LES [40]. In addition, we propose in this paper to take $f_{DDES} = 1 - F_1$. Such a choice was previously recommended for the SST based DES [118] ; a more detailed review of the effect of such boundary layer shielding functions is also provided by Fan *et al.* [61].

To illustrate the behaviour of the DDES model employed in this paper, a boundary layer profile in the upstream of the separation occurring in the present test case is scrutinized in Fig. 8.6. The corresponding freestream mach number M is equal to 2.5. In the left part of this figure the evolution of l_{DDES} is illustrated, on the right part, the evolution of the velocity and turbulent viscosity are compared for RANS and DDES. Note that a (y^+, u^{*+}) representation of the velocities are employed, the boundary layer thickness δ_{BL} is equal to 1.5×10^{-3} m in that case. Let us be reminded of the definition of y^+ and u^{*+} for compressible flows (where u^* is the Van Driest transform of u [55]) :

$$y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu_w} \quad (8.13)$$

$$u^{*+} = \frac{\int_0^u \sqrt{\frac{\rho}{\rho_w}} du}{u_\tau} \quad (8.14)$$

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}}, \quad (8.15)$$

where τ_w is the wall skin friction, ρ_w and ν_w being the density and viscosity at the wall respectively ; y is the distance to the wall. From Fig. 8.6 boundary layer profiles between RANS and DDES are perfectly matched despite a minor discrepancy on the turbulent viscosity level. In other words, the attached boundary layer is shielded against the MSD problem.

Moreover it is important to point out the originality of the author's work in using DES for reacting flows on 3D grids, a 2D DES approach on a model scramjet by Choi *et al.* [32] being the only previous attempt at the author's knowledge. Indeed, the DDES approach addressed in this paper has successfully been used for a backward facing step premixed methane-air flame [171]. Also note that DDES has already been used to tackle the nozzle side-loads issue [44] as well as supersonic inlet buzz [198] which also features large scale motion of the shock system.

8.3.2 Chemistry model

The mixture is described by seven species (H_2 , H_2O , N_2 , O_2 , OH , H and O). In our computations, the chemical composition of the gases is either frozen or modelled by a finite rate chemistry. In the case of a finite rate chemistry, a seven-step chemical scheme using six species (H_2 , O_2 , H_2O , OH , H , O) is employed. The corresponding set of chemical data given in table 8.2 is a modified version of Ecklund *et al.*'s seven-step scheme [60] (originally derivated from a 18 reaction scheme by Drummond *et al.* [57]) and has been previously used with the present code for a diffusion flame [69]. These modifications were introduced to recover correct ignition delay and heat release. Indeed, the combustion regime in this experimental set-up is mainly diffusive as shown in the left part of Fig. 8.7. This plot displays the probability density function of premixedness index in the flame region. This quantity, introduced by Takeno *et al.* [214] is defined as :

$$\frac{\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{H_2}}{||\nabla Y_{O_2}|| \cdot ||\nabla Y_{H_2}||} \quad (8.16)$$

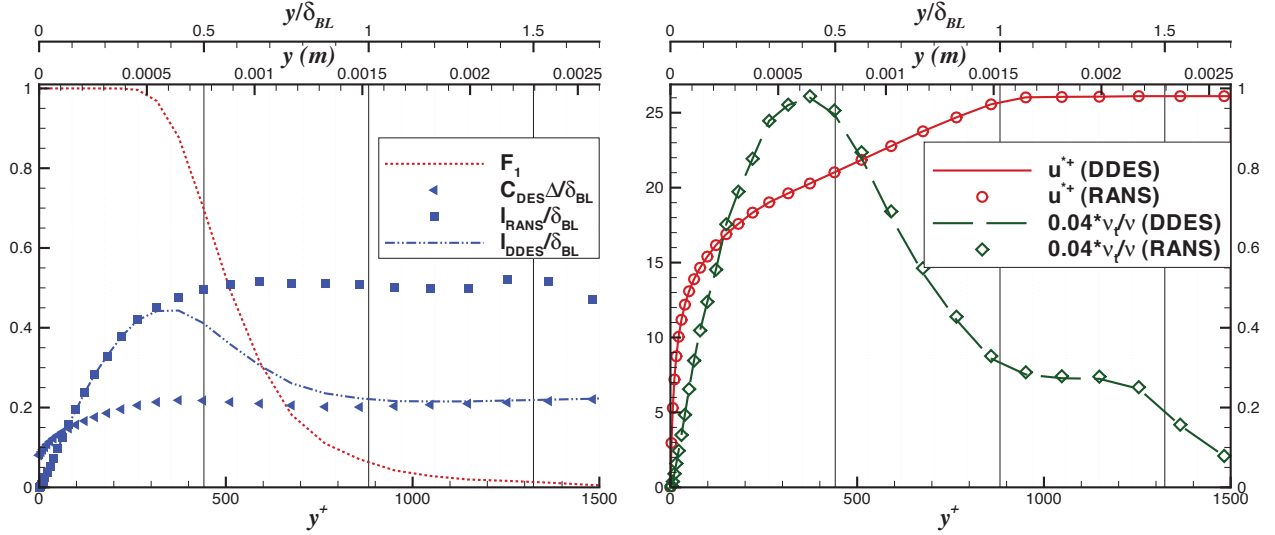


FIGURE 8.6 – Evolution of l_{DES} in an attached supersonic boundary layer corresponding to the upstream conditions of the present computation. Comparison between the boundary layer velocity profile (u^{*+} and ν_t/ν) between RANS and DDES

Therefore, a positive value of this index characterizes premixed conditions while a negative value corresponds to diffusion.

The set of chemical data has been tested is studied at stoichiometric equivalence ratio and atmospheric pressure for a $H_2 - Air$ mixture. The Prandtl and Schmidt numbers used in the computations are given in table 8.3. The evolution of the ignition delay versus temperature is compared to the results of O'Connaire *et al.* [35] obtained with a detailed chemistry (right part of Fig. 8.7). If we consider that in the nozzle combustion occurs in the separated region, where the turbulent time scale is at least one order greater than the ignition delay, the discrepancy observed in Fig. 8.7 is acceptable (see 8.9.2).

TABLE 8.2 – The seven-step $H_2 - O_2$ kinetic scheme (A is expressed in $m^3 \cdot mole^{-1} \cdot s^{-1}$ and T_a in K)

Reaction	Forward			Backward		
	A	β	T_a	A	β	T_a
$H_2 + O_2 \leftrightarrow 2OH$	$1.70 \times 10^{+07}$	0.00	24 240	$2.781 \times 10^{+04}$	0.363	14 620
$H_2 + OH \leftrightarrow H_2O + H$	$3.16 \times 10^{+01}$	1.80	1526	$8.953 \times 10^{+02}$	1.572	9346
$2H \leftrightarrow H_2$	$3.265 \times 10^{+07}$	-1.00	0	$3.08 \times 10^{+06}$	0.964	47 201
$2OH \leftrightarrow H_2O + O$	$5.50 \times 10^{+08}$	0.00	1511	$2.797 \times 10^{+10}$	-0.2004	10 490
$H + OH \leftrightarrow H_2O$	$1.105 \times 10^{+12}$	-2.00	0	$2.365 \times 10^{+06}$	1.313	50 910
$H_2 + O \leftrightarrow OH + H$	$2.07 \times 10^{+08}$	0.00	6924	$1.153 \times 10^{+08}$	-0.027 26	5769
$O_2 + H \leftrightarrow OH + O$	$1.42 \times 10^{+08}$	0.00	8258	$4.17 \times 10^{+05}$	0.3905	-205

TABLE 8.3 – Prandtl and Schmidt numbers for the species

	H_2	H_2O	N_2	O_2	OH	H	O
Prandtl	0.70	0.72	0.70	0.70	0.75	0.67	0.67
Schmidt	0.09	0.58	0.71	0.84	0.67	0.065	0.63

8.3.3 Numerical schemes

The numerical method is based on a cell-centered finite volume approach for general unstructured grids. Roe's flux difference splitting, associated with a MUSCL approach [86], is employed for the advective

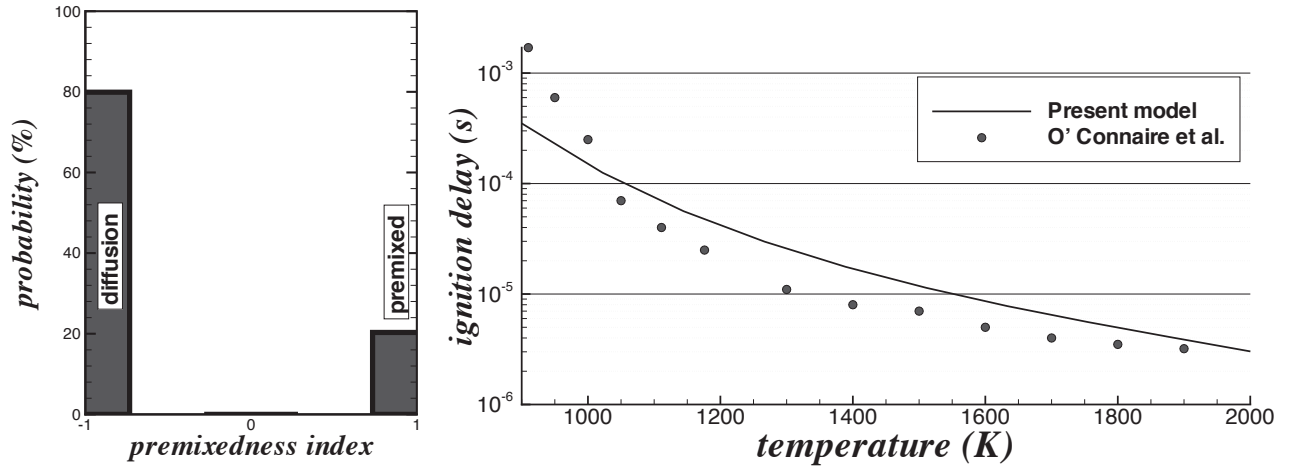


FIGURE 8.7 – (left) Probability distribution of the premixedness index, (right) temperature versus ignition delay for the current scheme compared to O' Connaire et al. [35]

fluxes. A Van Leer limiter is used in high gradients regions [110] to ensure the monotony of the numerical scheme. This method results in a second order spatial accuracy (third order on an isotropic mesh). The time integration is carried out by a sub-iterated implicit Gear scheme [155].

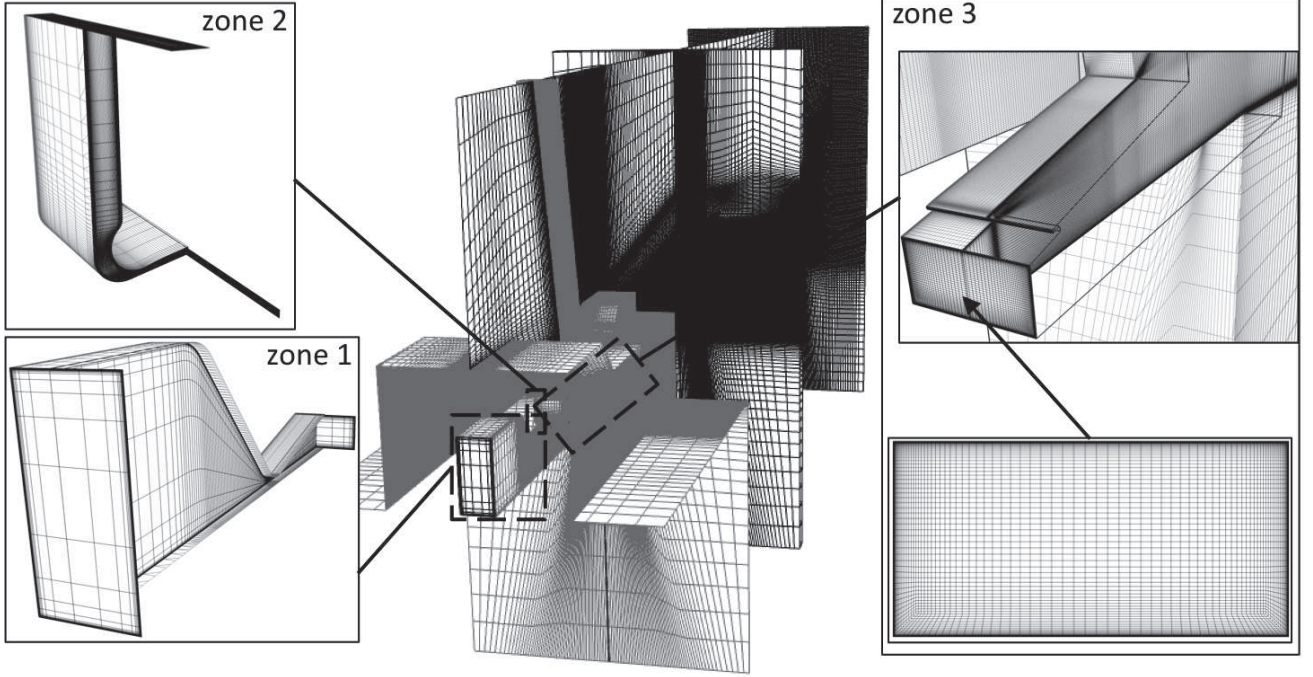
8.4 Numerical test case

8.4.1 Meshing strategy

In order to minimize the cost of the simulations presented in this paper, the computational domain is divided into three regions computed independently. This separation, highlighted in Figs. 8.2 and 8.3, is made possible thanks to the supersonic nature of the flow in the upstream main nozzle (zone 1) and in the upstream injector (zone 2). Zone 3 corresponds to the separated region and the farfield. The calculation grids considered in this work and depicted in Fig 8.8 are fully structured. The characteristics of the 3D grid for the three zones are gathered in table 8.4. A particular attention has been paid to the mesh refinement close to the wall where the mesh spacing of the first cell does not exceed 2 in wall units in the direction normal to the wall ($y^+ < 2$). Moreover 25 and 40 points are respectively taken to discretize the four upstream boundary layers near the lower and lateral and upper walls respectively. In the spanwise section of the nozzle in zone 3 and as illustrated in Fig. 8.8, an O-topology meshing strategy was employed. This method is very powerful to avoid small square cells at the corners and the propagation of the corresponding gridlines throughout the computational domain. This technique is often used for axisymmetric nozzles [44] and afterbodies [206]. Note that for the O-grid, two zones are distinguished, a central one referred to as core, the boundary layer and its propagation in the plume. The total number of cells of zone 3 on which percentages given in table 8.4 are based is equal to $6,1 \cdot 10^6$. One can notice that the percentage of zone 3 corresponding to the nozzle and the plume corresponds to 60% of the total number of cells. In this table, to illustrate the range of cell sizes corresponding to the main regions of the computations, the hydraulic diameter D_h of a cell is defined as $6V/S$ where V is the volume of a cell and S is the sum of the cell faces areas. Since the mesh is fully structured, the cell distribution can be given by the number of points in each of the cartesian or cylindrical directions ($n_{x,y,z/r,\theta}$). Note that the optimal number of cells in the vertical boundary layers and the wall temperature is deduced from a preliminary study, not described in this paper, on 2D grids.

TABLE 8.4 – Grid refinement for the main regions of the computational domain

Zone	Number of cells	D_h (μm)	n_x	n_y, n_r	n_z, n_θ
1 (Nozzle)	862,400	10 to 5,000	176	70	70
2 (Injector)	588,000	1 to 1,000	120	70	70
3 (Nozzle)	1,687,500, 28% (core)	7.2 to 1,000	250	135	50
	1,156,250, 19% (b.l.)		250	25	185
3 (Plume)	472,500, 8%(core)	10 to 10,000	70	135	50
	323,750, 5% (b.l.)		70	25	185

**FIGURE 8.8** – (left) Views of zone 1 - bottom - and zone 2 - top - meshes, (center) global view of the whole meshes, (right) detailed view of the injector - top - and inlet boundaries - bottom - of zone 3

8.4.2 Conditions of the computations

The boundaries and the corresponding imposed variables are detailed in table 8.5 for the three computational domains.

TABLE 8.5 – Type of boundary conditions

	Zone	Boundary condition	Imposed variables
SI_1	1	Subsonic inlet	$p_i, T_i, Y_\alpha, k, \omega$
SI_2	2	Subsonic inlet	$p_i, T_i, Y_\alpha, k, \omega$
$SupI_3$	3	Supersonic inlets	$\mathbf{u}, T, Y_\alpha, k, \omega$
SI_3	3	Far field	$p_i, T_i, Y_\alpha, k, \omega$
$SupO_{1/2}$	1/2	Supersonic outlet	—
SO_3	3	Subsonic outlet	p
$NMW_{1/3}$	1/3	Nozzle and mast wall	T_w
$OW_{2/3}$	2/3	Other walls	Φ_w

In table 8.5, T_i and p_i are stagnation temperature and pressure, Y_α is the mass fraction of species α . T_w and Φ_w are the wall temperature and heat flux. The values of the imposed boundary conditions for the aerothermochemical, turbulent variables and species mass fractions are given respectively in tables

8.6 and 8.7. Concerning the supersonic inlets $SupI_3$ of zone 3, the values imposed are extracted from the RANS computations of zones 1 and 2 which correspond to the upstream nozzle and injector respectively. The composition of the hot gases at the upstream nozzle's inlet (SI_1) are determined thanks to an equilibrium computation at stagnation pressure and temperature for a momentum ratio of 3.25. The outlet pressure (SO_3) is imposed at 100 618 Pa, the nozzle and mast walls are taken iso-thermal at a temperature of 520 K while the other walls are taken adiabatic *i. e.* $\Phi_w = 0 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$).

TABLE 8.6 – *Values of the imposed thermodynamic variables and turbulent quantities at the boundaries*

	$p_i(\text{Pa})$	$T_i(\text{K})$	$k(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2})$	$\omega(\text{s}^{-1})$
SI_1	$2.22 \times 10^{+6}$	2483.70	5.22	139.0
SI_2	$3.2 \times 10^{+5}$	294.25	56.25	13 693.1
SI_3	101 325	291.00	0.50	14.3

TABLE 8.7 – *Values of the imposed mass fraction at the boundaries*

	Y_{H_2}	Y_{H_2O}	Y_{N_2}	Y_{O_2}	Y_{OH}	Y_H	Y_O
SI_1	0.138 14	0.856 25	0.000 00	$2. \times 10^{-5}$	0.004 21	0.001 33	$5. \times 10^{-5}$
SI_2	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SI_3	0.00	0.00	0.77	0.23	0.00	0.00	0.00

Table 8.8 summarizes the computations conducted in this work and gives, in particular, the number of iterations required to obtain a statistical convergence of the DDES computations and the number of iterations needed for the RANS computations. The timestep applied to the unsteady computations is equal to $0.4 \mu\text{s}$. It was chosen so as to verify $CFL < 2$ in 80% of the separated region. The computations were parallelized on 128 Itanium-2 processors. The unsteady computations DDES-A and DDES-B required more than 100,000 CPU hours (added for all processors) each. Note that the CPU cost per cell and per iteration is around 6×10^{-4} s on an Itanium processor.

TABLE 8.8 – *Modelling used in the computations and characteristics*

Zone	Model	Chemistry	case	Iterations	dt (s)
1	$k - \omega$ SST	frozen	all cases	5000	$1. \times 10^{-4}$
2	$k - \omega$ SST	frozen	all cases	5000	$1. \times 10^{-4}$
3	$k - \omega$ SST	Arrhenius	RANS	10 000	$1. \times 10^{-4}$
	DDES	Arrhenius	DDES-A	50 000	$4. \times 10^{-7}$
	DDES	frozen	DDES-B	50 000	$4. \times 10^{-7}$

8.5 Results and discussion

8.5.1 Description of the flow

Fig. 8.9 highlights the main characteristics of the flow. In the left part of this figure, isosurfaces corresponding to a given value of the Q criterion evidence turbulent structures and are colored by the spanwise velocity. The usual definition of Q given by Jeong and Hussain [93] was used :

$$Q = -\frac{1}{2}(\tilde{\Omega} : \tilde{\Omega} - \tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}) \quad (8.17)$$

where $\tilde{\Omega}$ is the antisymmetric tensor of $\nabla \tilde{\mathbf{u}}$. A positive value of Q denotes coherent structures. In Fig. 8.9 a value of Q corresponding to $Q(r_{exit}/U_\infty) = 6$ is taken. Several remarks arise from this part of the

figure : first, this flow is fully tri-dimensionnal and the shock interacts with the four boundary layers since the flow separates on the lower and upper walls as well as on the lateral walls. Some interesting features of this flow can also be noticed such as the occurrence of large scale lateral vortices (1) and numerous turbulent structures (2) in the lower separation. Furthermore, the planar structure of the eddies close to the separation point characterize the birth of the mixing layer (3). Outside the nozzle, as displayed in the right part of the figure, a diffusion flame materialized by a temperature isosurface ($T = 1500$ K) develops in the subsonic region.

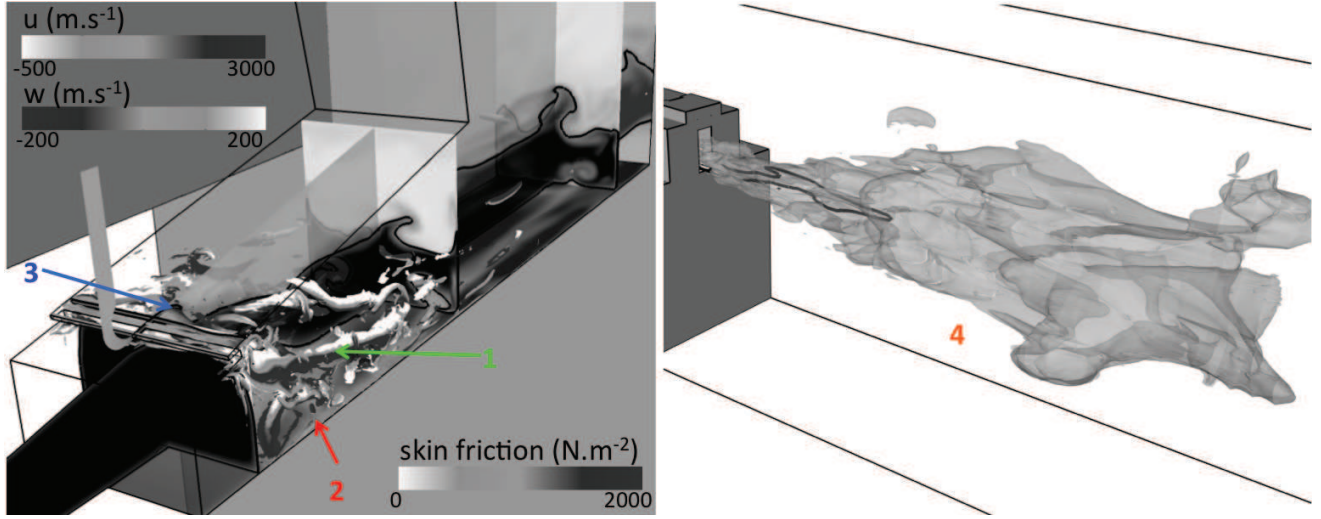


FIGURE 8.9 – (left) Instantaneous streamwise velocity ($\tilde{u}$) flowfield for DDES-A in the mid span and two streamwise cuts of the domain inside the nozzle, (black) Mach = 1 iso-line, Q criterion isosurfaces ($Q \cdot (r_{exit}/U_\infty)^2 = 6$) colored by the spanwise velocity (w), skin friction for the lower wall; (right) View of the flow outside, temperature iso-surface, Mach = 1 iso-line

8.5.2 Analysis of the time-averaged aerodynamic flowfield and wall pressure

After the transient phase at the beginning of the computations, the unsteady flowfields (DDES-A and DDES-B) are averaged over a physical duration of Δt_{tot} equal to 20 ms with $\Delta t_{tot} U_\infty / L_{nozzle} = 450$. Fig. 8.10 displays some general features of the separated region for the three computations. The first remark which arises from this comparison is that the RANS computation clearly differs from the DDES cases in terms of flow structure. On the upper wall, RANS exhibits a massive separation with a FSS pattern and a small recirculation at the end of the divergent which is often obtained in axisymmetrical configurations [46, 136]. For DDES-A and DDES-B, a large recirculation region is pointed out in the midspan section with a reattachment before the exit. Moreover, the averaged streamlines show the 3D structure of the separated flow for DDES computations and the occurrence of several paired streamwise vortices while the flow given by RANS computation keeps a rather 2D structure as evidenced by parallelism of the streamlines in the transverse planes. In RANS the first shock reflected on the lower wall is very intense and has a 3D structure as illustrated by the friction lines which have a characteristic shape usually found in 2D SWBLI [59]; a single corner bubble is also identified. For the DDES computations, the shock oscillates and the lower separation is damped by averaging. Nevertheless, DDES exhibits two pairs of counter-rotating vortices : One is located in the corner and the other in the detached region. This remark illustrates the 3D nature of the upper and lower separations. Moreover, it is worthwhile to note that combustion in the DDES-A computation barely modifies the flow structure.

To go further into the comparison between the three computations, transverse profiles of averaged streamwise velocity $\langle \tilde{u} \rangle$ and turbulent Mach number, noted M_t , are drawn along the nozzle in the

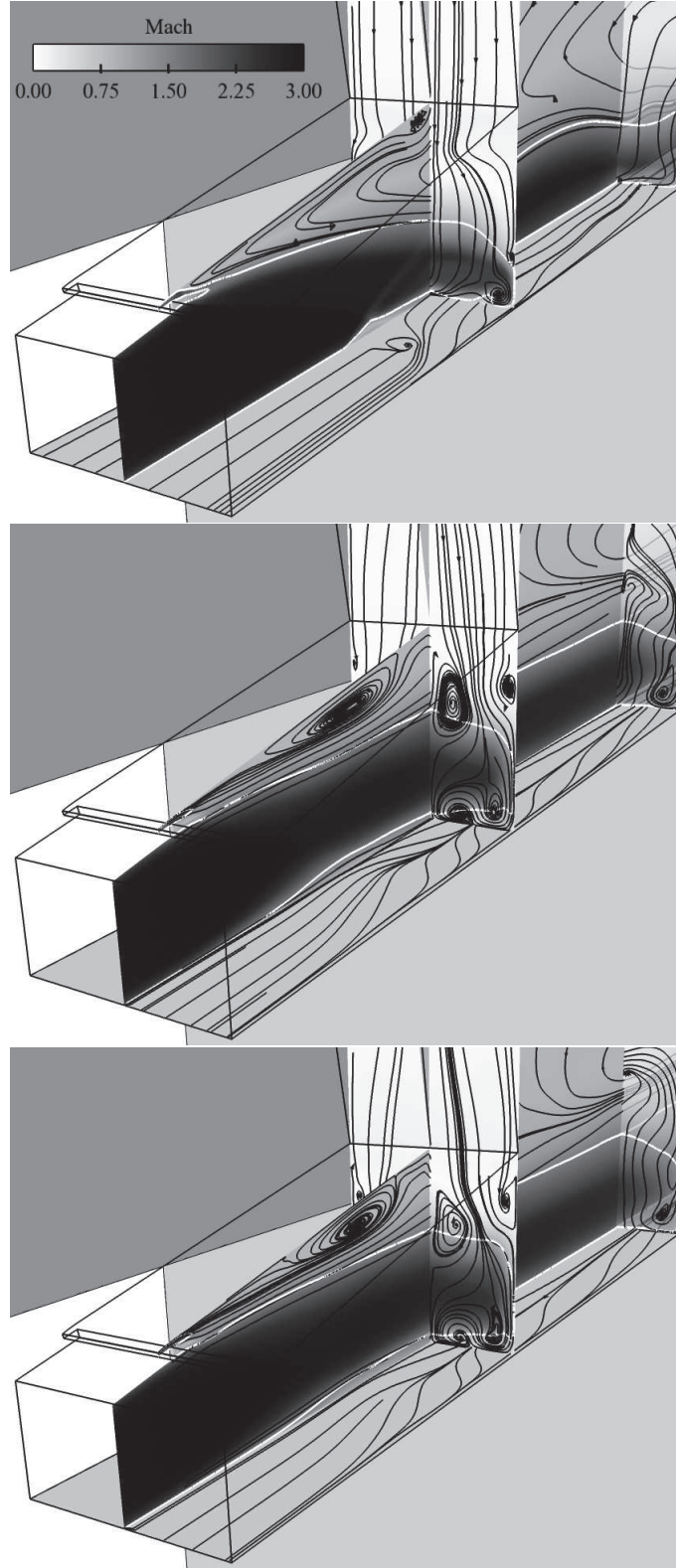


FIGURE 8.10 – Averaged Mach fields, (white line) $Mach = 1$ iso-line, (black line) streamtraces, for a) RANS, b) DDES-A, and c) DDES-B

midspan section in Fig. 8.11. M_t is defined respectively as $\sqrt{k}/c$ for the RANS computation and as

$$M_t = \frac{\sqrt{0.5 [\langle \tilde{u}^2 \rangle - \langle \tilde{u} \rangle^2] + (\langle \tilde{v}^2 \rangle - \langle \tilde{v} \rangle^2) + (\langle \tilde{w}^2 \rangle - \langle \tilde{w} \rangle^2)}}{\langle \tilde{c} \rangle} \quad (8.18)$$

for DDES. In these profiles, and accordingly to the previous analysis, there are no major differences between the DDES computations. One can point out that the velocity is slightly higher in the exit section for DDES-A and this illustrates the effect of combustion. Besides, the RANS computation clearly demonstrates the occurrence of a massive separation (second and third profile) along with a small separation on the lower wall pointed out by a backflow (second profile). In the last profile, it appears that the averaged supersonic core flows are significantly deviated in the vertical direction for the DDES computations.

Concerning the fluctuating velocities, the turbulent Mach number of the RANS computation has the same shape in the vertical direction as in DDES. However, the levels are much more important in DDES and particularly in the region between the end of the nozzle and the bench exit while k reaches 0 for RANS. We can also notice that the turbulent Mach number for the DDES computations almost reaches 1. This is the consequence of an intense fluctuation of the shock structure position.

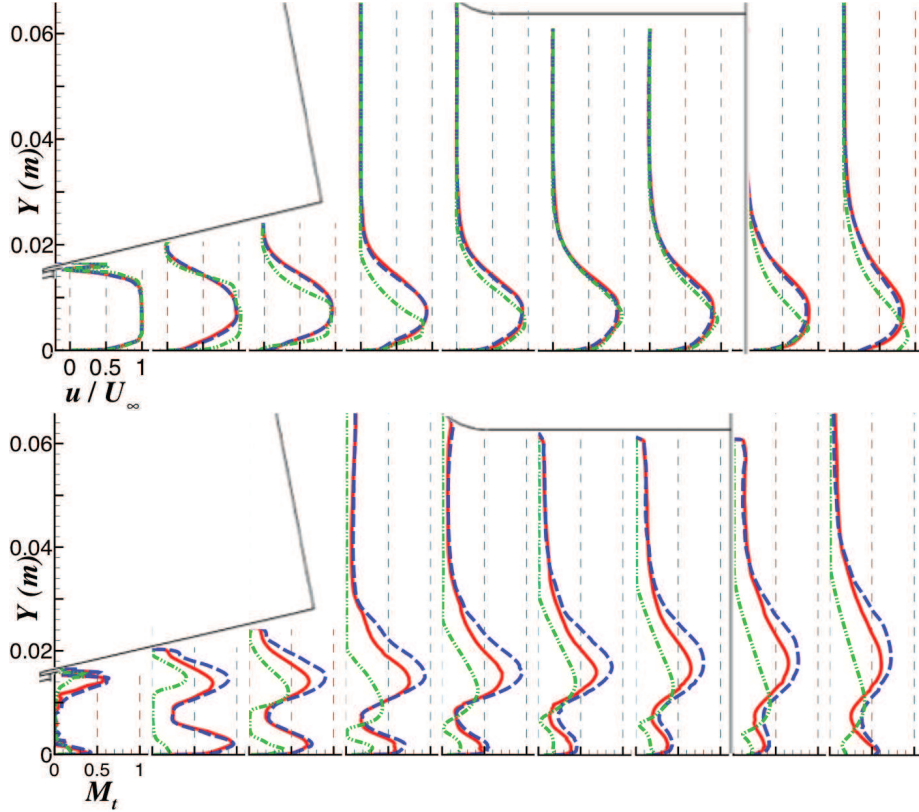


FIGURE 8.11 – Evolution of the averaged streamwise velocity normalized by U_∞ (top) and M_t (bottom) in the mid-span of the nozzle for RANS (green dash-dotted line), DDES-A (red line) and DDES-B (blue dashed line)

In the next paragraph and section, the numerical simulations will be compared to the time averaged experimental measurements with a special concern on the time averaging. Indeed, to perform an accurate statistical analysis, the computation has to be sampled on a sufficient duration to integrate all the spectral information (including low frequencies). In practice, unsteady signals issued from CFD are usually oversampled on a short duration to keep a reasonable computational cost. From a statistical point of view, it is not relevant to compare two sequences of data whose duration differs significantly [167]. Moreover, in this particular case the contribution of low frequencies in the measured flow dynamics are important and cannot be neglected as it will be shown in paragraph 8.6.1. As a consequence, to compare the 20 ms sample of our computations to 6 s of experimental signal, the following methodology will be applied. Firstly, for the wall pressure measurements an error bar will be added to the averaged measurements (6 s) corresponding to the minima and maxima of averages made during 20 ms (Fig. 8.12). Secondly, for averaged flow field data (OH emission), the averaged results (6 s) are presented along with three 20 ms averages corresponding to different levels of intensity (Fig. 8.13).

The averaged pressure $\langle \tilde{p} \rangle$ and RMS fluctuations p'_{RMS} are compared to the measurements in Fig. 8.12 following the previous guidelines. In order to take into account the spanwise evolution of these values, a scatterplot representation, colored by the distance from the midspan, is employed. The results obtained for $\langle \tilde{p} \rangle$ (in the left part of the figure) are satisfactory, 4% discrepancies being observed for the RANS computations, 3% and 2% for DDES-A and DDES-B (compared to the 6 s average). One should remark that combustion tends to raise the pressure downstream of the separation. Such an effect was also evidenced in the computations of Gross and Weiland [77] including the combustion effects in axisymmetric configurations. In the right part, the comparison between computed pressure fluctuations show important discrepancies. There are several explanations to this gap among which the insufficient space discretization in particular in the spanwise direction. Indeed, an inaccurate resolution of the vortices populating the separated region may lead to oversized turbulent structures impinging the wall resulting in greater pressure fluctuations. Nevertheless, the same tendency (decay) is observed.

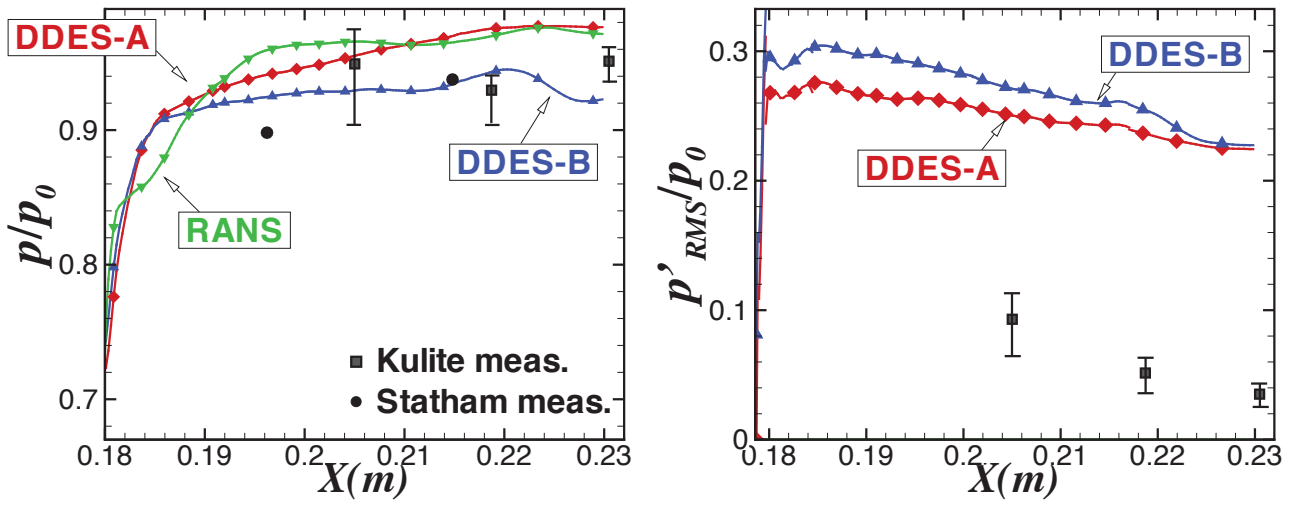


FIGURE 8.12 – (left) Evolution of the averaged pressure normalized by the ambient pressure along the upper part of the extension, (right) RMS pressure fluctuations.

8.5.3 Analysis of the time averaged thermochemical flowfields

To assess the capability of our computations to reproduce the reacting phenomenon occurring inside the nozzle, it is worthwhile to compare the averaged OH mass fraction integrated in the spanwise direction with the subsequent measurements obtained by high frequency OH emission diagnostics (Fig. 8.13). As mentioned in the previous section, four visualizations are provided for the experiments which correspond to : a 6 s average which corresponds to the duration of the test in stabilized conditions, and three averages during 20 ms. An additional processing should be made on the averaged flowfields to obtain the OH emission in the measurement window but such an approach is out of scope in the present study, hence the following comparison is mostly qualitative. First, according to the experimental visualizations it appears that there is a significant difference between the 6 s average and the 20 ms averages. This is due to a low frequency phenomena which is also evidenced on the pressure spectra in paragraph 8.6.1. In the RANS calculation the structure of the reacting region is mainly two-dimensional and a characteristic diffusion flame takes place immediately after separation. Such a shape corresponds to none of the OH emission visualizations. For the DDES-A case an intense reacting region is evidenced at the tip of the divergent, such a feature being in agreement with the experimental pictures. However, in the lower part of the window the averaged OH mass fraction decreases alike the measurements. One can argue that this discrepancy can be caused by an inaccurate characterization of the lateral walls. As a matter

of fact, in the computations, the lateral walls are taken with a fixed temperature of 520 K which could be lower than in the experiment (where no cooling is applied on the lateral windows) and lead to less intense combustion.

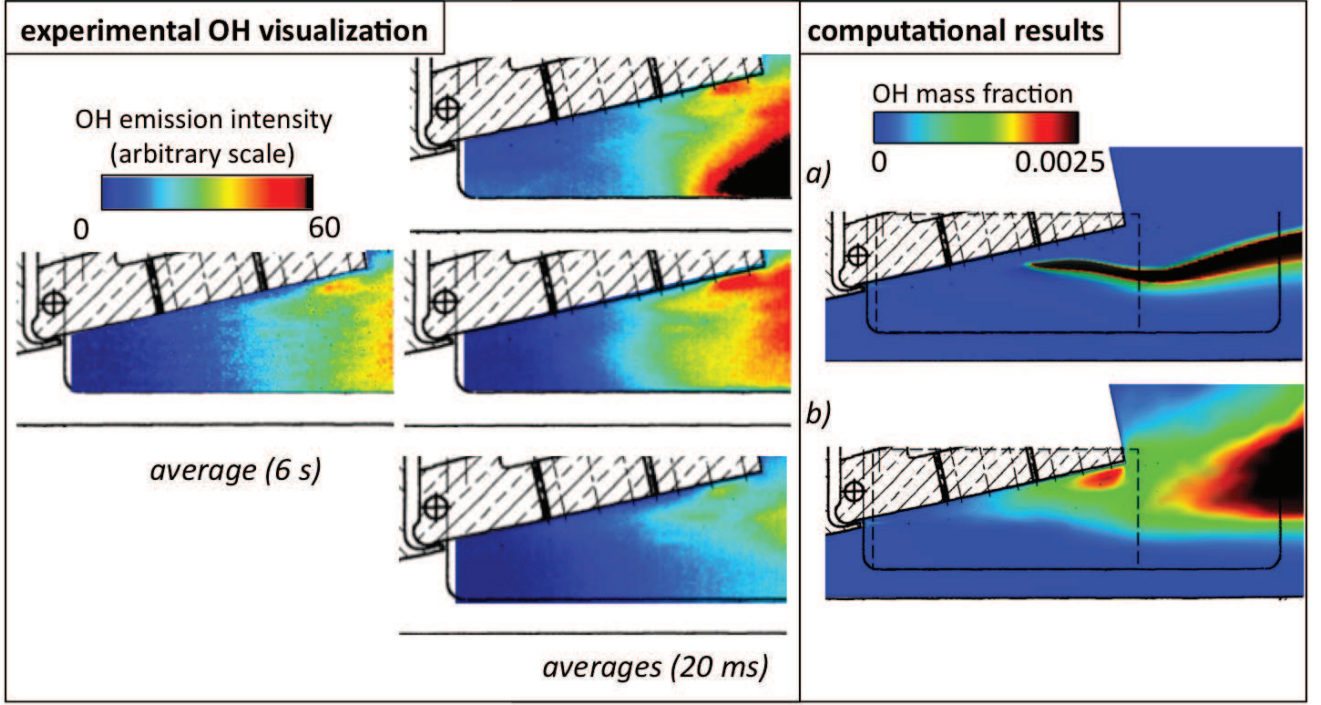


FIGURE 8.13 – Averaged OH emission intensity during 6 s (left), averages during 20 ms (middle), OH mass fraction integrated in the spanwise direction for a) RANS and b) DDES-A

Similarly to the analysis provided for the aerodynamic flow, the averaged temperature $\langle \tilde{T} \rangle$ and RMS fluctuations T'_{RMS} in the mid-span section are drawn in Fig. 8.14. The evolution of the temperature for the RANS computation clearly demonstrates the diffusion nature of such a flame with a peak of high temperature in the mixing layer resulting from the heat release of the flame. The unsteady behaviour of the flame given by the DDES-A computation results in a wider high temperature region than in the RANS calculation. For values of ordinate Y/L_y lower than 0.4 m DDES-A and DDES-B give the same results. Downstream of the nozzle very intense fluctuations of the flame position and of the temperature are obtained since RMS temperature can be higher than 500 K.

8.6 Analysis of the flow oscillations

8.6.1 Spectral analysis

Unsteady wall pressure measurements at 40 kHz have been conducted and allow us to know how the pressure fluctuations are distributed in frequency. For that purpose the Sound Pressure Level function $SPL(f)$ is introduced :

$$SPL(f) = 20 \log_{10} \left(\frac{\sqrt{G(f)}}{p_{ref}} \right), \quad (8.19)$$

where $G(f)$ is the power spectral density function of pressure fluctuations, expressed in Pa^2/Hz and p_{ref} is equal to $2 \times 10^{-5} \text{ Pa}$. Fig. 8.15 compares the SPL levels for K_2 and K_3 with the DDES computations. Both for experimental and computed results the pressure spectra are evaluated thanks to the periodogram method introduced by Welsh [207]. For DDES-A and DDES-B, the duration of the computational signal is not large enough to obtain a precise discretization in frequency, that is why the spectra obtained by an autoregressive method following the Burg algorithm [19] are also reproduced in this figure.

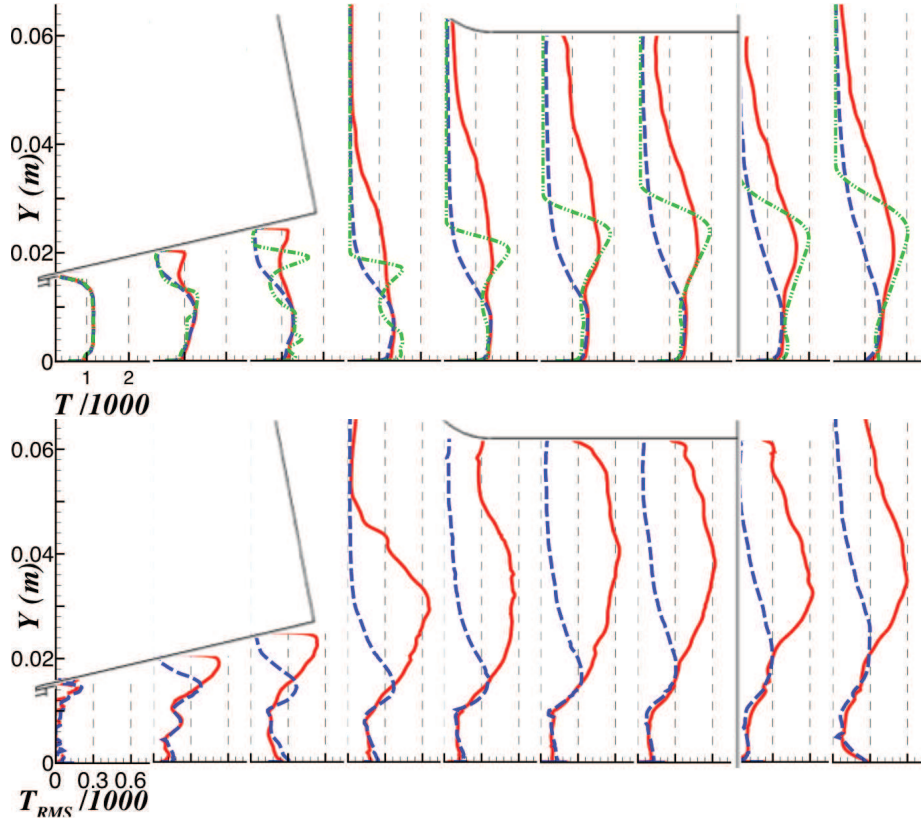


FIGURE 8.14 – Evolution of the averaged temperature (top) for RANS (green), DDES-A (red) and DDES-B (blue), and (bottom) RMS fluctuations for DDES-A and DDES-B, normalized by 1000 K

At first, one can point out that in agreement with the experimental results, the spectrum are almost identical for the two sensor K_2 and K_3 . Moreover, the experimental and computed SPL levels follow the same shape : a broadband around a peak at a frequency f_0 around 1 kHz. Note also that the SPL levels for the Kulites at low frequency are significant in particular for K_3 .

The discrepancy evidenced in Fig. 8.12 between the RMS fluctuations for DDES-A and DDES-B appears again since the SPL levels differ of almost 15 dB at the peak frequency. Note that the corresponding frequencies are 1015 Hz for the Kulites, 1150 Hz for DDES-A and 950 Hz for DDES-B. To illustrate the occurrence of this peak along the upper and lower walls, a spectral map along the mid-span plane for the upper and lower walls (Fig. 8.16) is plotted. For that purpose, 25 (upper wall) and 30 (lower wall) equally spaced numerical probes covering from $X/L_x = 0.5$ to $X/L_x = 1$ are used in this analysis. This figure points out that the same peak frequency is identified along both walls, which suggests a global movement of the whole shock structure. It is also observed that the use of frozen chemistry in the DDES-B tends to lower the peak frequency but its effect on the global flow dynamics is not of prime order, which highlights the fact that this self sustained motion of the whole separated region is purely hydrodynamic.

It is worthwhile to compare this peak frequency to the natural frequency of the shock oscillation in other SWBLI cases. According to Dussauge *et al.* [59], two types of SWBLI can be distinguished. In the first one, corresponding to the lower wall in our case, the incident shock coming from the upper wall is reflected and interacts with the incoming boundary layer, supersonic flow conditions are dominant downstream (short recirculation bubble). In the second one, corresponding to the upper wall, the strong shock interacts with the boundary leading to an important separated subsonic zone downstream. For both types of SWBLI a Strouhal number [100] can be defined as

$$St = \frac{f L_r}{U_\infty} \quad (8.20)$$

where L_r is the length of either lower or upper separations. On the upper wall according to Figs. 8.12 and 8.10, the average flow separates just before the injector lip and $L_r/L_x \approx 0.5$. On the lower wall the

separation is narrower and verifies $L_r/L_x \approx 0.16$. If we take the Strouhal numbers based on the peak frequency $f_0 \approx 1000$ Hz and the upstream velocity $U_\infty \approx 3000 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, one can obtain $St \approx 0.017$ for the upper wall and $St \approx 0.007$ for the lower wall. The first value is rather low compared to most cases scrutinized by Dussauge *et al.* where Strouhal numbers are higher than 0.03. Nevertheless, $St = 0.017$ is close to the one obtained by Bourgoing and Reijasse on a planar nozzle [15]. In this flow, a strong normal shock is created inside the nozzle and the flow separates creating a large recirculation region on the upper wall and a smaller one on the lower wall where a Strouhal number of 0.011 was evidenced. In our case, $St \approx 0.007$ is too low to match with a natural shock oscillation. However, according to Fig. 8.16 high frequencies are more present in the lower wall spectra than in the upper wall and frequencies higher than 4000 Hz, which corresponds to $St \approx 0.028$, can be related to a natural oscillatory motion of the lower SWBLI.

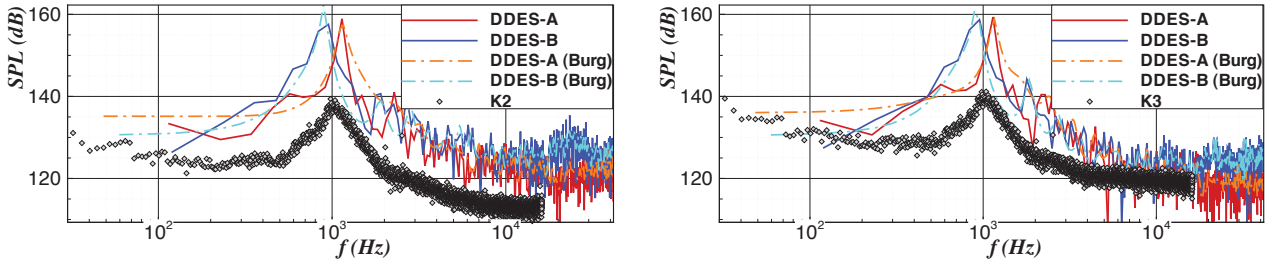


FIGURE 8.15 – Comparison between SPL obtained during the unsteady computations at two different locations along the extension for K_2 (left) and K_3 (right)

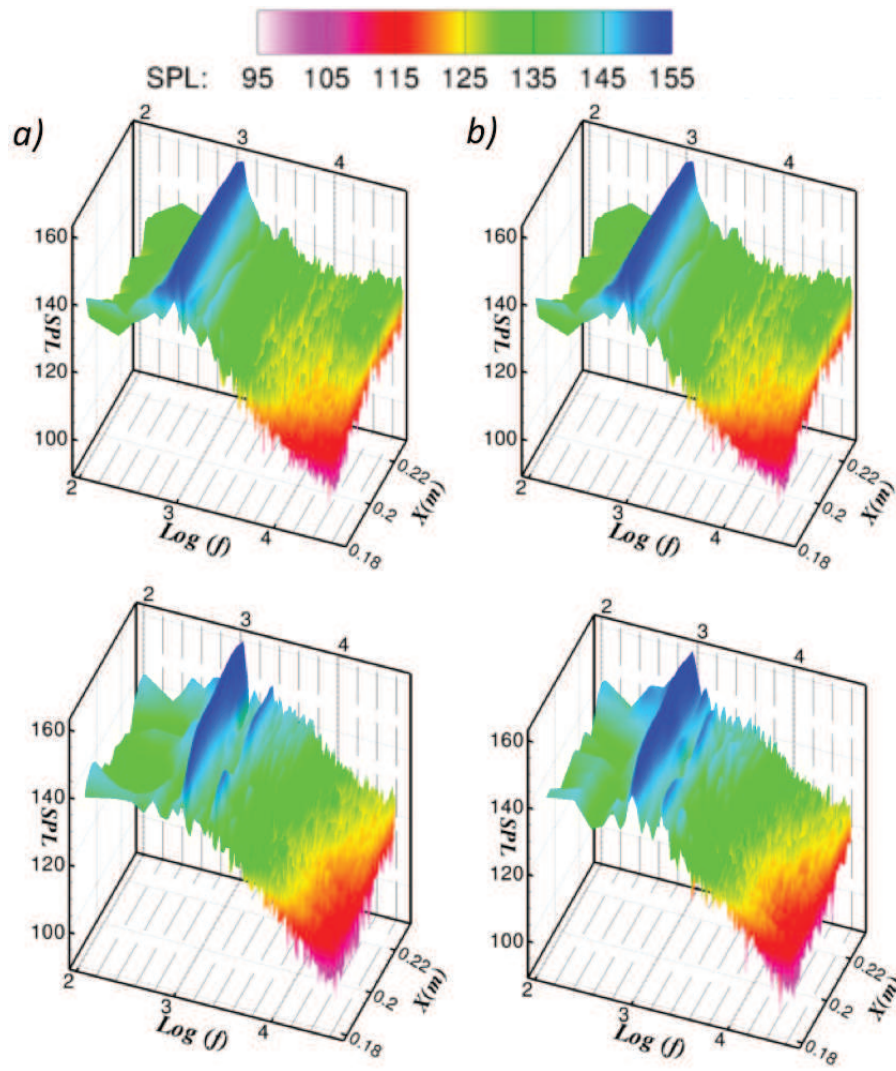


FIGURE 8.16 – Map of spectra along the upper (top) and lower walls (bottom) for a) DDES-A and b) DDES-B

8.6.2 Dynamics of the separated region

In order to characterize the oscillating phenomenon during a period Δt_0 equal to 8.7×10^{-4} s for DDES-A, *i. e.* $1/f_0$ (where f_0 is the peak frequency), schlieren snapshots are displayed in Fig. 8.17 at $t = t_0, t_0 + 1/4\Delta t_0, t_0 + 1/2\Delta t_0, t_0 + 3/4\Delta t_0$. In the left part of the figure, pseudo-schlieren visualizations ($|\nabla \rho|$) give access to the position of the shock; iso-lines of $\tilde{u} = 0$ are also plotted to evidence the boundaries of the recirculation region. In the right part of the figure, an iso-surface of the Q criterion is employed to evidence turbulent structures; the evolution of the pressure is also shown in the same figure. At $t = t_0$, the shock is located at its most downstream position; separation is very narrow. The pressure inside the nozzle is lower than the ambient pressure : an upstream motion of the whole structure is initiated. At $t = t_0 + 1/4\Delta t_0$ a large free separation with a characteristic bubble at the tip of the extension is created. The vortices generated in the mixing layer and in the lateral separations move upstream. The shock being forced backwards, a rise of pressure in the separated region occurs. At $t = t_0 + 1/2\Delta t_0$, the shock is at its most upstream position. At this point, the pressure of the core jet is higher than the outlet pressure and the separation bubble impinges the upper wall in such a way that the $\tilde{u} = 0$ velocity iso-line reaches the obstacle. At $t = t_0 + 3/4\Delta t_0$ the downstream displacement of the separated region is initiated. The turbulent structures displayed both by the pseudo-schlieren visualizations and Q criterion map seem to reach the upper wall while being convected downstream. The pressure inside the nozzle drops down.

At this stage of the analysis, it appears that the large scale pressure oscillation seems to be closely correlated to the oscillation of the whole shock structure. Moreover, coherent structures and a global convective motion in the upper separation are also highlighted. In the next subsection, a space-time analysis of the flow unsteadiness will give more information on the characteristic length scales and velocities associated to these fluctuations.

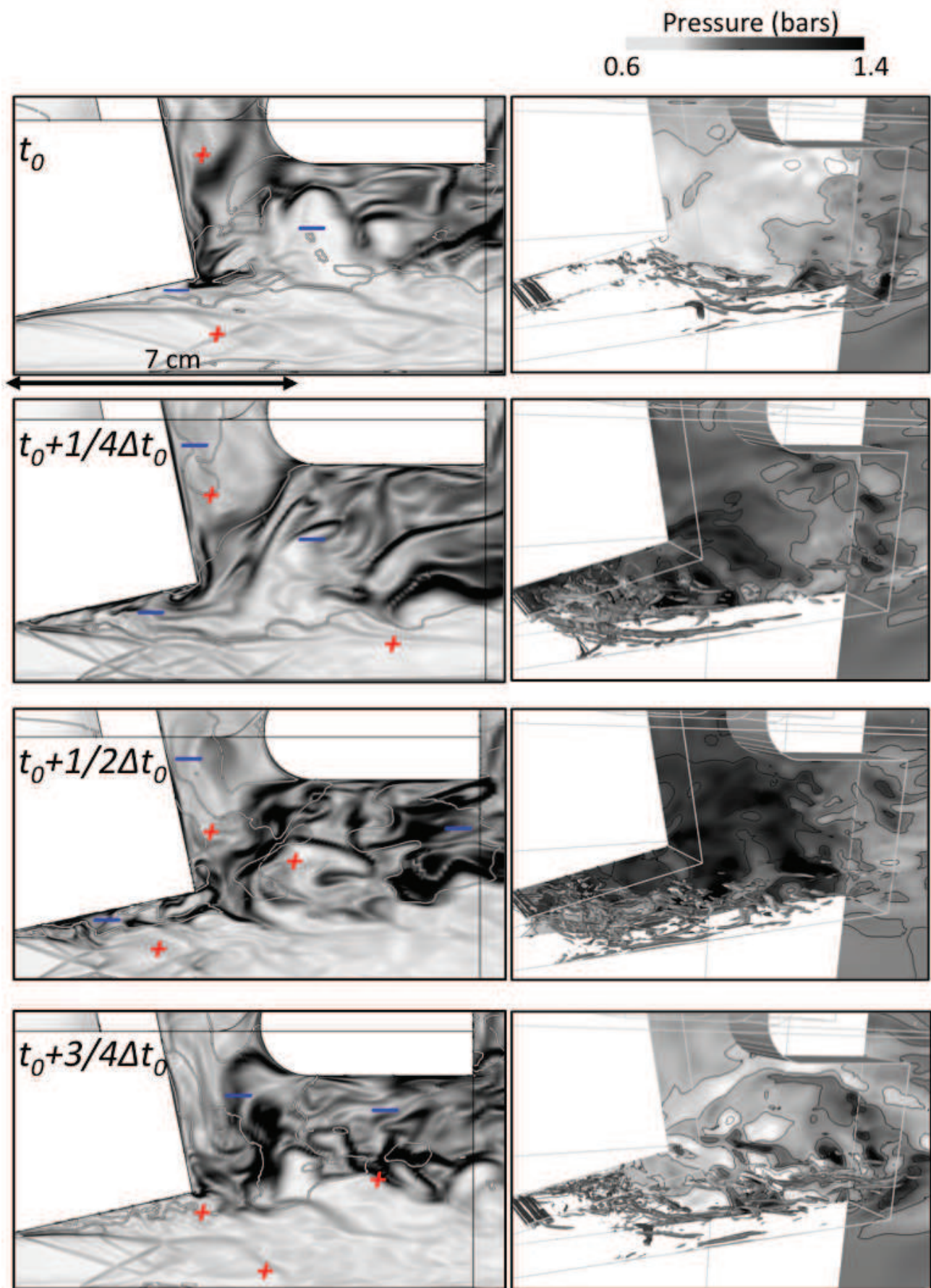


FIGURE 8.17 – Sequence of instantaneous visualizations of the flowfield during one oscillation. (left) $|\nabla\rho|$ in the mid-span section, iso-line of $\tilde{u} = 0 \text{ m.s}^{-1}$ (grey) and sign of $\tilde{u}$; (right) isosurface of $Q.(r_{exit}/U_\infty)^2 = 6$, map of pressure on the back wall

8.6.3 Analysis of the propagating disturbances

Self-sustained pressure oscillations have been observed for a wide range of spatially developping flows. To explain such self-sustained motions, Chomaz *et al.* [33] suggest two possibilities : either a hydro-acoustic resonance or a purely hydrodynamic phenomenon. In order to exhibit the characteristic length scales associated to these fluctuations, one must investigate the propagating wave components of the wall pressure signature. To evaluate the velocity of the propagating disturbances one may compute the frequency wave number spectrum ($f - k$). The same type of representation has been successfully used to understand the mechanisms involved in a separating reattaching axisymmetric flow [50] and shock oscillation over a transonic airfoil [42]. The corresponding estimator $\Psi(f, k)$ is based on the cross spectrum $S_{x_i x_j}(f)$ of space-time wall pressure signal between points x_i and x_j and is obtained by

$$\Psi(f, k) = P(k)^H M(f) P(k), \quad (8.21)$$

where H denotes the Hermitian transpose and interspectral matrices $M(f)$ and P are defined by

$$M_{ij}(f) = S_{x_i x_j}(f), \quad (8.22)$$

$$P_i(k) = e^{-\sqrt{-1} k x_i}. \quad (8.23)$$

The frequency wave-number spectrum enables us to highlight multiple convection velocities while phase data are inevitably altered by wave numbers that may not participate to the advective motion. Fig. 8.18 presents the computed frequency wave-number spectrum for points located on the upper and lower walls respectively for both DDES computations. This representation allows us to determine more accurately the upstream and downstream propagating disturbances.

On the upper wall mostly downstream convective disturbances are pointed out at positive wave numbers. One can obtain from $U_c = 2\pi/(\Delta k/\Delta f)$ propagating velocities of $650 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ and $410 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ for DDES-A and DDES-B, respectively, on the upper wall. In the case of a hydro-acoustic feedback loop the shear layer perturbations are convected at U_c and, because they impinge a solid surface located farther downstream, give rise to monochromatic acoustic radiations due to a feedback process. The period Δt_{fl} of the feedback loop is, according to Tam [194] :

$$\Delta t_{fl} = \frac{L_{fl}}{U_c} + \frac{L_{fl}}{c(1 - M)} \quad (8.24)$$

where L_{fl} is the distance between the source of the disturbances and the solid surface. If we consider that the current self-sustained motion is linked to such a mechanism then $\Delta t_{fl} = \Delta t_0$. For both computations, the quantity $c(1 - M)$ is higher than $300 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ in the detached region (the exact averaged flowfield can be found in 8.9.3), thus the value of L_{fl}/L_x is higher than 2 which exceeds the typical length scales related to this geometry. Consequently, the occurrence of a self-sustained hydro-acoustic feedback is hardly plausible. On the lower wall, upstream and downstream propagating velocities of about the same magnitude are observed. This characterizes a periodic movement of the shock structure. For DDES-A, one obtains $U_c^+ = 145 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ in the downstream direction and $U_c^- = 225 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ in the upstream direction ; for DDES-B $115 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ and $155 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ are similarly observed. Note that the main pressure disturbance observed by the sensors located on the lower wall during a period of oscillation is the pressure jump due to the travelling of the reflected shock. Consequently, if we make the hypothesis that U_c^+ and U_c^- correspond to the velocity of the foot shock in the downstream and upstream directions respectively and that the reflected shock oscillates over a length L_s , the time Δt_0 taken by the shock to undergo one oscillation is expressed as :

$$\Delta t_0 = \frac{L_s}{U_c^+} + \frac{L_s}{U_c^-} \quad (8.25)$$

L_s/L_x is equal to 0.62 for DDES-A and 0.56 for DDES-B. These values of L_s/L_x approximately scales with the values deduced from observation of Fig 8.17. Hence, the peak frequency obtained on the lower wall is therefore linked to the shock oscillation. However, this observation does not explain the origin of the mechanism.

According to Chomaz *et al.* [33] and since the eventuality of a hydro-acoustic feedback resonance can be rejected, this mechanism can arise from a local absolute instability (see Huerre and Monkewitz [90] for a detailed description of the local and global instability concepts) which will not be scrutinized in this paper. Let us notice that other calculations not described in this paper have shown that the peak frequency and the shock motion do not appear when the external obstacle is not present. In other words, the peak frequency around 1 kHz seems peculiar to the treated geometry.

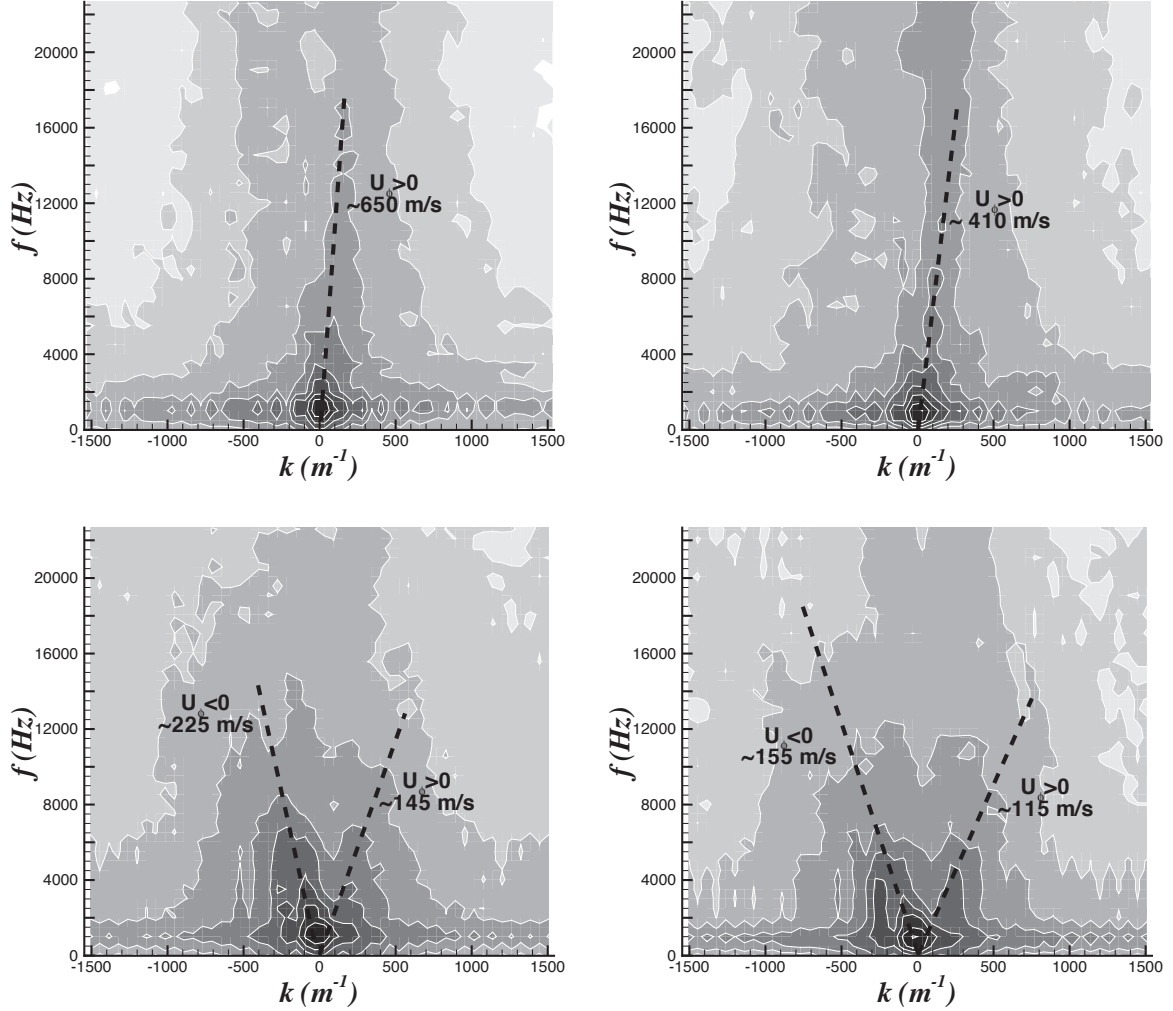


FIGURE 8.18 – (Top) frequency wave map for the upper wall for DDES-A (left) and DDES-B (right); (bottom) lower wall

8.7 Analysis of the unsteady reacting region

8.7.1 Comparison with flowfield visualizations

Instantaneous PLIF-OH images are compared to snapshots of OH mass fraction obtained by DDES-A. The frames are displayed in Fig. 8.19 in the order corresponding to a sequence of computed oscillation, one computed oscillation. In the PLIF visualizations the OH radicals are produced mostly far from the wall whereas in DDES-A a significant reacting region is initiated at the tip of the extension. Nevertheless, the angle between the upper wall and the reacting region is well reproduced and the shapes of the flame are also in good agreement. Furthermore, it is interesting to note that both numerical results and experimental visualizations display a strong wrinkling of the flame and the occurrence of combustion pockets in particular at the tip.

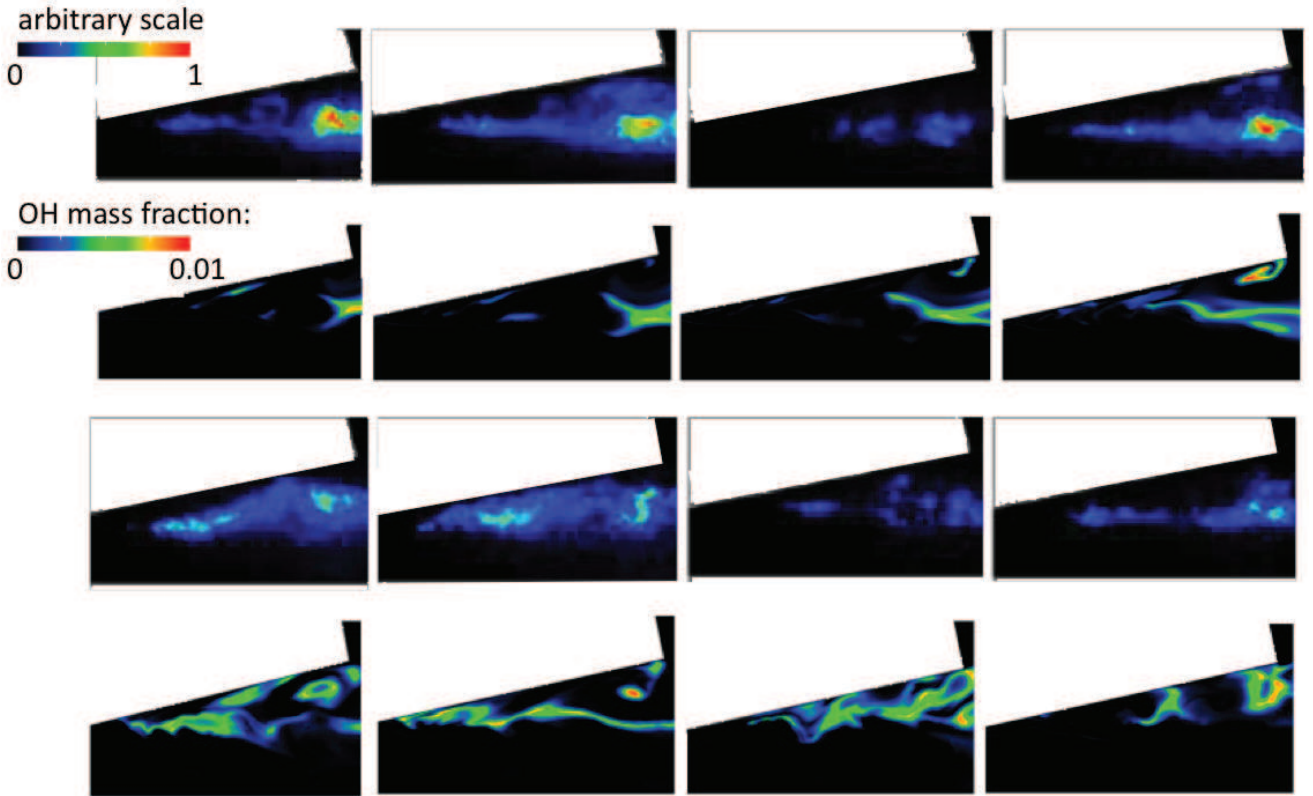


FIGURE 8.19 – Instantaneous maps of OH mass fractions obtained by DDES-A computations compared to PLIF-OH measurements; the snapshots are ordered so as to illustrate a time sequence of the DDES-A computation; at each value of time a pair of maps is given, the experimental one being above the calculated one.

8.7.2 Discussion on the combustion regime

In such a configuration where the flame is very unsteady and is associated with a hydrodynamic self-sustained motion it is interesting to determine the nature of the combustion regime. Fig. 8.20 shows a sequence of heat release iso-line colored by the premixedness index. This sequence covers one cycle of oscillation. From this figure, several remarks arise : In agreement with the result shown in Fig. 8.7, it appears that combustion is mostly in the diffusion regime. In particular, close to the separation point we can observe that combustion is totally in diffusion regime. Downstream of the separation and particularly during the upstream and downstream motion of the separation, a premixed region is noticed.

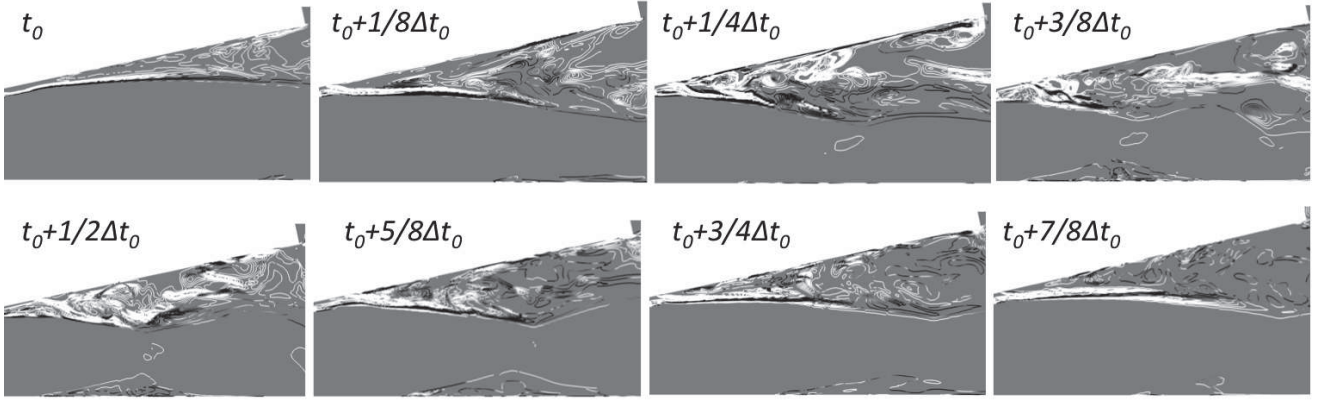


FIGURE 8.20 – *Instantaneous flowfields of temperature in the midspan section; isolines of $1 \times 10^8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} < \omega_T < 1 \times 10^{10} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ colored by premixedness index (black : premixed, white : diffusion)*

8.7.3 Dynamics of the reacting region

In this paragraph, the link between the unsteadiness of the flame and the dynamics of the shock structure addressed in section 8.6 is scrutinized. In that sense, for the DDES-A computation, the OH mass fraction flowfield integrated in the spanwise direction is displayed during one cycle in Fig. 8.21. At $t = t_0$, when the shock structure is in its downstream position, barely no OH is produced inside the nozzle. When the shock structure moves upstream, the flame enters the extension at $t = t_0 + 1/8\Delta t_0$. Then, at $t = t_0 + 1/4\Delta t_0$, a flame appears at the tip of the extension and the flame moves upstream until $t = t_0 + 3/8\Delta t_0$. The existence of turbulent structures and a strong mixing along the lateral walls enable the flame to develop towards the lower wall through the lateral separations at $t = t_0 + 1/2\Delta t_0$. Then the flame moves downstream and is progressively blown outside the nozzle; it progressively quenches along the upper wall (from $t = t_0 + 5/8\Delta t_0$ to $t = t_0 + 7/8\Delta t_0$). From this sequence we deduce that the occurrence of combustion inside the nozzle is closely linked to the pressure evolution driving the self-sustained motion displayed in Fig. 8.17.

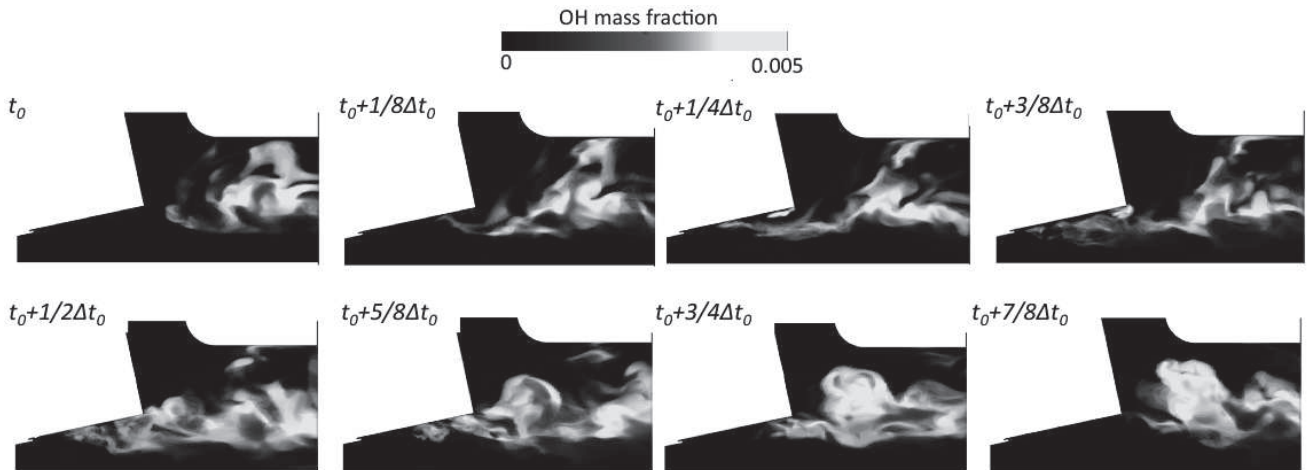


FIGURE 8.21 – *Instantaneous OH mass fraction integrated in the spanwise direction during one oscillation*

During the experiments, simultaneous pressure measurements and OH chemiluminescence visualizations were realized. Fig. 8.22 displays the intensity measured by the CCD sensor in the region close to K_2 . The corresponding evolution of measured pressure is drawn for a physical time of 0.6 ms and compared to the equivalent computed quantities with the same sampling. This figure points out that that the joint

evolution between the pressure and the flame dynamics is also reproduced by the computations. Indeed, it appears for both cases that the the pressure oscillations and the equivalent intensities are in phase.

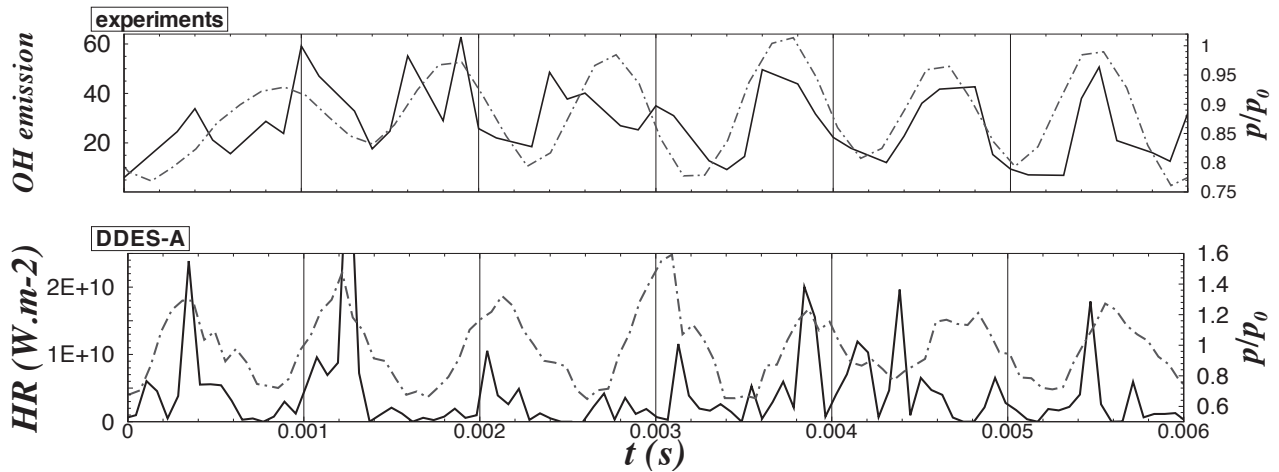


FIGURE 8.22 – (top) Simultaneous evolution of the intensity received by the high speed camera in the region near Kulite 3 (solid lines), and pressure measured by Kulite 3 (dashed lines) during the experiments during 6 ms at 8 kHz, (bottom) heat release (solid lines) and pressure (dashed lines) sampled at the same frequency during the same time period

8.8 Conclusions

Numerical simulations of the hot gas flow in a planar overexpanded nozzle are presented and discussed. A steady RANS approach using the SST model is compared to unsteady DDES; for the DDES approach, the influence of combustion is scrutinized. Several conclusions arise from this study :

- The steady RANS approach clearly demonstrates its limitations to reproduce the accurate averaged flowfield. Indeed, in reality the shock structure along with the reacting region inside the nozzle are very unsteady. As a consequence, while the RANS computation exhibits a clear diffusion flame, the averaged DDES results into a reacting region pattern which matches better with the *OH* experimental visualizations. This result has a direct impact on the averaged aerothermochemical flowfields. Especially, while the rise of temperature downstream of the separation is limited to the flame region in RANS, the unsteady dynamics of the flame during the DDES computation results in a wider region of high temperature. Moreover, while the averaged streamlines exhibit a massive 2D separation (FSS pattern), the averaged separated region in DDES is more 3D.
- At the wall, the averaged pressure profiles are in good agreement with the measurements for the three computations. Nevertheless, the pressure fluctuations are overestimated for the unsteady computations. This result can be explained by either an insufficient spatial discretization of the mesh implying exceedingly coherent turbulent structures, or by an underestimation of the damping effect of combustion due to an inaccurate modelling of the interaction between chemistry and turbulence.
- The temporal distributions of pressure fluctuations for the DDES computations and unsteady visualizations of the flowfield highlight a global movement of the whole shock structure occurring at a frequency of around 1 kHz. This frequency is in agreement with the experiments even though the levels are overestimated. Moreover, the influence of combustion on this specific phenomena appears to be of second order since it has a weak influence on the averaged shock structure and on the flow dynamics. Consequently, the origin of this oscillatory motion is purely hydrodynamic.
- A space-time characterization of the pressure fluctuations enables a deeper analysis of the mechanism responsible for this self-sustained oscillation. For both DDES computations, the pressure disturbances propagate at different subsonic speeds. The convective velocities obtained at the lower wall are coherent with the shock upstream and downstream motions during a pressure oscillation. The contingency of a hydro-acoustic feedback loop between the foot of the upper separation and one element of the geometry is found not to be in adequacy with the frequency of 1 kHz. The occurrence of an absolute instability in the separated region will be studied in future work.
- The computed unsteady reacting region is in good agreement with instantaneous PLIF measurements and illustrate the complexity of the flame shape. Furthermore, it is demonstrated that the combustion regime is mostly diffusion even though premixed regions can occur downstream of the mixing layer.

Future work is still required on an experimental and numerical point of view. A future test campaign on the same geometry is planned to get a better characterization of the thermal conditions at the wall and higher mixture ratios between H_2 and O_2 in the combustion chamber. In such conditions, the effect of combustion is expected to be of greater importance. Hence, the combustion modelling will have to be furthermore discussed, in particular the use of a Dynamic Thickened Flame Approach [34, 111] will have to be considered. This method has indeed provided satisfying results for LES computations of non premixed combustion [162, 103] and its use has been validated in DDES for a premixed flame [171]. Finally, it will be of prime interest to examine such flows for axisymmetric nozzles in order to get closer to reality and to assess of the effect of combustion on side loads.

8.9 Additional considerations

8.9.1 Experimental mock-up

An overall view of the MASCOTTE bench during the ATAC experimental campaign is provided in Fig. 8.23. In particular, one can observe the cryogenic state of the injector line. In Fig. 8.24, a splitted view of the nozzle is provided. One can point out that the cooling circuit is complex and lacks of diagnostics. As a consequence, we preferred to simplify the boundary conditions by imposing iso-thermal walls everywhere in the nozzle. The next campaign will be conducted with a redefined nozzle which includes a better monitoring of the wall conditions that will be taken into account in future computations.

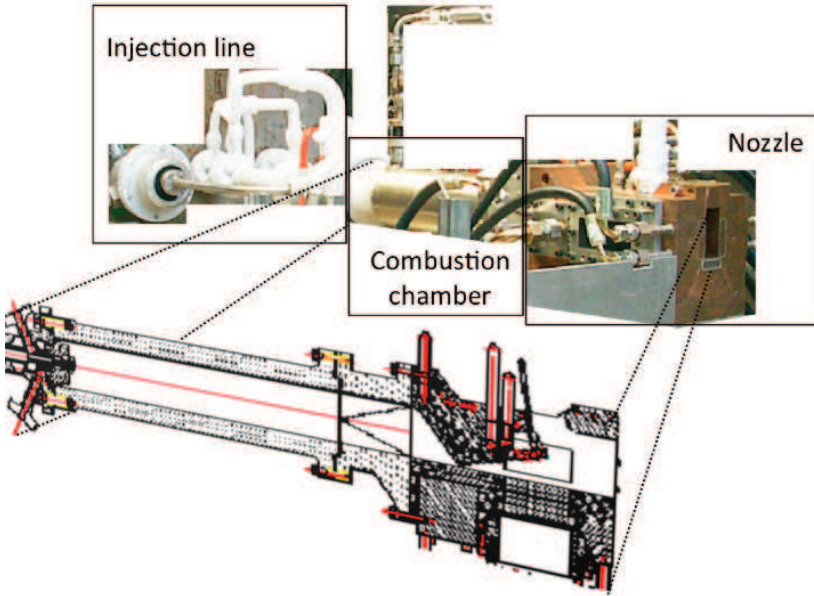


FIGURE 8.23 – Global view of the experimental set - up from injection to nozzle

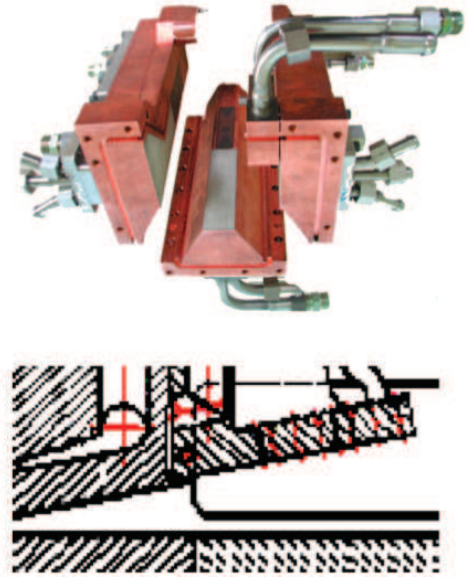


FIGURE 8.24 – Picture of the splitted nozzle and cooling circuit

8.9.2 Numerical tools

Validation of the DDES approach

To illustrate the capability of the DDES approach addressed in this work it is worthwhile to plot the regions where either RANS or LES are used. In Fig. 8.25 it appears that the attached regions of the flow are yielded to RANS while LES is enabled in the detached regions and the center of the flow, as expected. Another illustration of the effect of the DDES model concerns the flowfield of ν_t . The modelled kinematic turbulent viscosity ν_t is very low in the separated region unlike the upstream region. Downstream of the bench exit ν_t is very high since the mesh becomes coarser, and the RANS approach is taking place.

Discussion on the time integration

Averaged acoustic and convective CFL number flowfields are drawn for DDES-A in Fig. 8.26. The regions where CFL numbers are high are mostly located in the supersonic region due to high convective velocity. In this region CFL_a can be higher than 10. Such levels should not affect the time integration since they are located upstream of the shock. Note also that in the separated region $CFL_a < 3$ and $CFL_c < 0.5$.

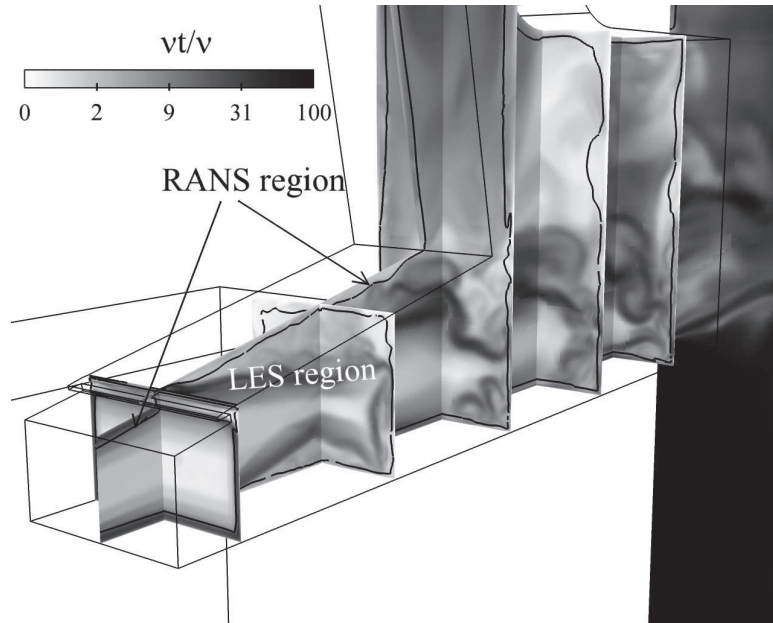


FIGURE 8.25 – *Instantaneous flowfields of ν_t/ν with an emphasis on the regions where RANS or LES are activated, black iso-line : $F_1 = 0.1$*

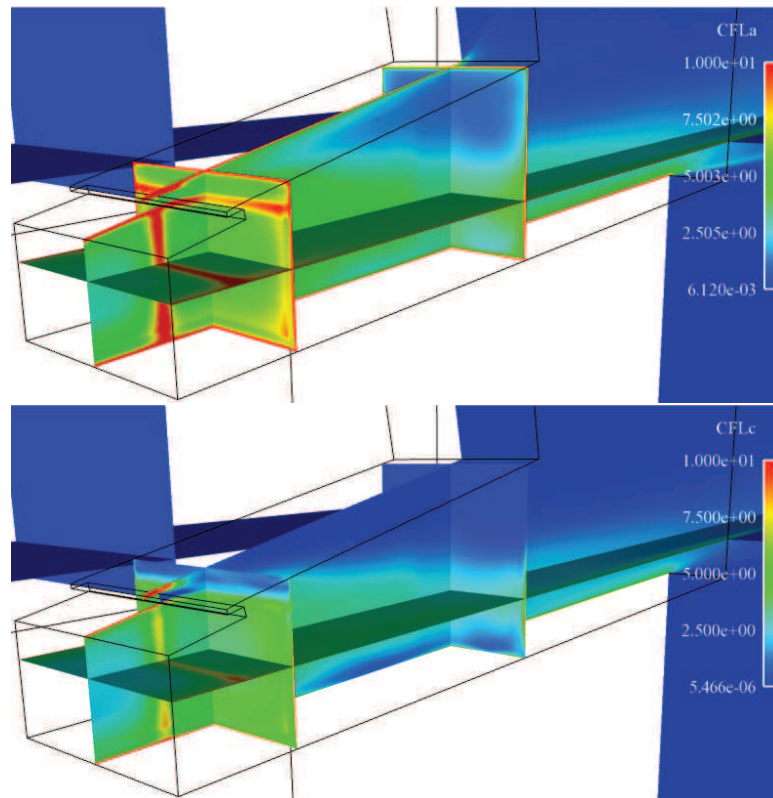


FIGURE 8.26 – *Averaged flowfield of CFL numbers for DDES-A*

The implicit time integration method has also been tested by increasing from 2 to 5 the number of sub-iteration of the Gear scheme. The pressure signals obtained at a sensor located inside the nozzle for both computations are drawn in Fig. 8.27. This figure highlights the fact that the time-integration has a weak influence on the amplitude of the fluctuations, this information tends to confirm that the space discretization is most likely to be responsible for this overestimation.

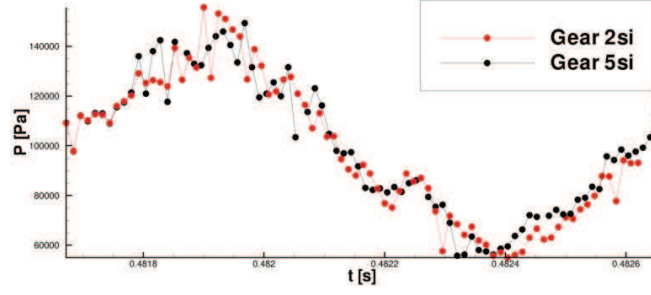


FIGURE 8.27 – Comparison between the signal obtained for DDES-A computation with 2 or 5 sub-iterations of the Gear scheme

Comparison between chemical and turbulent time scale

The ignition delay for a $H_2 - Air$ mixture at stoichiometry and atmospheric pressure was computed in paragraph 8.3.2. This study evidenced ignition delays of the order of $1. \times 10^{-5}$ s for temperatures around 1000 K. A flowfield of the modelled turbulent time τ_t equal to $1/\beta^*\omega$ for the RANS computation is drawn in Fig. 8.28. It can be noticed that τ_t does not exceed $5. \times 10^{-5}$ s in the separated region. As a consequence, the discrepancy between the computed and reference ignition delays should not affect the quality of the computation.

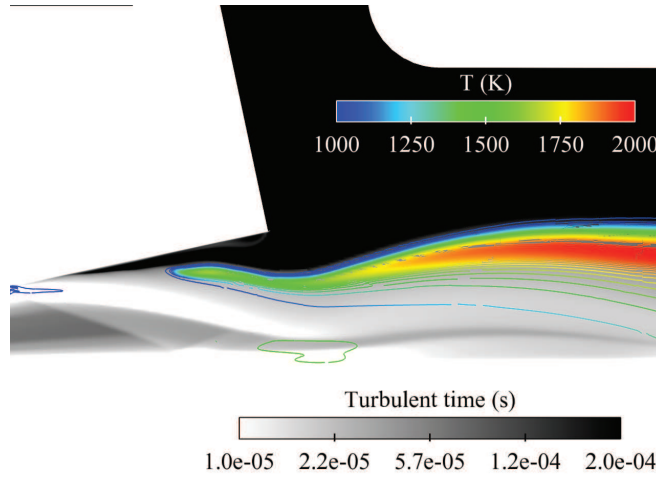


FIGURE 8.28 – Flowfield of turbulent time, Y_{OH} isolines colored by temperature

8.9.3 Additional averaged quantities in the flow field

Flame outside of the bench

During the experiments, the region outside of the bench where the diffusion flame is developing is recorded with an ordinary camera. The H_2O which is produced in the reacting region radiates and gives an orange color to the flame as displayed in the upper part of Fig. 8.29. Under this frame, the same image is reproduced with enhanced contrast to allow a better visualization of the flame region. In the lower part of the figure, the computed averaged flames for DDES-A and RANS computations are visualized thanks to a temperature isosurface at 1500 K. The steady flame obtained by RANS is deviated down vertically compared to the averaged DDES-A. Moreover, the flame is longer in RANS than in DDES-A, this is due to higher streamwise velocities in RANS (refer to Fig. 8.11). It is also worthwhile to notice

that the excursion of the flame during the computation is qualitatively in agreement with the camera picture.

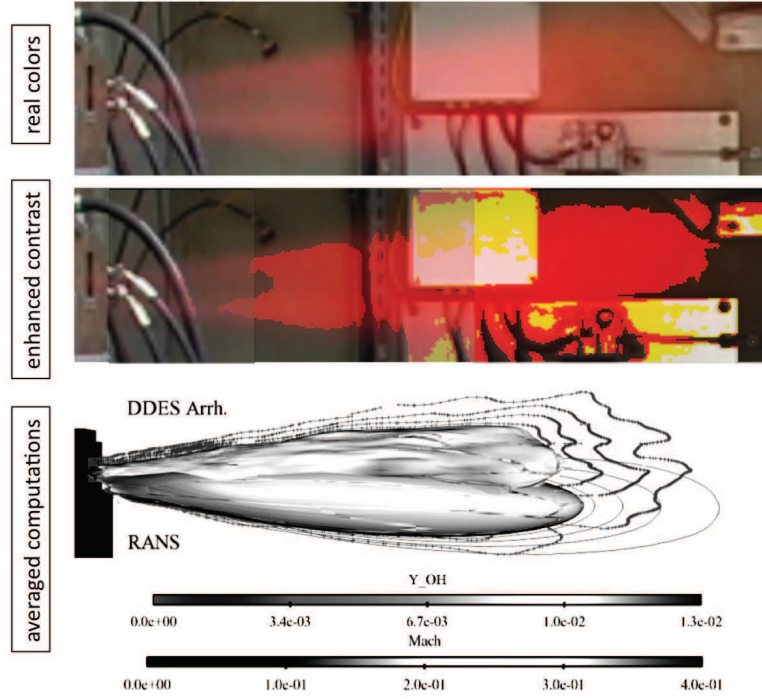


FIGURE 8.29 – Flame downstream of the bench's exit materialized by a temperature isosurface of $T = 1500$ K for DDES-A and RANS (colored by Mach), OH mass fraction isolines are displayed in the mid-span (DDES-A : +, RANS : -)

Averaged acoustic velocities

In subsection 8.6.3, the occurrence of a self-sustained hydro-acoustic feedback loop was scrutinized. To evaluate the frequency of this mechanism the value of $c(1 - M)$ in the subsonic region. This quantity is displayed in Fig. 8.30. It appears that $c(1 - M)$ is mostly higher than $300 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ in DDES-A.

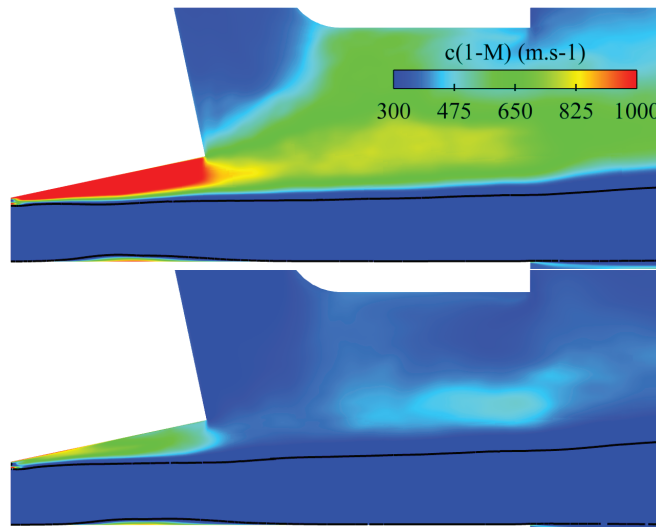


FIGURE 8.30 – Flowfield of $c(1 - M)$, $M = 1$ iso-line, for DDES-A (top) and DDES-B (bottom)

8.9.4 Wall transfers

Skin friction on the upper and lower walls

In Fig. 8.31 the averaged skin friction for the two opposite vertical walls of the nozzle are displayed for all the computations. The DDES-A and DDES-B computations give very close results which is in agreement with the weak influence of combustion on the flow aerodynamics. The stronger separation obtained in the RANS computation is also confirmed according to the low values of the skin friction educing of a massive separation. In particular, the friction distribution on the upper wall for RANS tends to prove that the separation is 3D. The strong oscillation of the flow during the DDES computations is evidenced since the skin friction begins dropping earlier than in the RANS computation on the lower wall. Downstream of the separation location, one can distinguish two zones where the value of the skin friction is very low. This feature is the signature of two streamwise vortices which are produced on the lower wall, the size of these structures being wider in DDES than in RANS which is similar to the observation made on Fig. 8.10. One can also make a qualitative comparison with the state of the surface obtained after the experimental campaign. It is interesting to point out the occurrence of two stains similarly to the computed skin friction distribution.

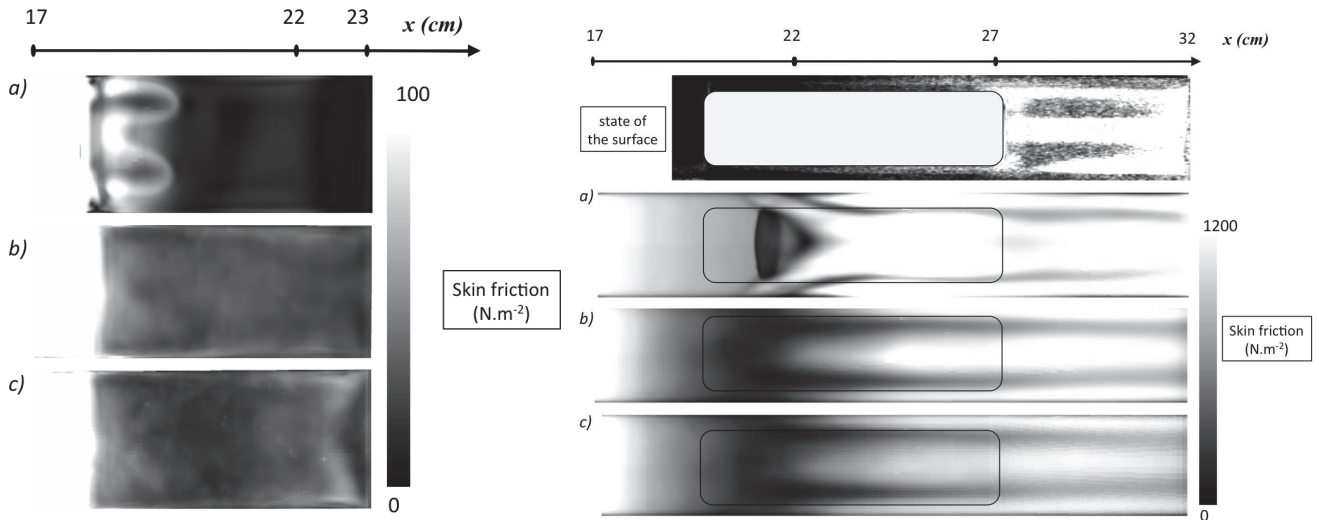


FIGURE 8.31 – Evolution of the averaged skin friction on the upper (left) and lower (right) walls, a qualitative state of the surface (a) : RANS ; b) : DDES-A ; c) : DDES-B

Heat fluxes on the upper and lower walls

In Fig. 8.32 the same representation is employed for the averaged heat fluxes. Note that a positive value of the heat flux signifies that the wall heats the flow while a negative value indicates that the wall as a cooling effect. Consequently it can be noticed that the only the two reacting computations give negative values of the heat flux on the upper wall. In particular, the DDES-A computation give negative values of the heat flux all along the wall which illustrates that the temperature in this flow region is very high compared to the wall temperature (see 8.14 for a similar observation). On the lower wall, DDES-A and DDES-B computations are similar, for the RANS computation the strong separation is accompanied by a raise of temperature, forcing the heat fluxes to be very high (in absolute value).

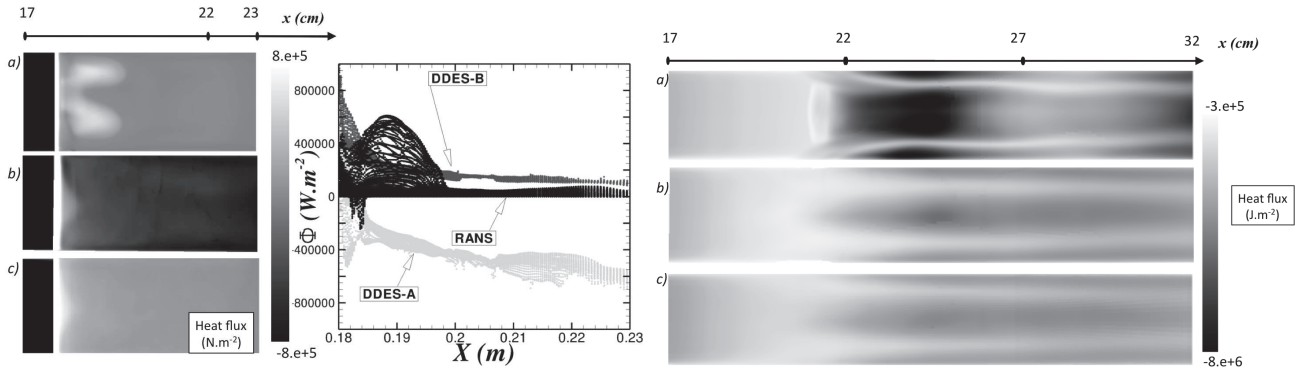


FIGURE 8.32 – Evolution of the averaged heat flux on the upper (left) and lower (right) walls, (center) scatterplot representation of the upper wall heat fluxes distribution in the streamwise direction (a) : RANS; b) : DDES-A; c) : DDES-B)

Heat fluxes and skin friction on the lateral walls

In Fig. 8.33 the heat fluxes and skin frictions are drawn for the lateral walls. The main remark that rises from this figure is that for DDES-A computation the walls have a cooling effect, consequently the use of adiabatic conditions at the lateral walls would have to higher temperature and a possible larger reacting region close to the lateral walls.

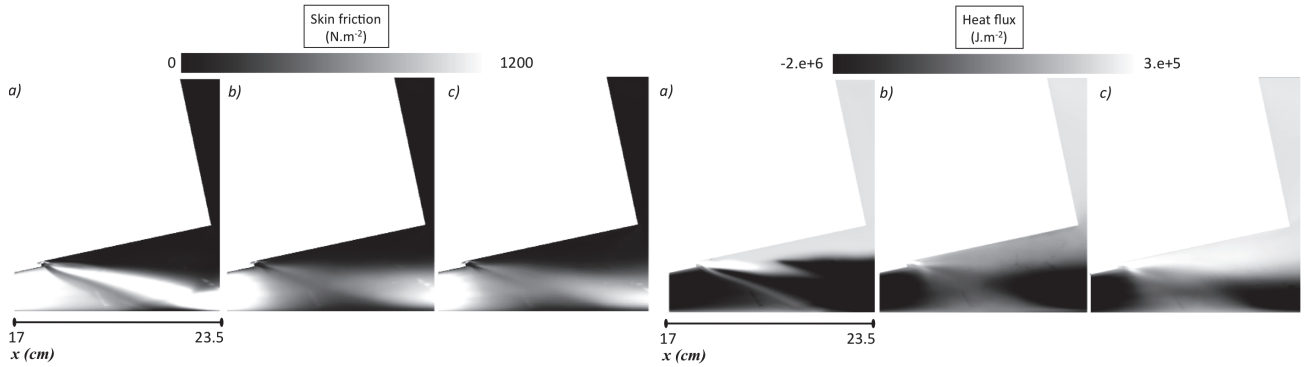


FIGURE 8.33 – (left) Averaged skin friction and (right) heat fluxes on the lateral walls (a) : RANS; b) : DDES-A; c) : DDES-B)

8.9.5 Additionnal signal processing

Phase averaged wall pressure distribution

It was established that the flow is characterized by a global movement of the shock pattern. In order to have a better understanding of this oscillatory motion, phase averages of the wall pressure are scrutinized. One can define the phase average $\hat{A}(\phi)$ of a discrete variable $A(t_0 + n.\Delta t)$ at a given frequency f over a sampling time $N/f = NT$, assuming that $\Delta t = T/n_\phi$,

$$\hat{A}\left(\phi = i\frac{360}{n_\phi}\right)_{i=0,(n_\phi-1)} = \frac{\sum_{j=0,(N-1)} A(t_0 + (i + j.n_\phi)\Delta t)}{N} \quad (8.26)$$

with ϕ is expressed in deg. In the same way, one can define RMS fluctuations $\hat{A}_{RMS}(\phi)$ as $\sqrt{\hat{A}^2(\phi) - \hat{A}(\phi)^2}$. Imposing $\phi = 0$ for the lowest pressure level on the walls, phase averaged pressures $\hat{p}(\Phi)$ and RMS fluctuations $p_{RMS}(\Phi)$ are displayed for $\Phi = 0, 45, 90, 135, 180, 225, 270, 315$ in figures 8.34 and 8.35. Fig. 8.34 confirms the occurrence of a global motion since the pressure in the whole domain follows one cycle of oscillation. Moreover, both computations give an equivalent result for the averaged pressure and is in agreement with previous remarks concerning the similarity between DDES-A and DDES-B. Fig. 8.35 gives information on the intensity of the pressure fluctuations linked to turbulent structures during one oscillation. At first, it is observed that the value of the fluctuations are more important for the DDES-B case, which is in agreement with previous analysis on the averaged RMS values (see Fig. ??). At $\Phi = 0$, the fluctuations have the lowest level. When the shock structure initiates its backward motion, a region of high fluctuations is remaining along an oblique line of the lengthwise plane : it corresponds to the mixing layer created between the main flow and the recirculating region but also to the lateral separation.

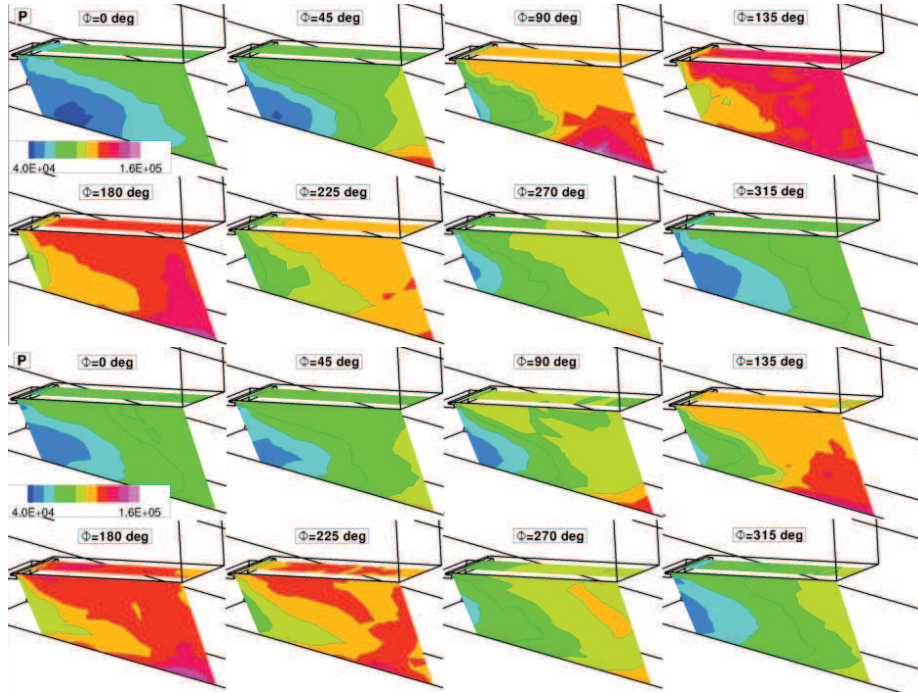


FIGURE 8.34 – Phase averaged wall pressure for DDES-A (top) and DDES-B (bottom)

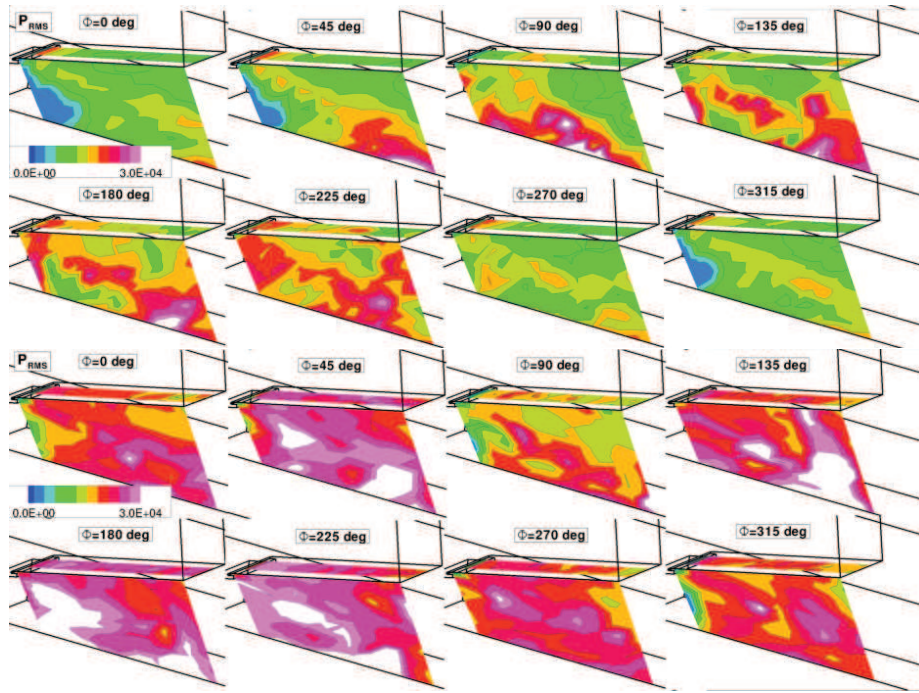


FIGURE 8.35 – Phase averaged RMS fluctuations for DDES-A (top) and DDES-B (bottom)

Phase average evolution of NPR and pressure profiles

A supplementary analysis can be made on the phase averages. In particular, it is worthwhile to follow the evolution of the NPR with the phase in Fig. 8.36, moreover, the phase averaged wall pressure profiles are also drawn in the same figure. It appears that the NPR decreases faster than increasing. This remark is in agreement with the analysis provided in paragraph 8.6.3 which concluded that the decrease of the pressure is produced by a propagating disturbance going faster downstream than the one responsible of the pressure increase (in the upstream direction). The pressure profiles obtained at different phases, are similar except for some profiles (circles on the figure) where the pressure reaches levels higher than the outlet pressure by more than 10%. This feature denotes of a RSS pattern at that particular phase.

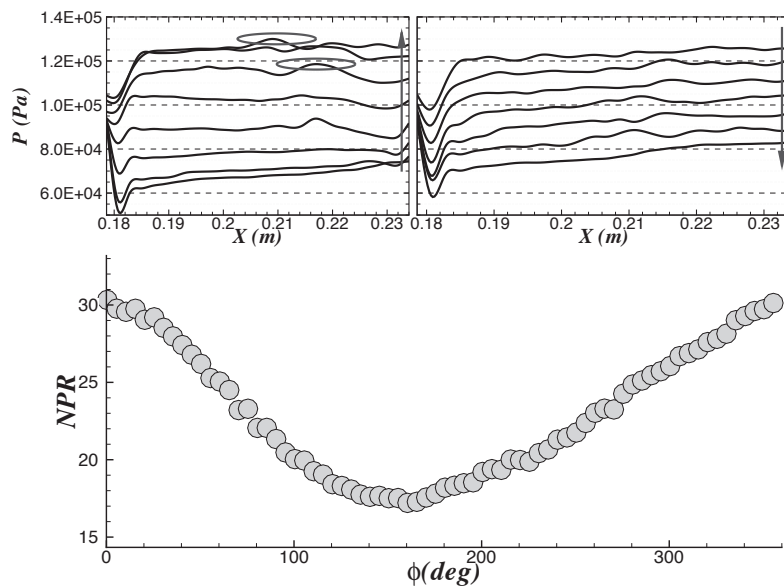


FIGURE 8.36 – Phase averaged evolution of the streamwise pressure profiles (top) and of the nozzle pressure ratio (bottom) for the DDES-A computation

Spectra in the separated region

The pressure and vertical velocity signals were recorded for sensors located in the separated region. Therefore, in Fig. 8.37 maps of both pressure (SPL) and premultiplied vertical velocity spectra fG_v are drawn for DDES-A. The occurrence of the peak frequency is pointed out for both maps. It appears that the closer we are from the nozzle exit, the higher the frequencies contributing to the fluctuations.

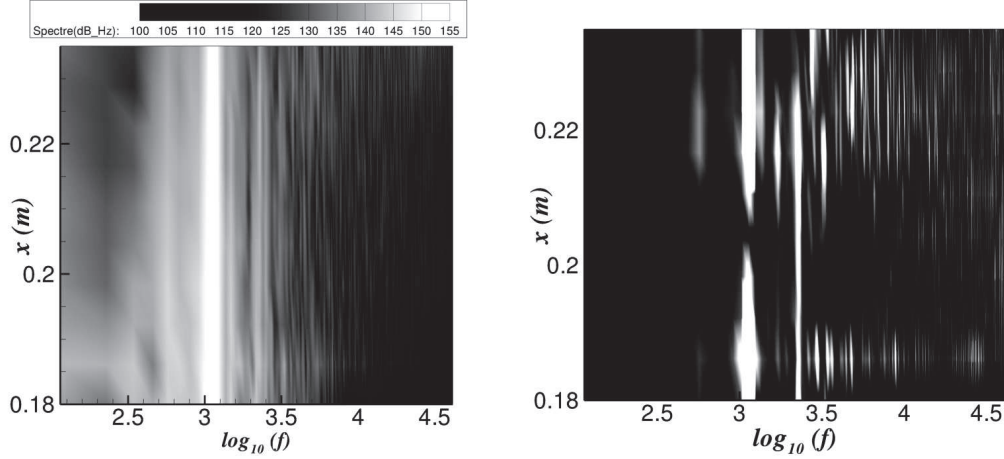


FIGURE 8.37 – Map of SPL spectrum in the separated region and premultiplied vertical velocity spectrum $f.G_v$ for DDES-A

Pressure spectra outside the bench

To confirm that the downstream obstacle is involved in the occurrence of a self-sustained motion, four different pressure spectra are drawn in the streamwise direction. The first sensor is located at the nozzle exit near the obstacle (at $X = 0.321$ m) the three other sensors being located respectively at $X = 0.421$ m, 0.521 m, 0.621 m. On this figure it clearly appears that the peak frequency at approximately 1 kHz vanishes downstream of the obstacle.

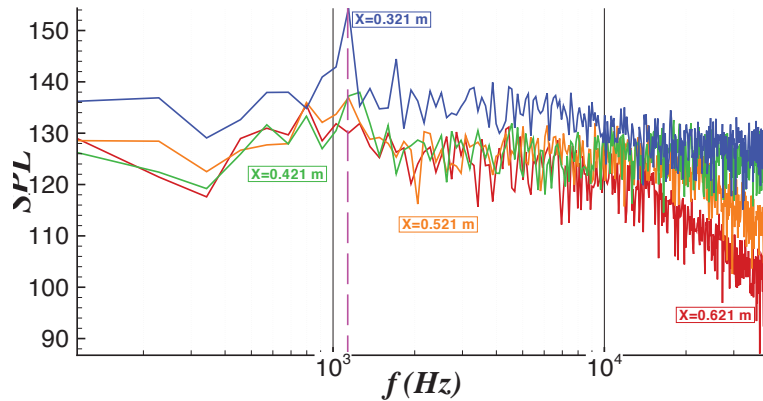


FIGURE 8.38 – Several SPL spectra outside of the bench at positions specified on the figure

Conclusions et perspectives

L'objectif de ces travaux était de mettre au point une approche hybride RANS/LES permettant de réaliser des simulations numériques instationnaires d'écoulements décollés en milieu réactif avec le code industriel CEDRE de l'Onera. On s'est alors tourné vers la DDES, approche éprouvée en aérodynamique [190, 188], permettant de basculer continûment d'une approche RANS près des parois – où les transferts pariétaux sont entièrement modélisés –, à une approche LES dans les zones décollées (si la résolution du maillage est suffisante). Cette méthode permet ainsi – à moindre frais – de combiner une bonne estimation des échanges convectifs (frottement) et diffusifs (chaleur) au niveau de la paroi à une résolution instationnaire des échelles turbulentes de l'écoulement dans les zones décollées.

Après son implantation dans le code CEDRE, cette méthode a été validée pour des écoulements inertes et réactifs en aval d'une marche descendante puis appliquée au cas de l'écoulement réactif dans la tuyère surdétendue ATAC du banc MASCOTTE. Les apports ainsi que les limites mises en évidence au cours de l'étude sont d'abord analysés puis les perspectives ouvertes par ce travail sont finalement dressées.

Apports de la méthode

Simulation numérique de l'écoulement décollé en aval d'une marche descendante

Ce cas de marche descendante, décrit au chapitre 5, présente l'avantage d'avoir été l'objet de nombreux diagnostics en inerte et en réactif (méthane-air prémélangé pauvre). En outre, la simplicité géométrique de ce cas permet de vérifier précisément si la protection de la couche limite fonctionne correctement. Dans un souci de validation, les trois familles de méthode (RANS, LES et DDES) sont comparées pour les deux types d'écoulement [171].

Pour le cas inerte, traité au chapitre 6, on peut constater que l'approche DDES apporte une amélioration significative par rapport aux deux autres méthodes. D'une part, et contrairement à l'approche RANS, elle permet d'obtenir une bonne longueur de recirculation. D'autre part, elle permet d'éviter un décollement non physique au niveau de la paroi haute, que l'on obtient en LES sans traitement spécifique (similaire aux résultats de Courtois avec le code AVBP [36]). Ce décollement, dû à une sous-évaluation du frottement, illustre une mauvaise résolution de la turbulence pariétale en LES sur ce type de maillages [166]. L'importance de la définition de la fonction de protection de la couche limite est également mise en évidence par comparaison de résultats obtenus avec les fonctions $f_{d_{Spalart}}$ et $1 - F_1$. Pour l'écoulement considéré, parmi les deux possibilités évoquées par Spalart [188] qui consistent à favoriser soit le mode RANS, soit le mode LES dans la calibration des approches DES, il est préférable dans notre cas de favoriser la première pour obtenir des résultats de bonne qualité (c'est à dire $f_{DDES} = 1 - F_1$).

En réactif, abordé au chapitre 7, on peut constater que les approches LES et DDES donnent des résultats similaires. En particulier, les positions moyennes et fluctuantes de la flamme sont en bon accord avec les mesures. Par ailleurs, il apparaît de façon évidente que l'approche RANS donne des résultats de moins bonne qualité, la recirculation étant à nouveau très mal évaluée. La différence entre les approches LES et DDES est très faible à la fois pour les champs moyens et fluctuants mais également au niveau des distributions statistiques et spectrales.

Simulation numérique de l'écoulement surdétendu dans une tuyère plane en milieu réactif

Cette deuxième configuration, analysée au chapitre 8 constitue une application naturelle de la DDES en milieu réactif. En effet, le régime de surdétente considéré est caractérisé par l'interaction entre une onde de choc incidente et la couche limite amont (traitée en RANS) à l'origine d'un décollement instationnaire (traité en LES). Les résultats obtenus en DDES sur cette configuration sont comparés aux résultats obtenus en RANS et aux mesures disponibles [133].

L'utilisation de la DDES sur ce cas modifie drastiquement la structure de l'écoulement moyen par rapport à une simulation RANS. En particulier, la forme de la zone réactive moyenne est en meilleur accord avec les mesures d'émission spontanée de OH matérialisant ces zones. On montre alors que l'écoulement est piloté par un mouvement auto-entretenu de la structure de chocs. Les fluctuations de pression résultantes étant très intenses, l'amplitude de l'oscillation de la structure de choc est par conséquent très importante et l'approche RANS stationnaire se révèle donc mal adaptée. Par ailleurs, si l'on compare les résultats des simulations numériques aux données expérimentales disponibles, il apparaît que l'approche DDES est en bon accord en ce qui concerne les pressions pariétales moyennes. De plus, la flamme obtenue par le calcul possède des caractéristiques similaires à celles données par les visualisations instantanées du radical OH dans la tuyère. Il apparaît également que la réaction de combustion entre l'hydrogène et l'oxygène de l'air pénétrant par la zone décollée a un effet très faible à la fois sur la structure moyenne de l'écoulement et sur la dynamique de la structure de choc comme on peut le constater en comparant calculs inerte et réactif.

Enfin, un pic à environ 1 kHz est mis en évidence par le calcul sur les différents spectres conformément aux mesures de pression instationnaires. L'analyse spatio-temporelle de la propagation des perturbations de pression a permis d'écarter l'hypothèse d'un mécanisme de résonance par feedback hydro-acoustique. L'occurrence d'une instabilité locale absolue doit être examinée mais semble peu probable. On montre en outre, à partir de l'évolution instationnaire des champs de pression, que le rôle joué par l'obstacle en aval du plan de sortie de tuyère dans ce mécanisme est prépondérant. En effet, la suppression de l'obstacle en aval du plan de sortie de la tuyère, étudiée en 2D à l'annexe E, permet de faire disparaître ce pic à 1 kHz, ce qui tend à prouver que cette oscillation est induite par cette spécificité géométrique.

Limites observées

Simulation numérique de l'écoulement décollé en aval d'une marche descendante

Les calculs DDES et LES en réactif utilisent le modèle de flamme épaissie dans sa version dynamique (DTF) [111] sans modification particulière par rapport à sa formulation originale. Or, en DDES, bien que majoritairement située dans la zone LES, la flamme traverse une partie de la zone RANS. En toute rigueur, les hypothèses sur lesquelles se fondent l'approche DTF ne sont plus vérifiées dans cette zone, ce qui pourrait avoir un effet néfaste sur les résultats du calcul. Cependant, on peut vérifier que dans le cas étudié cette zone reste limitée, et ne semble pas avoir d'effet significatif sur la qualité des simulations.

Le refroidissement de la paroi inférieure n'a par ailleurs pas été pris en compte, ce qui explique la différence avec les mesures au niveau des profils de température. On pourrait s'attendre à une différence plus importante entre LES et DDES en ce qui concerne les champs de température dans la chambre [178] si les conditions thermiques à la paroi étaient mieux connues. Enfin, l'influence des parois latérales n'est pas prise en compte dans nos calculs bien qu'elle semble très faible selon Courtois [36].

Simulation numérique de l'écoulement surdétendu dans une tuyère plane en milieu réactif

Notons tout d'abord qu'il a été impossible sur cette configuration de concevoir des maillages non structurés bien adaptés à la géométrie de l'écoulement. Par conséquent, la capacité offerte par le code CEDRE

de pouvoir utiliser des maillages non structurés généraux n'a pas pu être mise à profit. En effet, la volonté de prendre en compte les quatre couches limites à l'intérieur de la tuyère induit des contraintes très importantes pour la plupart des maillages hybrides, qui produisent alors des maillages de qualité non satisfaisantes en terme de nombre de points et d'orthogonalité des cellules du maillage. Le maillage structuré utilisé dans nos calculs est satisfaisant à l'intérieur de la tuyère en revanche, il existe un nombre non négligeable de cellules très fines dans des zones présentant peu d'intérêt dû à la prolongation des lignes de maillage. L'utilisation d'un maillage non structuré aurait permis de mieux maîtriser la répartition des cellules.

De plus, les niveaux de fluctuations de pression obtenus dans la tuyère sont fortement surévalués par rapport aux valeurs expérimentales. Ce résultat peut-être en partie expliqué par l'insuffisance de discrétisation spatiale dans la zone de décollement qui entraîne une surestimation de l'intensité des perturbations de pression dans la zone décollée.

La possibilité de réaliser des comparaisons quantitatives avec l'expérience est très limitée étant donné qu'aucune grandeur aérodynamique (vitesse, schlieren) ou thermochimique (température, espèces) n'a été mesurée.

Perspectives

Amélioration des modèles de combustion turbulente

Afin d'améliorer le modèle de flamme épaissie pour des applications en DES, on peut imaginer un modèle de combustion adapté à la LES qui bascule vers un modèle adapté au RANS, tout comme le fait le modèle de turbulence, ce en s'appuyant sur les similitudes entre les modèles de combustion turbulente en RANS ou en LES, illustrées par Vervisch et Veynante [200].

Aucun modèle d'interaction chimie-turbulence n'a été utilisé sur le cas de la tuyère surdétendue en milieu réactif. Bien que la combustion ait lieu majoritairement en régime de diffusion, il serait intéressant d'évaluer le modèle DTF. Cependant, sa mise en oeuvre est moins immédiate étant donné que le schéma réactionnel utilisé est assez détaillé. L'adaptation du senseur de flamme à une telle situation est sans doute délicate. Le modèle Transported Partially Stirred Reactor (TPaSR) [156] peut également être appliqué sur ce cas mais avec un schéma cinétique plus réduit.

Prise en compte de la compressibilité

La DDES utilisée est basée sur le modèle RANS $k-\omega$ SST. Or pour les différentes gammes d'écoulement considérées (subsonique, supersonique), aucune modification sensible n'est apportée à la formulation de Menter [117]. Cependant, en toute rigueur, il est possible d'intégrer des termes liés à la compressibilité (pour traiter les ondes de chocs) dans les équations de k et ω [104, 81, 136] et dont il conviendrait d'évaluer l'effet.

Par ailleurs l'existence de nombreux chocs dans le calcul d'écoulements de tuyère surdétendus nécessite d'utiliser un schéma de Roe avec un limiteur directionnel. En effet, il est important que le schéma soit à la fois suffisamment robuste pour supporter le gradient de pression au niveau du choc mais également suffisamment peu dissipatif pour restituer la dynamique instationnaire de la LES. Dans ce cadre, il serait intéressant de mettre en oeuvre le schéma numérique introduit par Garnier *et al.* [73, 74, 72] pour traiter les chocs.

Perspectives pour la problématique ATAC

Le manque de données expérimentales permettant de conclure sur le caractère quantitatif de nos simulations constitue pour l'instant un obstacle majeur à l'amélioration de la qualité des calculs mis en oeuvre. En effet, les conditions rencontrées dans la tuyère ont rendu impossible les mesures de vélocimétrie (à

cause de la condensation de la vapeur d'eau sur les parois). Une nouvelle campagne de mesure a été prévue pour combler ces manques. Elle consistera en des mesures LDV et DRASC. Par ailleurs, des rapports de mélange plus élevés, pour se rapprocher des conditions moteurs seront également utilisés dans cette nouvelle campagne. Il peut être pertinent d'envisager des calculs couplés « fluide-conduction solide » afin d'améliorer la modélisation des flux de chaleur à la paroi et de vérifier notamment l'effet du refroidissement.

Enfin, pour aller plus loin et aborder la problématique des charges latérales et thermiques, il serait nécessaire de prolonger l'étude à un cas de tuyère classique axisymétrique.

Publications associées à cette thèse

Revues internationales à comité de lecture

- B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. A DES method applied to a Backward Facing Step reactive flow. *Comptes Rendus Mécanique*, 337 (6-7) : 340-351, 2009.
- B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. Numerical simulations and physical analysis of an overexpanded reactive gas flow in a planar nozzle. *soumis à Combustion and Flame*.

Communications avec actes

- B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. A DES method applied to a Backward Facing Step reactive flow. *AIAA Paper 2008-5134* (actes de la 44th AIAA Joint Propulsion conference, Hartford, CT, USA), 2008.
- B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. Numerical Simulations of a Massively Separated Reactive Flow Using a DDES Approach for Turbulence Modelling. *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, 110 : 303-310, 2010 (actes du 2nd Turbulence and Interaction, Sainte-Luce, FR), 2009.

Autres revues ou rapport technique

- B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck. Implantation et validation d'un modèle DDES $k - \omega$ SST dans le code CEDRE. RT 1/4812 DEFA, janvier 2010.
- D. Scherrer, F. Chedevergne, P. Grenard, J. Troyes, A. Murrone, E. Montreuil, F. Vuillot, N. Lupo-glazoff, M. Huet, B. Sainte-Rose, P. Thorigny, N. Bertier, J.-M. Lamet, T. Le Pichon, E. Radenac, A. Nicole, L. Matuszewski, M. Errera. Recent CEDRE applications. *Aerospace Lab*, 2 : 163-190, 2011.

Autres colloques

- B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. On the use of DES methods for reactive flows (2nd colloque INCA, Rouen, FR), 2008.
- B. Sainte-Rose, N. Bertier, F. Dupoirieux. Numerical Simulation of a Reactive Flow in an Overexpanded Nozzle (ESA 6th Aerothermodynamics for Space Vehicles symposium, Versailles, FR), 2008.
- B. Sainte-Rose, N. Bertier, F. Dupoirieux. Numerical Simulation of a Reactive Flow in an Overexpanded Nozzle (4th European Combustion Meeting, Vienne, AUT), 2009.

Annexe A

Approximations et conventions pour la comparaison entre calculs LES (ou DDES) et mesures

A.1 Approximations lors de la comparaison entre calculs et mesures

Veynante et Knikker [201] définissent les moyennes temporelles, non pondérées par la masse, d'une grandeur quelconque par la notation $\langle . \rangle$. En supposant que la taille de maille Δ reste petite devant la longueur caractéristique d'évolution des quantités moyennes dans le temps, L , on peut écrire l'approximation suivante :

$$\langle \overline{\Psi} \rangle \approx \langle \Psi \rangle \quad (\text{A.1})$$

L'échelle L est typiquement approchée par :

$$L \approx 1 / \max \left(\frac{|\nabla \langle \Psi \rangle|}{|\Psi|} \right) \quad (\text{A.2})$$

La moyenne temporelle des grandeurs filtrées issues de la LES (ou de la DDES) est donc assimilée à la moyenne temporelle de ces grandeurs (en négligeant la partie sous-maille). En LES (ou DDES), cette approximation est toujours appliquée lors de la comparaison de grandeurs moyennes à des données expérimentales. En considérant maintenant les grandeurs fluctuantes, et en posant les mêmes hypothèses que précédemment, on peut écrire :

$$\langle \Psi^2 \rangle - \langle \Psi \rangle^2 = \underbrace{\left[\langle \overline{\Psi}^2 \rangle - \langle \overline{\Psi} \rangle^2 \right]}_{\text{résolu}} + \underbrace{\left[\langle \overline{\Psi}^2 - \overline{\Psi}^2 \rangle \right]}_{\text{SGS}} \quad (\text{A.3})$$

Les fluctuations d'une grandeur quelconque Ψ peuvent être décomposées en une partie résolue, et une partie sous-maille (SGS) modélisée. La première partie est directement disponible dans les simulations numériques. C'est donc en général cette grandeur qui est utilisée pour les comparaisons avec l'expérience, la partie sous-maille étant souvent négligée. Précisons néanmoins que Veynante et Knikker proposent différents modèles permettant de prendre en compte la partie sous-maille des fluctuations moyennes.

A.2 Conventions utilisées dans cette étude

Dans le code CEDRE, les quantités calculées sont filtrées au sens de Favre $\tilde{\Psi} = \overline{\rho\Psi}/\bar{\rho}$. Les résultats de calculs moyens dans le temps $\langle \tilde{\Psi} \rangle$ et RMS égaux à $\sqrt{\langle \tilde{\Psi}^2 \rangle - \langle \tilde{\Psi} \rangle^2}$ sont comparés aux mesures

moyennes $\langle \Psi \rangle$ et RMS $\sqrt{\langle \Psi^2 \rangle - \langle \Psi \rangle^2}$. Pour alléger les notations et sauf mention contraire $\tilde{\Psi}$ est utilisé à la fois pour les valeurs moyennes et instantanées (ce qui permet de maintenir cette notation pour les grandeurs moyennées au sens RANS) et ses fluctuations RMS sont notés Ψ'_{RMS} .

Annexe B

Simulations RANS de la tuyère S8Ch

B.1 Présentation du cas test physique et numérique

B.1.1 La tuyère S8Ch de l'Onera

La soufflerie S8Ch, développée à l'Onera dans le cadre du programme ATAC est constituée par une tuyère avec un premier col fixe et un second col créant un dièdre à hauteur variable. Les deux configurations étudiées correspondent respectivement à une hauteur de second col à 95 mm et 120 mm soit second col ouvert. La figure B.1 donne une vue de l'installation ainsi que les dimensions de la tuyère dans le plan médian.

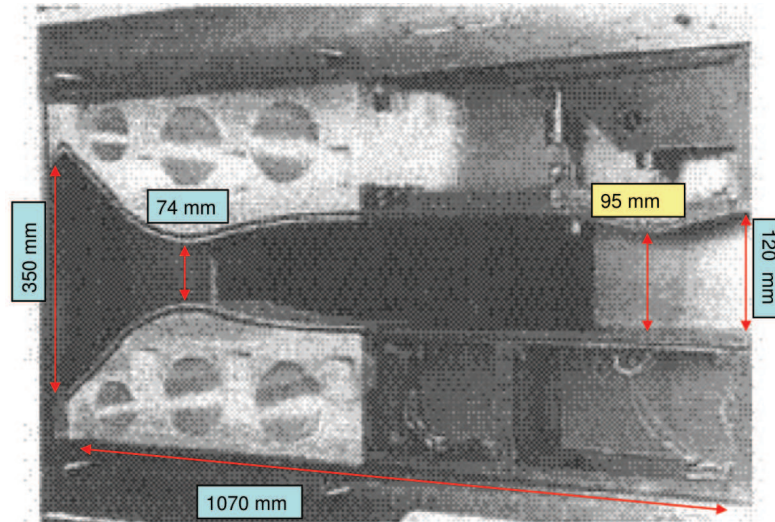


FIGURE B.1 – *Tuyère S8Ch de l'Onera et principales dimensions*

Les conditions de fonctionnement abordées dans cette étude correspondent à des conditions d'arrêt de $p_i = 98\,000\text{ Pa}$ et $T_i = 305\text{ K}$, le gaz utilisé est de l'air pur. Le nombre de Mach pour le cas amorcé est égal à 1,95. Le nombre de Reynolds unitaire pour ces conditions est égal à environ $1,2 \cdot 10^7\text{ m}^{-1}$. Il existe sur ce cas de nombreux diagnostics en stationnaire et en instationnaire. Le lecteur est invité à se référer à [14] et [15] pour une description exhaustive de la base de donnée expérimentale. Cette configuration a également servi de cas de référence pour la validation des modèles de turbulence implantés dans le code Flu3M [87].

B.1.2 Domaine de calcul et maillage

S8Ch à deux cols

D'une part l'écoulement est supersonique, de plus l'existence d'un second col permet de fermer acoustiquement la région entre les deux cols, par conséquent il n'est donc pas nécessaire de prolonger le domaine de calcul au domaine extérieur. Le maillage, présenté à la figure B.2 est 2D structuré avec 350 points dans la direction x et 177 points dans la direction y ce qui correspond à 61950 points et 123373 faces. Cette figure met également un accent sur la résolution du maillage au niveau des deux cols.

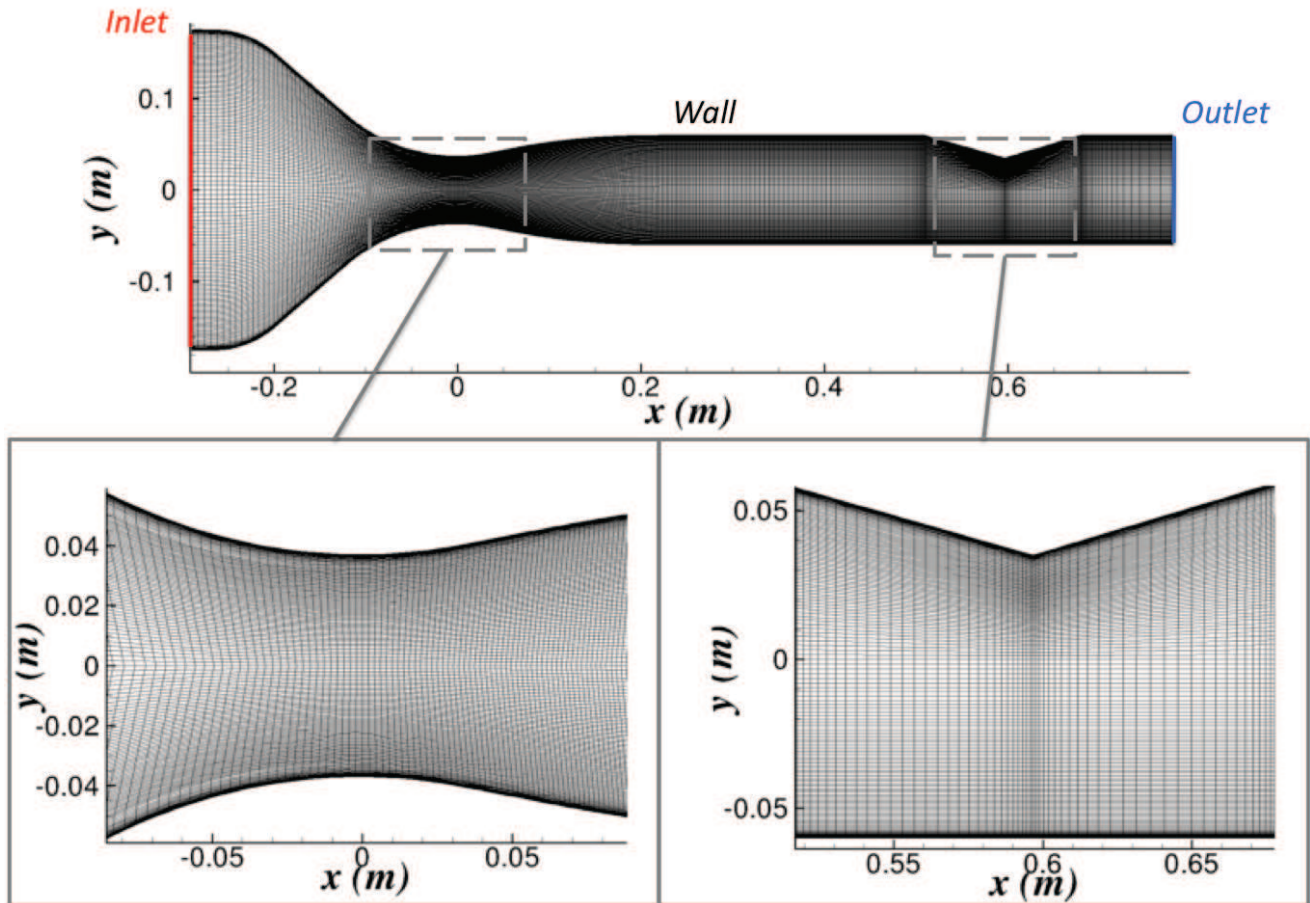


FIGURE B.2 – Maillage de la tuyère à deux cols et conditions aux limites

Second col amorcé

La répartition des points pour le maillage à second col ouvert est identique au cas précédent. La figure B.3 illustre la discrétisation employée dans les couches limites, 40 points sont en effet utilisés. La taille de première maille est égale à $5\text{ }\mu\text{m}$ ce qui correspond à $y^+ \approx 1$.

B.1.3 Conditions du calcul

Modèles utilisés

Cette étude cherche à comparer les modèles RANS $k - \varepsilon$ et $k - \omega$ SST du code CEDRE au modèle de Spalart-Allmaras [189] du code Flu3M de l'Onera [79, 45] sur un cas de décollement mais également pour

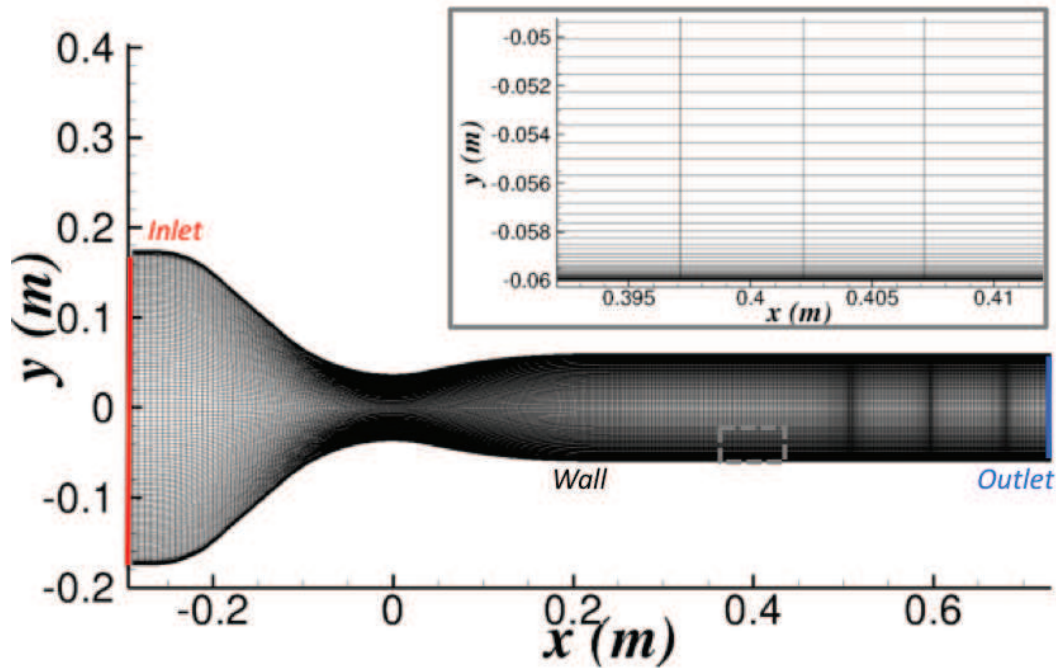


FIGURE B.3 – Maillage avec le second col amorcé, zoom sur le maillage de couche limite

une couche limite attachée. On pourra alors évaluer les performances du code CEDRE en comparaison avec un code éprouvé pour des problématiques d’aérodynamique appliquée.

Conditions aux limites

Les conditions imposées en entrée (inlet) pour les différents modèles sont résumées dans le tableau B.1. Les parois sont prises adiabatique non glissantes.

TABLE B.1 – Conditions imposées en entrée du domaine de calcul

Modèle	p_i (Pa)	T_i (K)	Y_{air}	k ($m^2 \cdot s^{-2}$)	ω (s^{-1})	ε ($m^2 \cdot s^{-3}$)
SA	98000	305	—	—	—	—
$k - \omega$ SST	98000	305	1	0,2863	155,237	—
$k - \varepsilon$	98000	305	1	0,2863	—	4

B.2 Résultats des calculs RANS

B.2.1 Configuration à deux cols

Sur la figure B.4, la comparaison entre la structure de l'interaction onde de choc - couche limite est illustrée pour les trois approches grâce à des iso-lignes de Mach. Cette première comparaison permet de

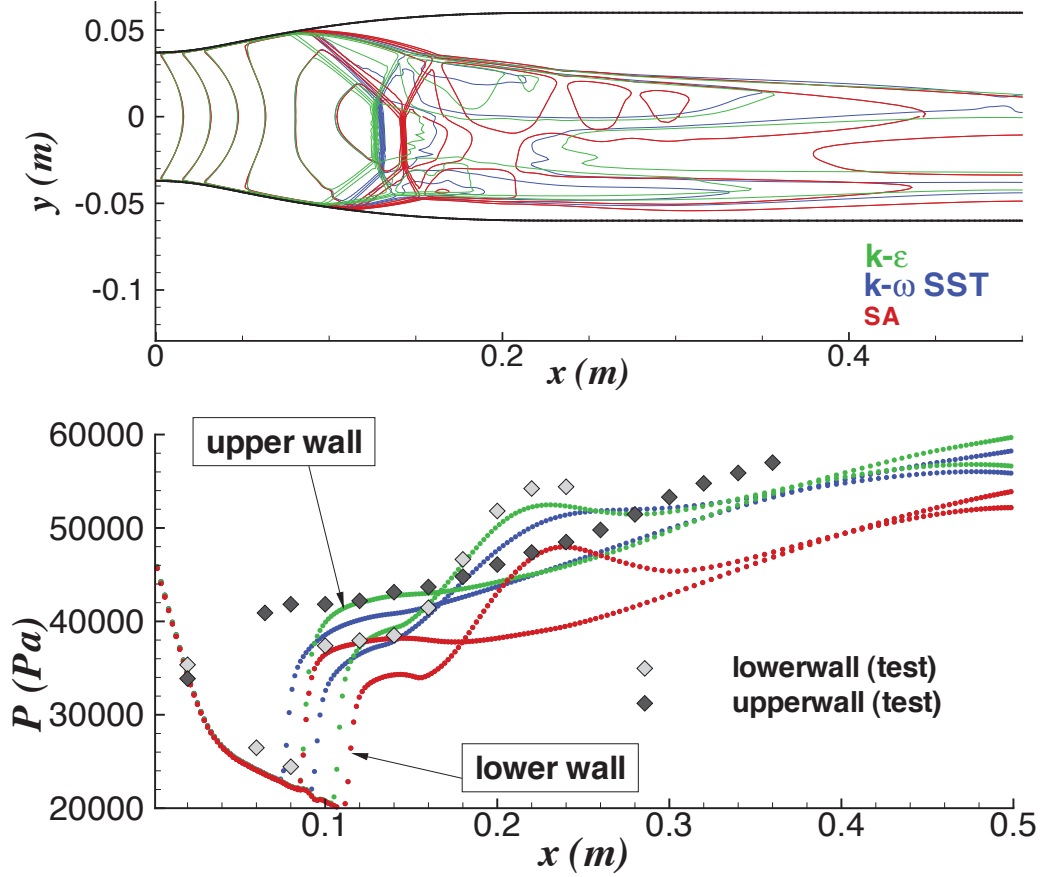


FIGURE B.4 – (Haut) Comparaison d'iso-lignes de nombre de Mach M ($M \in [0,8,2]$) dans le champ, (bas) pression à la paroi et mesures expérimentales

formuler les conclusions suivantes : d'une part, les modèles $k-\varepsilon$ et $k-\omega$ SST donnent des résultats très similaires sur ce cas. La structure du décollement est similaire pour les trois modèles. Comparativement au modèle SA du code Flu3M, les résultats obtenus avec CEDRE reproduisent mieux le point de décollement, il faut en revanche relativiser ce résultat, en effet Hallart *et al.* [87] ont démontré que la prise en compte des parois latérales a pour effet entre autres d'avancer le point de décollement vers l'amont pour le modèle SA.

B.3 Comparaison des profils de couche limite

Le choix d'un modèle RANS permettant de traiter des interactions onde de choc-couche limite par une approche hybride RANS-LES repose en grande partie sur la capacité de ce modèle à traiter les couches limites. La figure B.5 présente en $x = 0,4$ m des profils de vitesse u^{*+} obtenues par la transformée de Van Driest en fonction de la distance en unité de paroi y^* . À cette abscisse, on peut considérer que la couche limite correspond à une couche limite de plaque plane canonique.

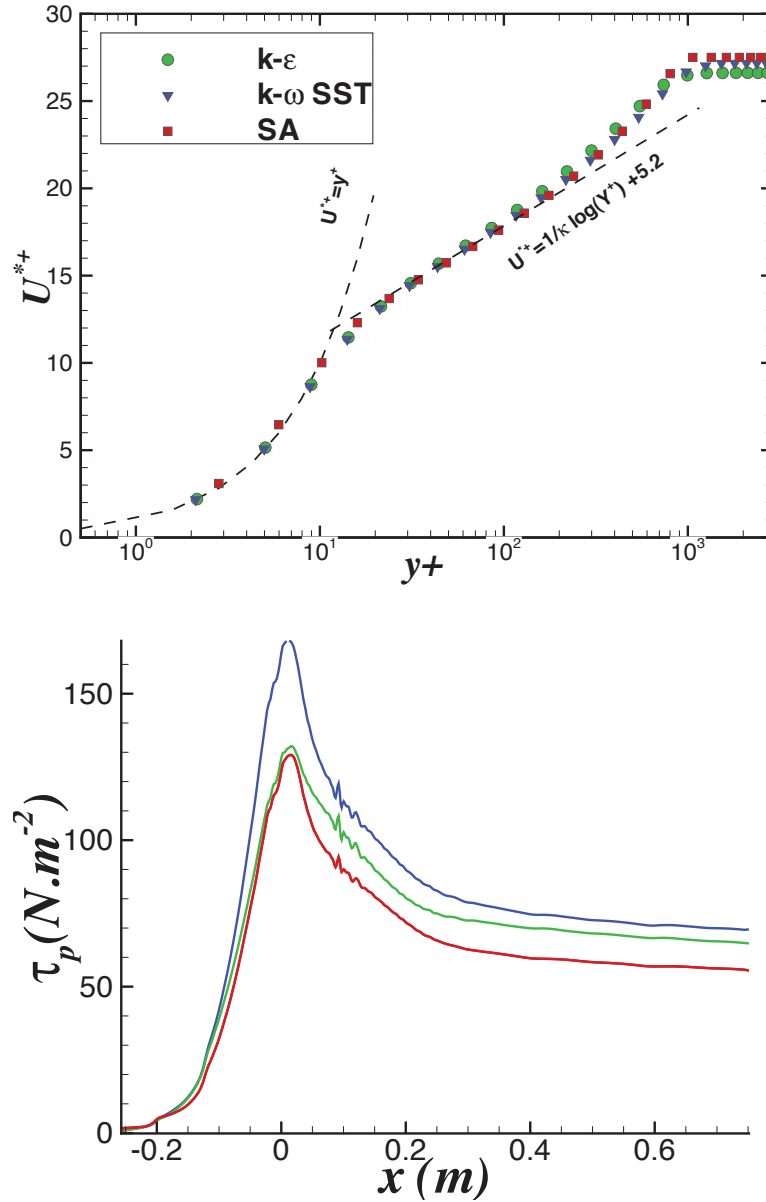


FIGURE B.5 – (Gauche) Profils de couche limite pour les trois modèles en $x = 0,4$ m (un point sur deux), (droite) évolution du frottement pariétal

Les profils de couche-limite obtenus suivent le comportement d'une couche-limite de plaque plane, avec des zones linéaires et logarithmiques très bien reproduites. En revanche, alors que les profils obtenus pour les calculs $k - \epsilon$ et $k - \omega$ SST sont en parfait accord, il apparaît que la couche limite pour le calcul SA est moins épaisse ce qui traduit un frottement plus faible. Cette observation est en accord avec une position du décollement plus en aval pour le cas avec le second col.

Annexe C

Validation du schéma de Gear sur un tourbillon 2D

On se propose ici de valider le schéma implicite de Gear sur le cas d'un tourbillon 2D se propageant dans la direction X. On utilise ici un domaine de calcul carré de dimensions $10\text{ m} \times 10\text{ m}$ avec un maillage de 80×80 mailles. Des conditions de périodicité sont imposées aux limites à gauche et à droite, des conditions de glissement sont imposées au niveau des limites hautes et basses. Les conditions initiales permettant de générer le tourbillon sont dérivées d'un potentiel de vitesse prenant la forme d'une gaussienne. Ces conditions s'écrivent sous la forme :

$$u = u_0 - \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{R}^2} (y - y_0) \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\mathcal{R}^2} \right] \quad (\text{C.1})$$

$$v = v_0 + \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{R}^2} (x - x_0) \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\mathcal{R}^2} \right] \quad (\text{C.2})$$

$$P = P_0 + \rho_0 \frac{\mathcal{C}^2}{\mathcal{R}^2} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{\mathcal{R}^2} \right] \quad (\text{C.3})$$

$$T = \frac{P}{\rho_0 r} \quad (\text{C.4})$$

où x_0 et y_0 sont les coordonnées du centre du tourbillon, $\mathcal{R}$ est un rayon caractéristique du tourbillon (ici, on prendra $\mathcal{R}$ égal à un dixième de la longueur du domaine, soit $0,3\text{ cm}$) et $\mathcal{C}$ est une constante déterminant l'intensité du tourbillon. $\mathcal{C}$ sera choisi de manière à ce que le différentiel de pression maximal observé par rapport à la pression de référence ($101\,325\text{ Pa}$) soit de l'ordre de 4000 Pa , soit $\mathcal{C} \approx 1$. Le tourbillon est convecté par une vitesse axiale u_0 valant $100\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Les champs (figure C.1) et profils de pression (figure C.2) obtenus au bout d'une traversée du domaine de calcul (soit après $1 \cdot 10^{-2}\text{ s}$ de temps physique) sont comparés entre eux pour les méthodes d'intégration temporelle Euler implicite du premier ordre, Runge Kutta Implicite d'ordre 2 (RKI2) (voir la thèse de Bertier [8]) et Gear sous-itéré. L'influence du pas de temps sur la précision de la méthode est également examinée (via le CFL). De ces figures, on peut noter que les approches d'ordre 2 améliorent significativement les résultats par rapport à l'Euler implicite. Par rapport à la méthode RKI2 (dont le coût de calcul est équivalent à Gear avec deux sous itérations), on peut constater que le schéma de Gear est moins dissipatif (niveau du pic) mais plus dispersif (position du creux).

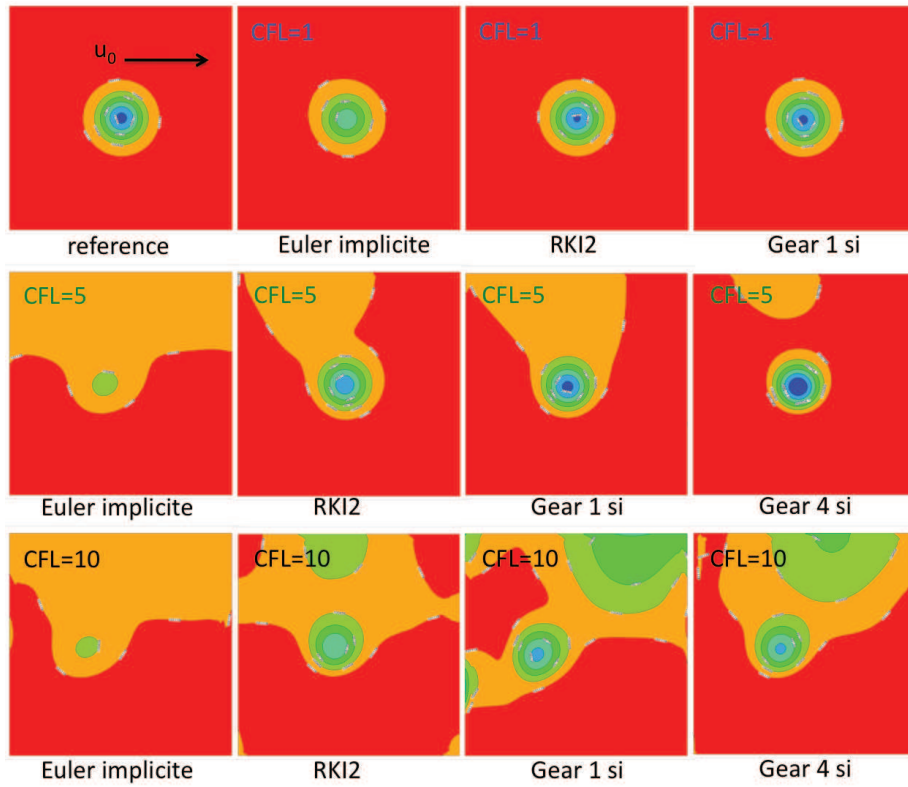


FIGURE C.1 – Champ de pression pour des calculs à $CFL = 1, 5, 10$ après une traversée

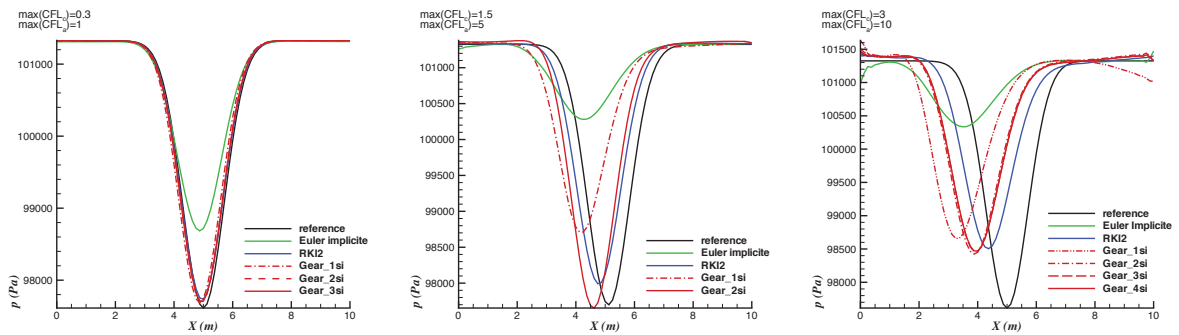


FIGURE C.2 – Profils de pression pour $CFL = 1, 5, 10$ après une traversée (de gauche à droite)

Annexe D

Compléments sur le cas A3C

D.1 Coût des calculs instationnaires

Le coût des calculs est un paramètre crucial à prendre en compte lors de la réalisation de simulations numériques complexes. Les calculs sur la marche A3C ont été réalisés sur des clusters de calcul de l'Onera ISERAN (processeurs NEC) et GALIBIER (processeurs Intel Itanium). Leur coût est regroupé au tableau D.1.

TABLE D.1 – *Coût des différents calculs instationnaires réalisés sur la chambre de combustion du A3C*

Cas	$t./proc.$ (s)	$N_{proc.}$	$N.$	Processeur	Coût total du calcul
DDES-a	12,6	4	80.000	NEC SX-8R	1120 h CPU
DDES-b	15,8	64	80.000	Intel Itanium 2	22.470 h CPU
DDES-c	9,4	4	80.000	NEC SX-8R	840 h CPU
DDES-d	12,6	4	80.000	NEC SX-8R	1120 h CPU
LES	9,2	4	80.000	NEC SX-8R	820 h CPU
DDES (réactif)	19,8	64	100.000	Intel Itanium 2	35.200 h CPU
DDES-qw (réactif)	19,8	64	100.000	Intel Itanium 2	35.200 h CPU
LES (réactif)	16,9	64	100.000	Intel Itanium 2	30.000 h CPU

D.2 Compléments sur le modèle de combustion turbulente

D.2.1 Prise en compte de l'interaction chimie-turbulence

Avant de mettre en oeuvre l'approche DTF pour prendre en compte la combustion turbulente sur le cas A3C en réactif, un calcul préliminaire – ne prenant pas en compte l'interaction chimie-turbulence – a d'abord été réalisé [169] c'est à dire que les termes sources d'espèces sont obtenus directement par une loi d'Arrhenius.

La mise en oeuvre de ce calcul en DDES a permis de mettre en évidence une remontée de flamme par la couche limite inférieure au niveau du coin de la marche comme l'illustre la figure D.1.

Ce phénomène, non physique pour le cas stable peut s'expliquer par le fait qu'aucun modèle d'extinction à la paroi n'est utilisé. En effet, dans la réalité, des tourbillons très fins par rapport à l'épaisseur de flamme ont tendance à introduire un plissement important à l'origine de l'extinction. Ce phénomène complexe a été étudié par Poinot *et al.* [152], et un modèle pour le prendre en compte est proposé par Bruneaux *et al.* [17]. Dans ces travaux, une distance dite d'« extinction » (quenching en anglais) où les termes de production ou de destruction d'espèces s'annulent est mise en évidence. Or, dans nos calculs

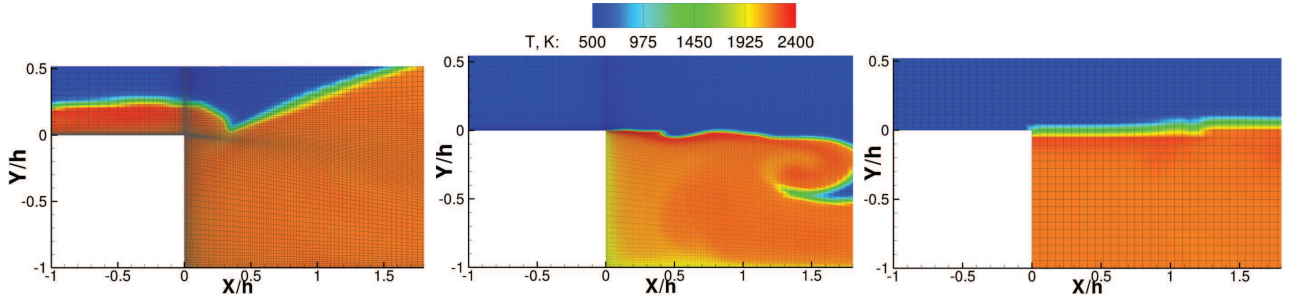


FIGURE D.1 – (de g. à d.) Champs instantanés de température et maillage pour les calculs DDES sur le maillage II, DDES sur le maillage II avec des parois refroidies, DDES sur un maillage grossier avec une loi d'Arrhenius

ne prenant pas en compte l'extinction, la finesse des premières mailles près de la paroi permet une bonne résolution de la flamme et $S_t \approx S_L^0$ (car l'écoulement est laminaire dans cette zone de la couche limite) au lieu de s'annuler. La flamme peut ainsi remonter au cours du calcul via la couche limite dans la région où la vitesse convective est inférieure à la vitesse de flamme.

Afin de surmonter ce problème, deux solutions ont été envisagées : s'assurer de l'annulation des termes sources d'espèces chimiques dans ces premières mailles en imposant une paroi amont isotherme à 520 K ou utiliser un maillage plus grossier. Dans les deux cas le problème de flashback est résolu comme l'illustre la figure D.1. Cependant, pour la première alternative, le fait d'imposer une température basse sur la paroi amont modifie la température dans la partie basse de la chambre alors que pour la seconde l'utilisation d'un maillage trop grossier dans les couches limites n'est pas compatible avec l'utilisation d'une approche RANS. Une comparaison approfondie des résultats moyens pour ces différentes approches est proposée références [169] et [170]. Ce travail préliminaire justifie donc le choix d'implanter et d'utiliser l'approche DTF pour les calculs présentés au chapitre 7.

D.2.2 Paramètres du modèle DTF

Avant de mettre en oeuvre l'approche DTF, une étude préliminaire a permis d'une part de valider la cinétique chimique employée et d'autre part, d'évaluer les paramètres pris en compte par le modèle (décrits au chapitre 2).

Cinétique chimique employée

Le schéma cinétique présenté à la section 7.1 est validé sur une flamme laminaire mono-dimensionnelle librement propagative. Le maillage utilisé pour ce calcul vérifie $\Delta x = 5 \cdot 10^{-5}$ m ce qui permet d'avoir suffisamment de points dans le front de flamme laminaire pour le résoudre. Les vitesses de flamme laminaire S_L^0 (estimées à l'aide de la formule 2.6) ont été calculées pour des flammes à la pression atmosphérique et à la température de 300 K. Les résultats obtenus avec ce schéma global sont comparés aux résultats obtenus avec un schéma à 2 étapes proposé par le CERFACS (références [9, 1]) et avec un schéma détaillé ([209]). Ces vitesses sont tracées pour quatre richesses 0,6 ; 0,8 ; 1,0 ; et 1,2 à la figure D.2.

Nombre de points dans le front de flamme

Afin d'évaluer le nombre de points nécessaires à la résolution du front de flamme (n_f utilisé dans le modèle DTF), des calculs de flamme laminaire 1D sur un maillage millimétrique ($\Delta x = 1$), représentatif des tailles de mailles utilisées en aval du décollement dans A3C, sont réalisés avec le modèle de flamme épaissie en laminaire. Différentes valeurs de l'épaississement F sont utilisés ce qui revient à faire évoluer le nombre de points dans le front de flamme n_f . Sur la partie gauche de la figure D.3, l'évolution

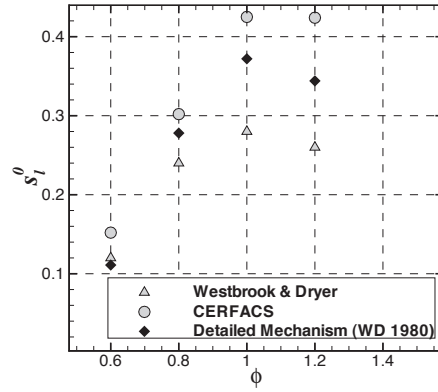


FIGURE D.2 – Comparaison des vitesses de flamme laminares en fonction de la richesse pour le schéma à 1 étape de Westbrook et Dryer [210], le schéma du CERFACS [9] et le schéma détaillé [209]

de la vitesse de flamme laminaire en fonction de F et n_f pour une flamme à pression atmosphérique représentative des conditions rencontrées dans A3C ($\Phi = 0,8$ et $T = 520$ K) est tracée et comparée à la valeur de référence $S_L^0 = 0,86 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ obtenue sur le maillage plus fin utilisé au paragraphe précédent. Les profils de température et de fraction massique de CH_4 sont reproduits sur la partie droite de cette figure pour différentes valeurs de F et comparés aux profils de référence. Ainsi, on constate qu'à partir de $F = 8$ soit un peu plus de 3 points dans le front de flamme, la vitesse de flamme ainsi que l'évolution des profils sont bien reproduites. Pour les calculs sur A3C, on prend la valeur $n_f = 5$.

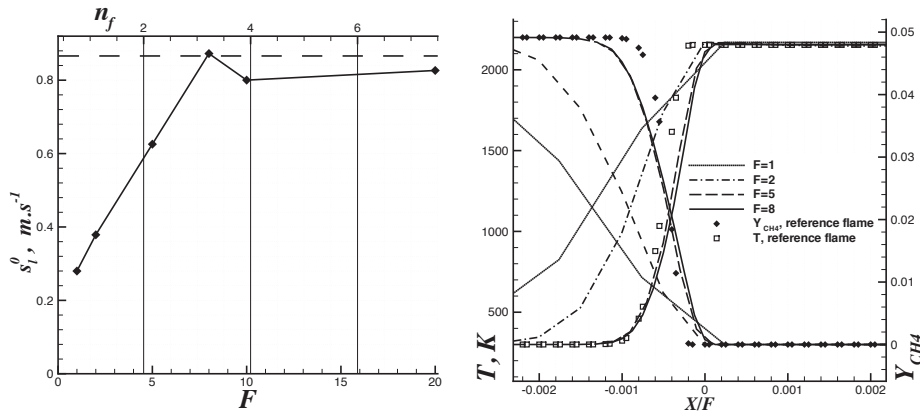


FIGURE D.3 – (Gauche) Evolution de la vitesse de flamme en fonction de l'épaississement sur un maillage millimétrique. (Droite) Profils de température et de fraction massique de CH_4 (en fonction de X/F au sein de la flamme pour différents épaississements

Paramètres

Les valeurs des paramètres pris en compte par le modèle DTF sont regroupés dans le tableau D.2 :

TABLE D.2 – Valeur des différents paramètres pris en compte par le modèle DTF

n_f	Ω_{DTF}^0	C_α	$S_L^0 (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	$\delta_L^0 (\text{m})$	β	Δ_e / Δ	$l_t^{max} (\text{m})$
5	$2,5 \cdot 10^{-5}$	500	0,86	$3,9 \cdot 10^{-4}$	1	10	0,015

D.3 Comparaison avec les mesures de la campagne MICAEDI

D.3.1 Comparaisons aux mesures PLIF, PIV et microphone

Comme indiqué dans la partie 5, le banc A3C a également été utilisé afin d'étudier le comportement de la flamme en présence d'instabilités. Des mesures ont donc été réalisées par PIV (champ aérodynamique) et PLIF OH pour des conditions de combustion stable et instable (voir [165, 107]).

Contrairement aux expériences auxquelles les calculs sont comparés dans la partie II, la vitesse débitante du prémélange employée au cours de cette campagne est de $70 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ce qui conduit à un nombre de Reynolds différent. Ainsi, les comparaisons avec les calculs DDES et DDES-qw présentées dans cette section sont donc d'ordre qualitatif. De plus, les conditions instables sont obtenues dans l'expérience en obturant partiellement le col de sortie jusqu'à ce que la pression dans la chambre atteigne 1,5 bar. Dans le calcul DDES-qw la flamme est excitée « numériquement » par un mode quart d'onde généré par la réflexion des ondes au niveau de la condition de sortie subsonique.

Les champs de T'_{RMS} , $|\tilde{u}|$, u'_{RMS} , v'_{RMS} dans le plan médian pour les calculs DDES et DDES-qw sont comparés aux visualisations moyennes de OH et aux mesures moyennées de $|u|$, u'_{RMS} , v'_{RMS} pour les cas stables et instables figures D.4 et D.5 respectivement. Après l'analyse de ces figures, il apparaît que les résultats numériques obtenus sont en bon accord avec les mesures de vitesses pour le cas stable. En revanche, la visualisation moyenne de OH semble indiquer que la combustion a lieu dans une zone plus large que le pinceau mis en évidence par les T'_{RMS} . En fait, l'espèce OH n'étant pas prise en compte dans le calcul, l'utilisation de T'_{RMS} est purement qualitative (la diffusion de OH aurait tendance à donner une région plus large que celle délimitée par T'_{RMS} qui traduit uniquement le passage du front de flamme). Concernant la comparaison des calculs DDES-qw aux mesures, on peut constater qu'expérimentalement le phénomène est beaucoup plus intense notamment au niveau de la flamme qui est davantage déviée vers la partie haute de la chambre voire remonte dans le canal amont (flash-back). D'un point de vue acoustique, l'obturation du col de sortie entraîne l'apparition d'ondes plus intenses que de la réflexion numérique ces résultats ne sont donc pas surprenants.

En outre, durant cette campagne, l'évolution de la pression dans la chambre a été mesurée à l'aide d'un micro placé au droit de la marche. Sur la figure D.6, les spectres de pression en $\text{dB} \cdot \text{Hz}^{-1}$ obtenus en régime stable et instable, sont comparés aux spectres obtenus pour les calculs DDES et DDES-qw. Lorsque l'on compare ces deux séries de spectres on peut d'abord constater que, conformément à l'expérience, les niveaux obtenus en instable sont supérieurs d'environ 10 dB au cas stable. De plus, pour le cas stable, on constate qu'il y a un assez bon accord entre l'allure du spectre issu du calcul et les mesures. En revanche, on peut constater un léger décalage au niveau des pics. Expérimentalement, pour le cas instable, on peut constater une stabilisation des niveaux entre 1000 Hz et 2000 Hz, tendance qui n'est pas reproduite au niveau du calcul. En outre, l'apparition de pics liés à un mode acoustique de la chambre est moins évidente dans l'expérience, cela est dû en partie au mode d'obtention des instabilités lors de la campagne de mesures.

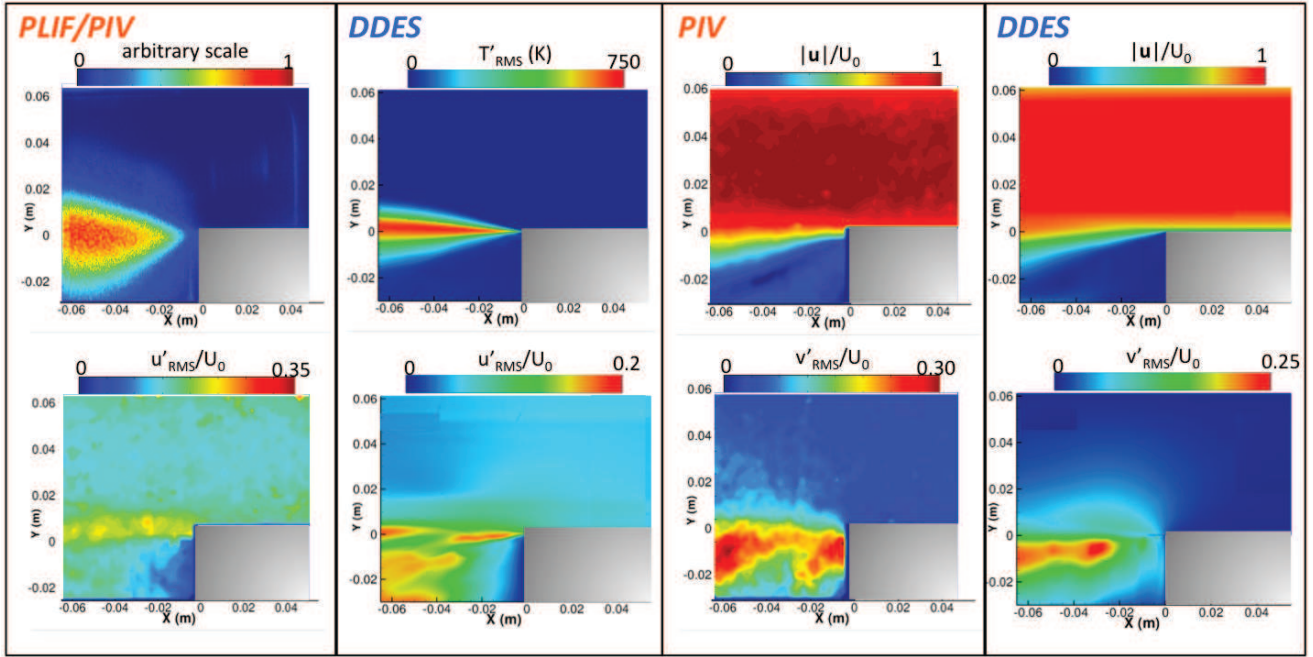


FIGURE D.4 – Champs aérodynamiques moyens et fluctuants ($|\tilde{u}|$, u'_{RMS} , v'_{RMS}) et thermochimiques moyens (PLIF OH - T'_{RMS} pour le calcul DDES) pour le cas stable dans la zone délimitée par le hublot.

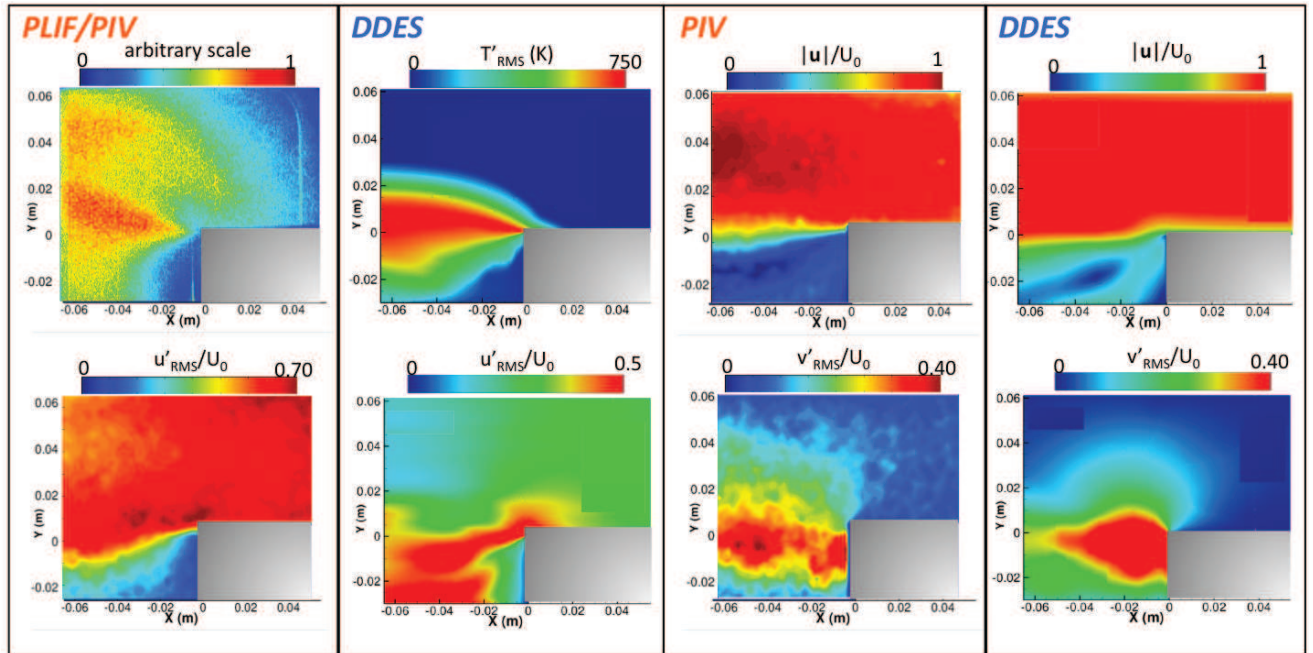


FIGURE D.5 – Champs aérodynamiques moyens et fluctuants ($|\tilde{u}|$, u'_{RMS} , v'_{RMS}) et thermochimiques (PLIF OH - T'_{RMS} pour le calcul DDES-qw) pour le cas instable dans la zone délimitée par le hublot.

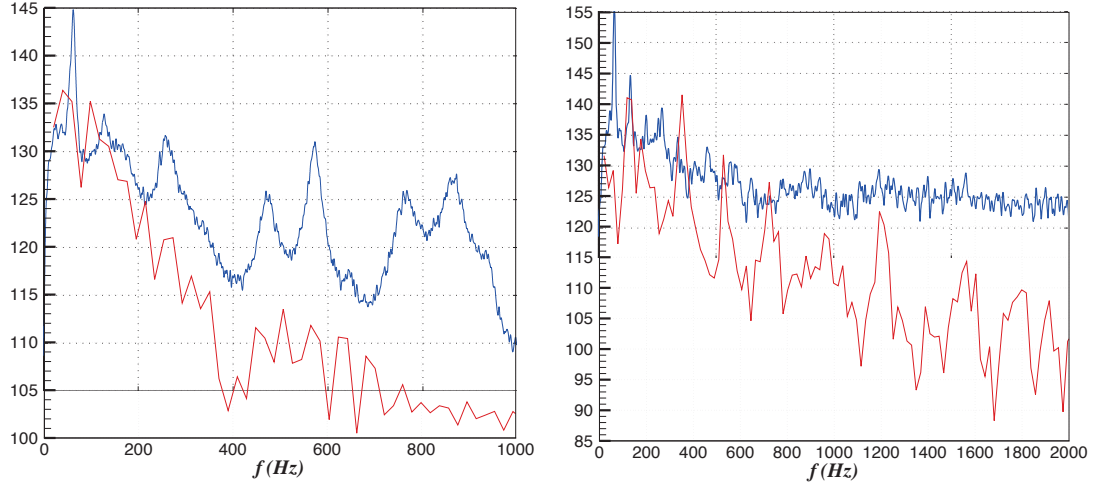


FIGURE D.6 – Spectres de pression en $\text{dB} \cdot \text{Hz}^{-1}$ pour le cas stable (gauche) et instable (droite) pour les calculs (rouge) et les mesures micro (bleu)

D.3.2 Comparaison aux visualisations instantanées de chimie-luminescence OH

Sur la figure D.7 une séquence d'images obtenues par chimie-luminescence au cours d'un cycle instable (mais sans flashback) est comparée à une séquence de dégagement de chaleur pour le calcul DDES-qw (pour le calcul le temps physique correspond à $\Delta t_0 \approx 3 \text{ ms}$). Les comportements de la flamme dans les deux cas sont similaires, on peut également noter un important plissement qui traduit le rôle joué par le fort couplage avec les tourbillons créés au niveau de la marche engendrant un battement de la flamme [157].

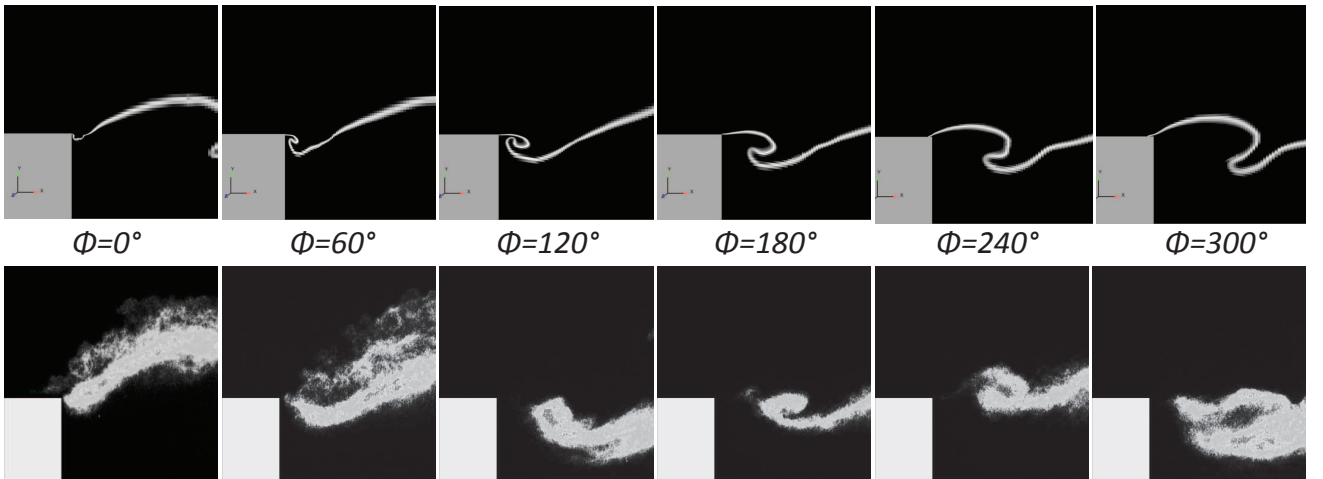


FIGURE D.7 – Séquence de dégagement de chaleur dans le plan transverse (haut), visualisations instantanées d'émission spontanée OH dans la direction transverse

Annexe E

Etude préliminaire en 2D sur la tuyère ATAC

Avant d'aborder la simulation numérique 3D de l'écoulement réactif dans la tuyère surdétendue ATAC, une étude sur des maillages 2D a été réalisée, afin d'évaluer l'influence de certains paramètres comme la résolution des couches limites amont ainsi que la température pariétale au niveau du divergent. L'influence de l'obstacle en sortie de tuyère sur la dynamique de l'écoulement est également étudiée. Pour plus de détails concernant les calculs présentés dans cette annexe, le lecteur est invité à consulter la référence [173].

E.1 Présentation des maillages et conditions des calculs

E.1.1 Domaines de calcul et maillages

Dans le cadre de cette étude on considère un domaine de calcul, comprenant l'intégralité de la tuyère et de l'injecteur. Le maillage hybride réalisé est détaillé figure E.1. Le choix d'imposer une condition au limite au niveau de l'obstacle est justifié à la référence [132]. En effet, si l'on effectue une coupe du domaine de calcul 3D, on obtiendrait une paroi à la place du mât qui par conséquent bloquerait le débit amont ce qui n'est pas représentatif de la réalité, ainsi à cette référence deux solutions sont envisagées : imposer une condition d'entrée au niveau de l'obstacle ou élargir le domaine de calcul en amont (sans mât) et par conséquent avoir un écoulement établi au niveau de la rupture de pente. La comparaison de ces deux méthodes met en évidence de meilleurs résultats pour la première approche. L'utilisation d'un maillage hybride sur ce cas est intéressant car il permet de discrétiser les couches limites à l'aide de rectangles, tout en permettant un raffinement local avec des triangles dans les zones décollées, qui sont progressivement dérafinés en aval du domaine de calcul. L'étude de l'influence de la discrétisation des couches limites sur l'écoulement moyen a été réalisée sur trois maillages (désignés par 1 – 2 – 3), comportants respectivement 25, 40 et 60 points dans la couche limite. Par ailleurs, ces maillages sont respectivement constitués d'un total de 81396, 102474 et 127892 cellules. Enfin, un maillage a été réalisé en supprimant l'obstacle et en conservant la discrétisation du maillage 2. Les limites de ce nouveau domaine de calcul sont illustrées figure E.2 (maillage 4).

E.1.2 Conditions aux limites

La figure E.2 illustre la position et le type des limites du domaine de calcul. Les conditions aux limites qui sont imposées sont les mêmes que pour le calcul 3D (voir chapitre 8) à l'exception de la condition au limite au niveau de l'obstacle pour laquelle la direction du vecteur vitesse est imposée et est quasiment perpendiculaire au plan d'injection $(0, 0.5, 1, 0)$.

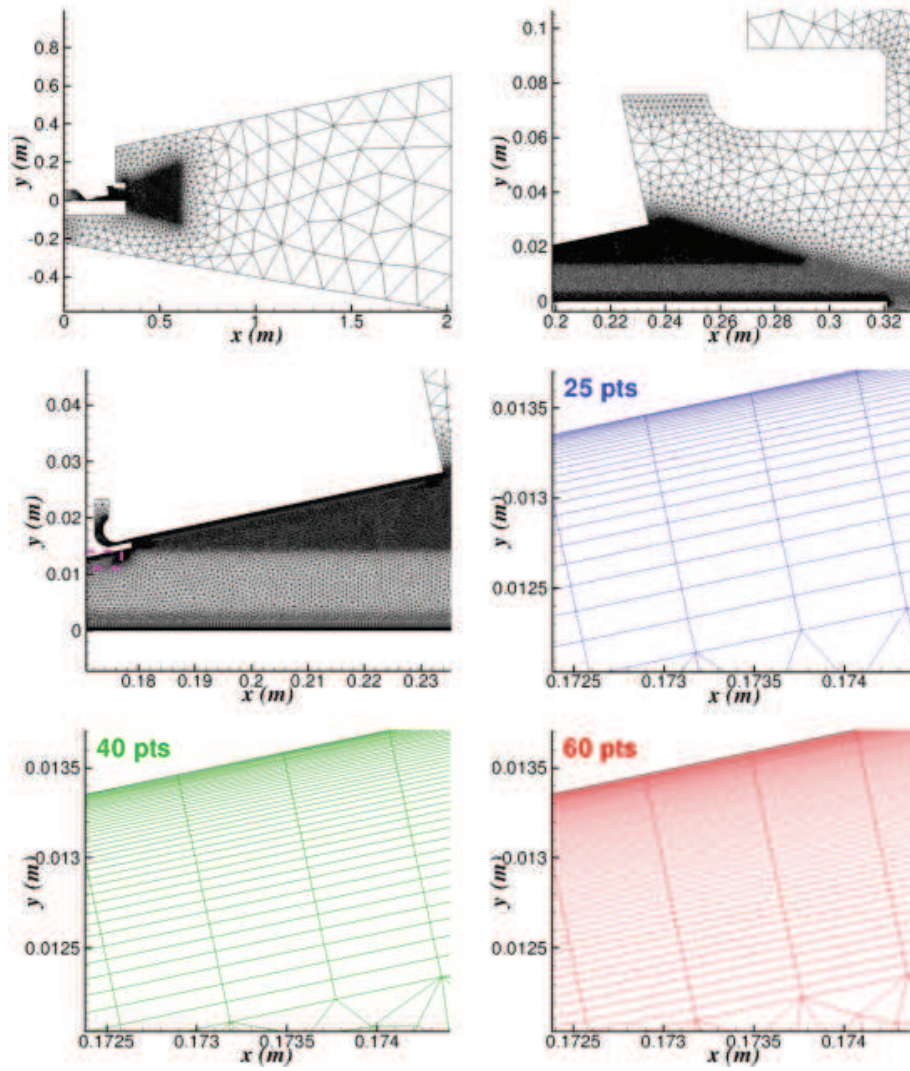


FIGURE E.1 – Vue générale du maillage, et vues détaillées sur la tuyère (maillage 1) (traits noirs), zoom sur la couche limite

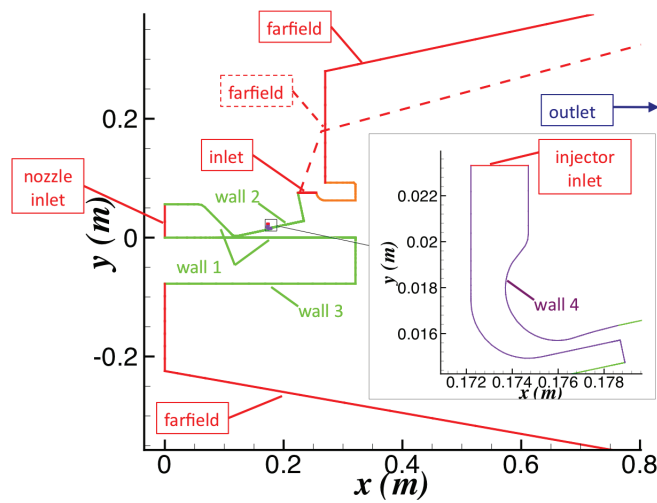


FIGURE E.2 – Conditions aux limites pour la configuration ATAC en 2D avec obstacle – maillages 1, 2, 3 – (traits pleins) et sans obstacle – maillage 4 – (points tillés)

E.1.3 Calculs réalisés

L'ensemble des calculs présentés est regroupé de manière synthétique dans le tableau E.1. L'objectif visé par ces calculs est désigné par CL pour l'influence de la résolution de la couche limite (étudiée pour plusieurs valeurs de p_i avec $T_i = 2483,7$ K en sortie de chambre), par TP pour la température pariétale (étudiée pour $T_w = 380$ K et 520 K) et enfin O pour caractériser l'influence de l'obstacle sur la dynamique de l'écoulement). Les modèles employés ainsi que les schémas numériques utilisés sont les mêmes que pour les calculs 3D (se référer à la section 8.3). Le pas de temps pour les calculs DDES est pris égal à $2 \cdot 10^{-7}$ s.

TABLE E.1 – *Calculs réalisés en 2D*

Objet	$p_i(\text{bars})$	$T_w(K)$	Turbulence	Maillages	Combustion
CL	30	380	RANS $k - \omega$ SST	1,2,3	aucune (air)
CL	26	380	RANS $k - \omega$ SST	1,2,3	chimie figée
CL	22, 2	380	RANS $k - \omega$ SST	1,2,3	Arrhenius
TP	22, 2	520	RANS $k - \omega$ SST	2	Arrhenius
O	22, 2	520	DDES	2,4	Arrhenius

E.2 Résultats et discussion

E.2.1 Influence de la résolution de la couche limite (calculs CL)

L'ensemble des résultats des calculs RANS correspondant à l'étude de l'influence de la résolution de la couche limite (CL) sont regroupés figure E.3. Des iso-lignes de Mach supersoniques sont superposées pour les trois maillages afin de mettre en évidence la topologie du décollement. De plus, les profils de pression au niveau de la paroi haute sont reproduits sur cette même figure.

On peut constater que suivant les conditions simulées, le nombre de points dans les couches limites amont à une influence plus ou moins importante. Ainsi, on peut remarquer que lorsque le décollement a lieu très en aval dans le divergent, c'est à dire pour p_i élevée, une résolution fine de la couche limite est nécessaire pour obtenir une prévision correcte du point de décollement. La position du point de décollement est bien reproduite à p_i intermédiaire pour toutes les résolutions. En revanche, on peut constater une différence au niveau des iso-lignes de Mach. Enfin, en réactif et pour p_i faible (correspondant aux conditions des calculs réalisés en 3D), on constate que les différences entre les calculs sont très faibles. Cette étude justifie par conséquent le choix de prendre 40 points dans la couche limite supérieure et 25 points pour les couches limites basses et latérales en 3D.

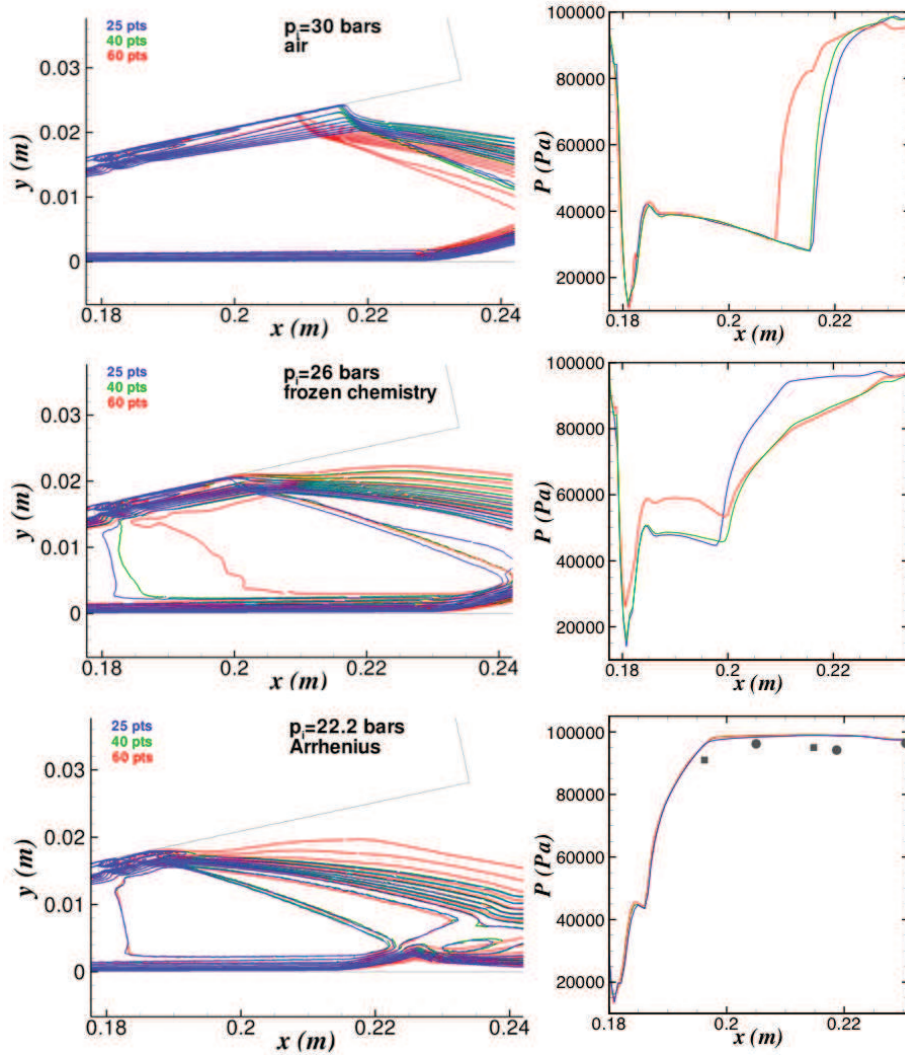


FIGURE E.3 – (gauche) Iso-lignes de nombre de Mach avec M allant de 1 à 3 pour les calculs CL, (droite) profils de pression au niveau du divergent

E.2.2 Influence de la température pariétale (calculs TP)

Sur la figure E.4, on peut constater que la topologie du champ de radicaux OH dans le divergent est très dépendante de la température pariétale.

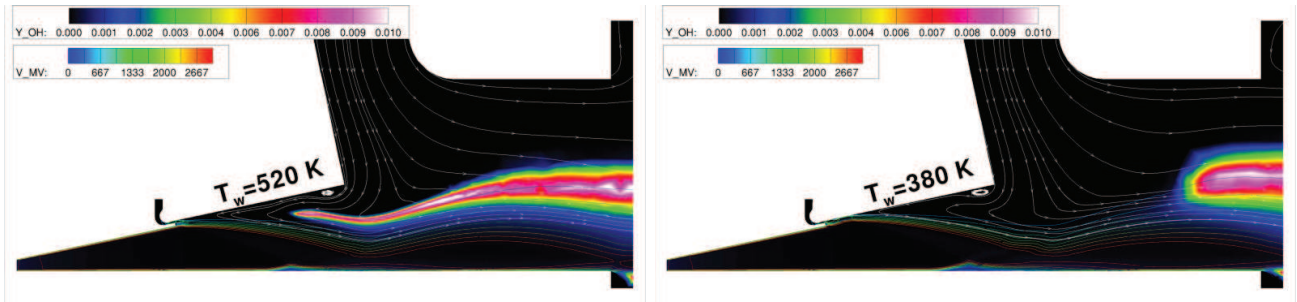


FIGURE E.4 – Champ de fraction massique de OH moyenne, iso-lignes de Mach ($M > 1$) et lignes de courant pour les différentes températures imposées à la paroi

De plus, la comparaison des profils de pression au niveau du divergent figure E.5 montre que la position du décollement est modifiée, le décollement étant plus précoce pour T_p égale à 520 K ce qui est en accord avec une augmentation de la viscosité en proche paroi.

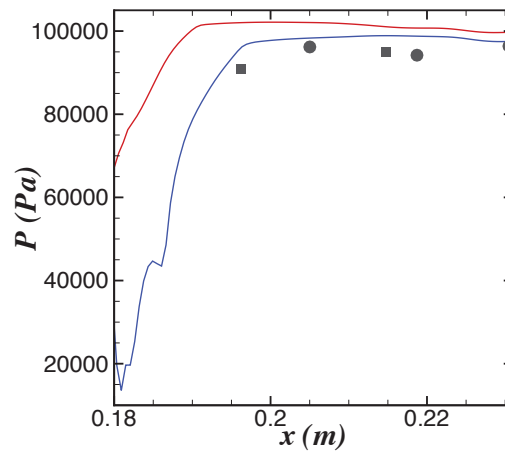


FIGURE E.5 – Profils de pression au niveau de la paroi haute du divergent pour les deux températures de parois retenues (bleu $T_p = 380$ K, rouge $T_p = 520$ K, mesures, symboles)

Ainsi, la température de 520 K a été retenue pour les calculs 3D de telles conditions permettant l'apparition de OH dans le divergent en RANS.

E.2.3 Influence de l'obstacle sur la dynamique de l'écoulement et sur les champs moyens (calculs O)

Sur la figure E.6, on peut observer l'influence de l'obstacle sur les champs moyens obtenus en DDES. Ainsi, contrairement au cas avec obstacle, on voit apparaître une large zone réactive au niveau du culot, entraînée par une large recirculation. De plus, mis à part dans la zone décollée près de la sortie du divergent où deux recirculations sont mises en évidence, il apparaît que la topologie de l'écoulement moyen est très peu modifiée. Ce calcul n'est en revanche pas représentatif d'une suppression de l'obstacle en 3D, l'existence de ce type de recirculation étant due à la non prise en compte du mât. En effet, dans les conditions expérimentales, celui-ci bloque le débit dans la direction longitudinale en amont ce qui tenderait à limiter l'apparition d'un écoulement de culot dans la partie haute du domaine de calcul.

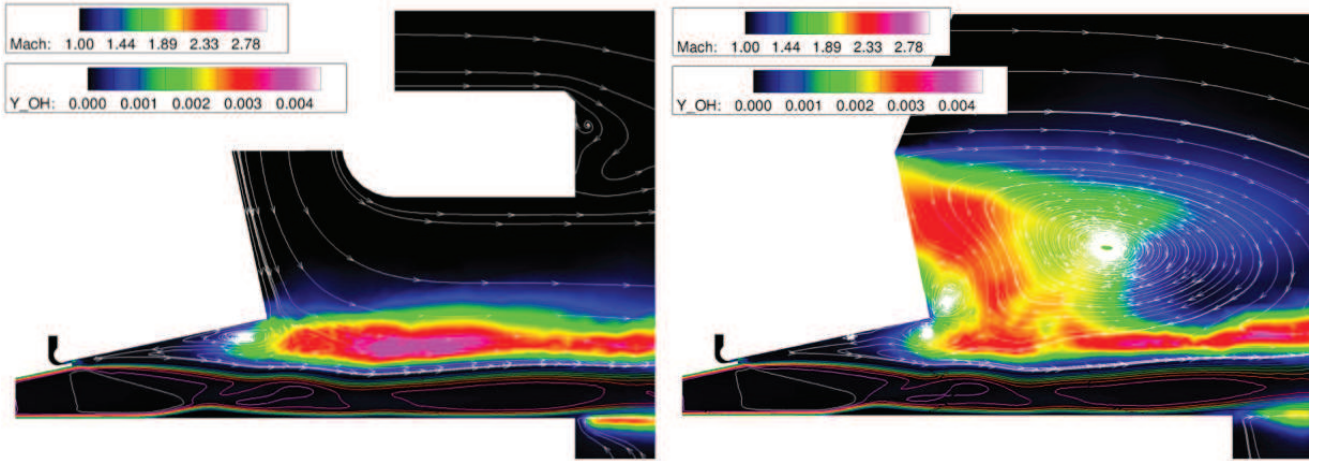


FIGURE E.6 – Champ de fraction massique de OH, iso-lignes de Mach ($M > 1$) et lignes de courant pour les calculs avec et sans obstacle (gauche et droite)

Bien que non représentatifs de la configuration 3D réelle, ces calculs ont pour objectifs de mettre en évidence le rôle joué par l'obstacle dans l'apparition du pic à 1 kHz au niveau des spectres de pression obtenus pour un capteur situé sur la paroi haute du divergent. On peut constater figure E.7 que conformément au cas 3D (section 8.6), le calcul 2D avec obstacle fait apparaître un pic à environ 1200 Hz. Ce pic tend à disparaître lorsque l'on enlève l'obstacle. En effet, on constate une atténuation d'environ 10 dB de l'énergie contenue à basse fréquence, autour de 1 kHz pour le cas sans obstacle. Dans ce cas on voit apparaître une contribution plus importante des fréquences supérieures à 2000 Hz probablement liées à l'écoulement de culot. Enfin, contrairement au cas 3D, on peut néanmoins remarquer la prédominance de fréquences supérieures à 10 kHz. L'origine de ces hautes fréquences n'est pas analysée dans ce mémoire.

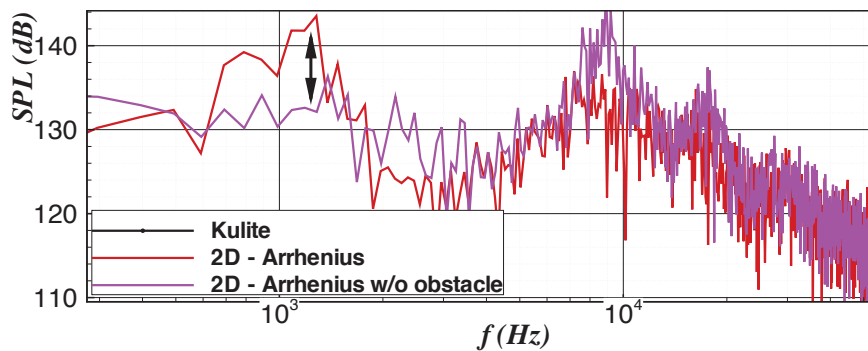


FIGURE E.7 – Comparaison des spectres obtenus au niveau d'un capteur situé sur la paroi haute du divergent pour les calculs DDES avec (traits rouges) et sans obstacle (traits mauves)

Bibliographie

- [1] A. Roux and L. Gicquel and S. Reichstadt and N. Bertier and G. Staffelbach and F. Vuillot and T. J. Poinso. Analysis of unsteady reacting flows and impact of chemistry description in Large Eddy Simulations of side-dump ramjet combustors. *Combust. Flame*, 157 :176–191, 2010.
- [2] R. Abdel-Gayed, D. Bradley, and F. K. K. Lung. Combustion regimes and the straining of turbulent premixed flames. *Combust. Flame*, 76 :213–218, 1989.
- [3] R.G. Abdel-Gayed, D. Bradley, M.N. Hamid, and M. Lawes. Lewis number effects on turbulent burning velocity. In *Proceedings of the 20th International Symposium on Combustion*, volume 20, pages 505–512, 1984.
- [4] C. Angelberger, D. Veynante, and F. Egolfopoulos. LES of Chemical and Acoustic Forcing of a Premixed Dump Combustor. *Flow Turbul. Combust.*, 65(2) :205–222, 2000.
- [5] A. Armellini, F. Coletti, T. Arts, and C. Scholtes. Aerothermal Investigation of a Rib-Roughened Trailing Edge Channel With Crossing-Jets-Part I : Flow Field Analysis. *J. Turbomach.*, 132(1) :011009, 2010.
- [6] C. Bailly and G. Comte-Bellot. *Turbulence*. Sciences et Techniques de l’Ingénieur. CNRS, 2003.
- [7] M. Berglund and C. Fureby. LES of supersonic combustion in a scramjet engine model. *Proc. Combust. Inst.*, 31(2) :2497–2504, 2007.
- [8] N. Bertier. *Simulation des Grandes Echelles en aérothermique sur des maillages non structurés généraux*. Thèse de doctorat, Université Paris 6, France, 2006.
- [9] N. Bertier. Simulations numériques de la chambre PRECCINSTA/Labscale avec le code CEDRE. Rapport technique RT 1/14450 DMAE/DEFA, Onera, 2009.
- [10] M. Besson, P. Bruel, J.L. Champion, and B. Deshaies. Experimental analysis of combustng flows developing over a plane-symmetric expansion. *J. Thermophys. Heat Transfer*, 14(1) :59–67, 2000.
- [11] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, and T. Poinso. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame*, 154(1-2) :2–22, 2008.
- [12] R. Borghi. Mise au point sur la structure des flammes turbulentes. *J. Chim. Phys.*, 81 :361–370, 1984.
- [13] R. Borghi and M. Destriau. *La combustion et les flammes*. Editions Technip, 1998.
- [14] A. Bourgoing and P. Reijasse. ATAC : Etude expérimentale et numérique d’un écoulement supersonique, décollé et dissymétrique dans une tuyère plane. Technical Report RT 59/03590, Onera DAAP/DAFE, 2001.
- [15] A. Bourgoing and P. Reijasse. Experimental analysis of unsteady separated flows in a supersonic planar nozzle. *Shock Waves*, 14(4) :251–258, 2005.
- [16] G. L. Brown and A. Roshko. On density effects and large structure in turbulent mixing layers. *J. Fluid Mech.*, 64 :775–816, 1974.

- [17] G. Bruneaux, T. Poinso, and J. H. Ferziger. Premixed flame-wall interaction in a turbulent channel flow : budget for the flame surface density evolution equation and modelling. *J. Fluid Mech.*, 349 :191–219, 1997.
- [18] V. Brunet. Computational Study of Buffet Phenomenon with Unsteady RANS Equations. In *AIAA Paper*, number 2003-3679, 2003.
- [19] J. P. Burg. Maximum Entropy Spectral Analysis. In D. G. Childers, editor, *Modern Spectrum Analysis*, pages 34–41, New York, 1978. IEEE Press.
- [20] T. D. Butler and P. J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) Combust*, Cambridge, MA, USA, 1976.
- [21] W. Cabot and P. Moin. Approximate wall boundary conditions in the large-eddy simulation of high reynolds number flow. *Flow Turbul. Combust.*, 63 :269–291, 2000.
- [22] S. Candel, G. Herding, R. Snyder, P. Scouffaire, C. Rolon, L. Vingert, M. Habiballah, F. Grisch, M. Péalat, P. Bouchardy, D. Stepowski, A. Cessou, and P. Colin. Experimental investigation of shear coaxial cryogenic jet flames. *J. Propul. Power*, 14(5) :826–834, 1998.
- [23] S. Candel, M.P. Juniper, G. Singla, P. Scouffaire, and C. Rolon. Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Comb. Sci. Technol.*, 178((1-3)) :161–192, 2006.
- [24] CERFACS. *The AVBP Handbook*.
- [25] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A Power-Law Flame Wrinkling Model for LES of Premixed Turbulent Combustion, Part I : Non-Dynamic Formulation and Initial Tests. *Combust. Flame*, 131 :159–180, 2002.
- [26] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A Power-Law Flame Wrinkling Model for LES of Premixed Turbulent Combustion, Part II : Dynamic Formulation. *Combust. Flame*, 131 :181–197, 2002.
- [27] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. Cépadués-Editions, 2000.
- [28] N. Chauvet, S. Deck, and L. Jacquin. Zonal Detached Eddy Simulation of a Controlled Propulsive Jet. *AIAA J.*, 45(10) :2458–2473, 2007.
- [29] C.L. Chen and S.R. Chakravarthy. Numerical investigation of separated nozzle flows. *AIAA J.*, 32(9) :1836–1843, 1994.
- [30] P. Chevalier, B. Courbet, D. Dutoya, P. Klotz, E. Ruiz, J. Troyes, and P. Villedieu. CEDRE : Development and Validation of a Multiphysic Computational Software. In *1st European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, 2005.
- [31] J.-Y. Choi, F. Ma, and V. Yang. Combustion oscillations in a scramjet engine combustor with transverse fuel injection. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2851–2858, 2005.
- [32] J.-Y. Choi, V. Yang, F. Ma, S.-H. Won, and I.-S. Jeung. Detached Eddy Simulation of Combustion Dynamics in Scramjet Combustors. In *AIAA Paper*, number 2007-5027, 2007.
- [33] J. M. Chomaz, P. Huerre, and L. G. Redekopp. Bifurcation to local and global modes in spatially developing flows. *Phys. Rev. Lett.*, 60(1) :25–28, 1988.
- [34] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A Thickened Flame Model for Large Eddy Simulations of Turbulent Premixed Combustion. *Phys. Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.
- [35] M. O' Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook. A comprehensive modeling study of Hydrogen Oxidation. *Int. J. Chem. Kinet.*, 36 :603–622, 2004.

- [36] R. Courtois. *Simulation aux grandes échelles de l'écoulement dans une chambre de combustion en forme de marche descendante (french)*. PhD thesis, École Centrale Paris, France, 2005.
- [37] B. Cuenot and T. Poinso. Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion flames. In *Proceedings of the 25th International Symposium on Combustion*, volume 25, pages 1383–1390, 1994.
- [38] L. Davidson. Hybrid LES-RANS : back scatter from a scale-similarity model used as forcing. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 367 :2905–2915, 2009.
- [39] L. Davidson and S. H. Peng. Hybrid LES-RANS modelling : a one-equation SGS model combined with a $k\text{-}\omega$ model for predicting recirculating flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 43 :1003–1018, 2003.
- [40] J.W. Deardoff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at Large Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 41 :453–465, 1970.
- [41] S. Deck. *Simulation Numérique des Charges Latérales Stationnaires sur des Configurations de Lanceurs*. PhD thesis, Université d'Orléans, France, 2002.
- [42] S. Deck. Numerical simulation of transonic buffet over a supercritical airfoil. *AIAA J.*, 43(7) :1556–1566, 2005.
- [43] S. Deck. Zonal Detached Eddy Simulation of the Flow Around a High-Lift Configuration. *AIAA J.*, 43(11) :2372–2384, 2005.
- [44] S. Deck. Delayed detached eddy simulation of the end - effect regime and side-loads in an overexpanded nozzle flow. *Shock waves*, 19 :239–249, 2009.
- [45] S. Deck, P. Duveau, P. d'Espiney, and P. Guillen. Development and Application of Spalart Allmaras one equation turbulence model to three-dimensional supersonic complex configurations. *Aerosp. Sci. Technol.*, 6(3) :171–183, 2002.
- [46] S. Deck, E. Garnier, and P. Guillen. Turbulence modelling applied to space launcher configurations. *J. Turbul.*, 3(57) :1–21, 2002.
- [47] S. Deck and P. Guillen. Numerical Simulation of Side Loads in an Ideal Truncated Nozzle. *J. Propul. Power*, 18(2) :261–269, 2002.
- [48] S. Deck, R. Hallard, and P. Guillen. Numerical simulations of steady and unsteady nozzle flows. In *AIAA Paper*, number 2002-0406, 2002.
- [49] S. Deck and T. Nguyen. Unsteady Side Loads in a Thrust Optimized Contour Nozzle at Hysteresis regime. *AIAA J.*, 42(9) :1878–1888, 2004.
- [50] S. Deck and P. Thorigny. Unsteadiness of an axisymmetric separating-reattaching flow : Numerical investigation. *Phys. Fluids*, 19-065103(6), 2007.
- [51] S. Deck, P. E. Weiss, M. Pamies, and E. Garnier. *On the Use of Stimulated Detached Eddy Simulation (SDES) for Spatially Developing Boundary Layers*, pages 67–76. Advances in Hybrid RANS-LES Modelling, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design. Springer, 2008.
- [52] O. Dessornes and D. Scherrer. Tests of the JAPHAR dual mode ramjet engine. *Aerosp. Sci. Technol.*, 9(3) :211–221, 2005.
- [53] M. Ditaranto and J. Hals. Combustion instabilities in sudden expansion oxy-fuel flames. *Combust. Flame*, 146(3) :493–512, 2006.

- [54] R. Gonçalves dos Santos, M. Lecanu, S. Ducruix, O. Gicquel, E. Iacona, and D. Veynante. Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combust. Flame*, 152(3) :387–400, 2007.
- [55] E.R. Van Driest. Turbulent boundary layer in compressible fluids. *Journal of Aeronautical Sciences*, 18(3), 1951.
- [56] D.M. Driver, H.L. Seegmiller, and J. Marvin. Time dependent behaviour of a reattaching shear layer. *AIAA J.*, 25 :914–927, 1987.
- [57] J. P. Drummond and M. Y. Hussaini. Numerical Simulation of a Supersonic Reacting Mixing Layer. In *AIAA Paper*, number 87-1325, 1987.
- [58] M. Dusing, A. Sadiki, and J. Janicka. Towards classification of models for numerical simulation of premixed combustion using a generalized regime diagram. *Combust. Theor. Model.*, 10, 2006.
- [59] J.-P. Dussauge, P. Dupont, and J.-F. Debiève. Unsteadiness in Shock Wave boundary layer interactions with separation. *Aerosp. Sci. Technol.*, 10(2) :85–91, 2005.
- [60] D. R. Ecklund, J. P. Drummond, and H. A. Hassan. Calculation of Supersonic Turbulent Reacting Coaxial Jets. *AIAA J.*, 28(9) :1633–1641, 1990.
- [61] T. C. Fan, X. Xiao, J. R. Edwards, and H. A. Hassan. Blending Functions in Hybrid Large-Eddy/Reynolds-Averaged Navier-Stokes Simulations. *AIAA J.*, 42(12) :897–906, 2004.
- [62] J. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 3rd edition edition, 2002.
- [63] M. Frey and G. Hagemann. Restricted Shock Separation in Rocket Nozzles. *J. Propul. Power*, 16(3) :478–484, 2000.
- [64] J. Frohlich and D. von Terzi. Hybrid LES/RANS methods for the simulation of turbulent flows. *Prog. Aerosp. Sci.*, 44 :349–377, 2008.
- [65] C. Fureby. Large Eddy Simulation of Rearward Facing Step Flow. *AIAA J.*, 37(11) :1401–1410, 1999.
- [66] C. Fureby. A computational study of combustion instabilities due to vortex shedding. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :783–791, 2000.
- [67] C. Fureby. Comparison of Flamelet and Finite Rate Chemistry LES for Premixed Turbulent Combustion. In *AIAA Paper*, number 2007-1413, 2007.
- [68] C. Fureby. Large eddy simulation modelling of combustion for propulsion applications. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 367 :2957–2969, 2009.
- [69] D. Gaffié, U. Wepler, P. Magre, W. Koschel, and P. Novelli. Numerical investigation of supersonic reacting hydrogen jets in a hot air coflow. In *AIAA Paper*, number 2001-1864, 2001.
- [70] A.R. Ganji and R.F. Sawyer. Experimental study of the flowfield of a two-dimensional premixed turbulent flame. *AIAA J.*, 18(7) :817–824, 1980.
- [71] E. Garnier. Stimulated Detached Eddy Simulation of three-dimensionnal shock/boundary layer interaction. *Shock Waves*, 19(6) :479–486, 2009.
- [72] E. Garnier, N. Adams, and P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Compressible flows*. Springer-Verlag, Scientific Computation series, 2009.
- [73] E. Garnier, M. Mossi, P. Sagaut, P. Comte, and M. Deville. On the use of Shock-Capturing Schemes for Large-Eddy Simulation. *J. Comput. Phys.*, 153(2) :273–311, 1999.

-
- [74] E. Garnier, P. Sagaut, and M. Deville. Large eddy simulation of shock/boundary-layer interaction. *AIAA J.*, 40(10) :1935–1944, 2002.
- [75] C. W. Gear. *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. Prentice Hall, NJ, USA, 1971.
- [76] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3(7) :1760–1765, 1991.
- [77] A. Gross and C. Weiland. Numerical Simulation of Hot Gas Nozzle Flows. *J. Propul. Power*, 20(5) :879–891, 2004.
- [78] A. Gross and C. Weiland. Numerical Simulation of Separated Cold Gas Nozzle Flows. *J. Propul. Power*, 20(3) :509–519, 2004.
- [79] Ph. Guillen and M. Dormieux. Design of a 3D multidomain Euler code. In *Supercomputing in fluid flow*, pages 21–39. Computational Mechanics, Inc., 1993.
- [80] M. Habiballah, M. Orain, F. Grisch, L. Vingert, and P. Gicquel. Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the Mascotte facility. *Comb. Sci. Technol.*, 178(1-3) :101–128, 2006.
- [81] A. Hadjadj, A. N. Kudryavtsev, and M. S. Ivanov. Numerical Investigation of Shock-Reflection Phenomena in Overexpanded Supersonic Jets. *AIAA J.*, 42(3) :570–577, 2004.
- [82] A. Hadjadj and M. Onofri. Nozzle flow separation. *Shock Waves*, 19 :163–169, 2009.
- [83] G. Hagemann, J. Alting, J. Kretschmer, M. Terhardt, M. Frey, R. Ryden, and R. Stark. The Calorimeter Nozzle Programme. In *AIAA Paper*, number 2002-3998, 2002.
- [84] G. Hagemann, A. Preuss, F. Gauer, M. Frey, J. Kretschmer, R. Ryden, K. Jensen, R. Stark, and D. Zerjeski. Flow Separation and Heat Transfer in High Area Ratio Nozzles. In *AIAA Paper*, number 2004-3684, 2004.
- [85] F. Haider. *Discrétisation en maillage non structuré général et application à la LES*. PhD thesis, Université Paris 6, 2009.
- [86] F. Haider, J. P. Croisille, and B. Courbet. Stability analysis of the cell-centered finite-volume MUSCL method on unstructured grids. *Numerische Mathematik*, 113(4) :555–600, 2009.
- [87] R. Hallard, S. Deck, and M. Ledoux. ATAC : Simulations numériques des écoulements dans les tuyères surdétendues. Cas test S8Ch. Technical Report RTS 57/00144, Onera DAFE/DAAP, 2000.
- [88] R. Hilbert, F. Tap, H. El Rabii, and D. Thévenin. Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations. *Prog. Ener. Comb. Sci.*, 30 :61–117, 2004.
- [89] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*. Butterworth-Heinemann (Elsevier), 2nd edition edition, 2007.
- [90] P. Huerre and P. A. Monkewitz. Local and global instabilities in spatially developing flows. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 22 :473–537, 1990.
- [91] T. J. R. Hughes, L. Mazzei, and K. E. Jansen. Large eddy simulation and the variational multiscale method. *Comput. Vis. Sci.*, 3 :47–59, 2000.
- [92] T. J. R. Hughes, A. A. Oberai, and L. Mazzei. Large Eddy Simulation of turbulent channel flows by the variational multiscale method. *Phys. Fluids*, 13 :1784–1799, 2001.
- [93] J. Jeong and F. Hussain. On the identification of a vortex. *J. Fluid Mech.*, 285 :69–94, 1995.
- [94] J. Jimenez, J.C. Del Alamo, and O. Flores. The large-scale dynamics of near-wall turbulence. *J. Fluid Mech.*, 505(179-199), 2004.

- [95] W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer*, pages 301–314, 1972.
- [96] T. Kanda, T. Hiraiwa, T. Mitani, S. Tomioka, and N. Chinzei. Mach 6 testing of a scramjet engine model. *J. Propul. Power*, 13(4) :543–551, 1997.
- [97] T. Kanda, T. Sunami, S. Tomioka, K. Tani, and T. Mitani. Mach 8 testing of a scramjet engine model. *J. Propul. Power*, 17(1) :132–138, 2001.
- [98] J.O. Keller, J. W. Daily, A. F. Ghoniem, G. L. Hubbard, D. Korschelt, A. K. Oppenheim, and L. Vanefeld. Mechanism of instabilities in turbulent combustion leading to flashback. *AIAA J.*, 20(2) :254–262, 1982.
- [99] J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 177 :133–166, 1987.
- [100] M. Kiya and K. Sasaki. Structure of a turbulent separation bubble. *J. Fluid Mech.*, 137 :83–113, 1983.
- [101] S. J. Kline, W. C. Reynolds, F. A. Schraub, and P. W. Runstadler. The structure of turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 30 :741–773, 1967.
- [102] R. Knikker, D. Veynante, J. Rolon, and C. Meneveau. Planar Laser Induced Fluorescence in a Turbulent Premixed Flame to Analyze Large Eddy Simulation Models. In *Tenth International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, 2000.
- [103] G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinsot, and M. Oschwald. Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame*, 156 :1166–1180, 2009.
- [104] B. Lakshmanan and K. Abdol-Hamid. Investigation of supersonic Jet Plumes using an Improved Two-Equation Turbulence Model. *J. Propul. Power*, 10(5) :736–741, 1994.
- [105] L. Larcheveque, P. Sagaut, T.-H. Lê, and P. Comte. Large-eddy simulation of a compressible flow in a three-dimensional open cavity at high Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 516 :265–301, 2004.
- [106] B. E. Launder and B.I Sharma. Application of the Energy Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow near a Spinning Disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1 :131–137, 1974.
- [107] A. Laverdant. Synthèse des résultats obtenus sur les instabilités de combustion pour une installation de type marche (expérience du LAERTE - banc MICAEDI). Technical Report RT 1/14739, Onera, Décembre 2008.
- [108] H. Le, P. Moin, and J. Kim. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. *J. Fluid Mech.*, 330 :349–374, 1997.
- [109] I. Lee and H. J. Sung. Characteristics of wall pressure fluctuations in separated and reattaching flows over a backward-facing step. *Exp. Fluids*, 30 :262–272, 2001.
- [110] B. Van Leer. *Flux-vector splitting for Euler equations*, volume 170/1982 of *Lecture Notes in Physics*, pages 507–512. Springer Berlin / Heidelberg, 1982.
- [111] J. P. Legier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the Summer Program 2000*, pages 157–168, Stanford, USA, 2000. Center for Turbulence Research.
- [112] M. Lesieur. *Turbulence in Fluids*. Fluid Mechanics and Its Applications. Springer, Berlin, 2008.
- [113] P. Magre, G. Collin, and P. Bouchardy. Application de la DRASC à l’opération A3C. Technical Report RTS 4/3608 EY, Onera OE, 1992.

-
- [114] I. Mary and P. Sagaut. Large eddy simulation of flow around an airfoil near stall. *AIAA J.*, 40(6) :1139–1145, 2002.
- [115] M. Masquelet and S. Menon. Large Eddy Simulation of Flame-Turbulence Interactions in a GH2-GO2 Shear Coaxial Injector. In *AIAA Paper*, number 2008-5030, 2008.
- [116] C. Meneveau and T. Poinso. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *J. Fluid Mech.*, 86 :311, 1991.
- [117] F. R. Menter. Zonal two-equation k-omega turbulence models for aerodynamic flows. In *AIAA Paper*, number 1993-2906, 1993.
- [118] F. R. Menter, M. Kuntz, and R. Bender. A Scale-Adaptative Simulation Model for Turbulent Flow Predictions. In *AIAA Paper*, number 2003-767, 2003.
- [119] F.R. Menter and M. Kuntz. Adaptation of eddy viscosity turbulence models to unsteady separated flow behind vehicles. In *The aerodynamics of heavy vehicles : trucks, buses, and trains*, volume 19 of *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*. Springer, 2002.
- [120] B. Michel, P. Gajan, A. Strzelecki, N. Savary, A. Kourta, and H.-C. Boisson. Full coverage film cooling using compound angle. *C. R. Mec.*, 337(6-7) :562–572, 2009.
- [121] P. Moin and K. Mahesh. Direct numerical simulation : a tool in turbulent research. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 30(539-578), 1998.
- [122] P. Moreau, J. Labbe, F. Dupoirieux, and R. Borghi. Experimental and numerical study of a turbulent recirculation zone with combustion. In *5th Symposium on turbulent shear flow*, Ithaca, NY, USA, 1985.
- [123] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-PDF modeling. *Combust. Flame*, (158) :1340–1357, 2011.
- [124] S.P. Nandula, R.W. Pitz, R.S. Barlow, and G.J. Fiechtner. Rayleigh-Raman-LIF measurments in a turbulent lean premixed combustor. In *34th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Renon, Nevada, USA, 1996.
- [125] F. Nasuti and M. Onofri. Shock structure in separated nozzle flows. *Shock Waves*, 19 :229–237, 2009.
- [126] L.H. Nave and G. A. Coffey. Sea level side-loads in high area ratio rocket engines. In *AIAA Paper*, number 73-1284, 1973.
- [127] A. Silveira Neto, D. Grand, O. Metais, and M. Lesieur. A numerical investigation of the coherent vortices in turbulence behind a backward-facing step. *J. Fluid Mech.*, 256 :1–25, 1993.
- [128] A.T. Nguyen, H. Deniau, S. Girard, and T. Alziary de Roquefort. Unsteadiness of Flow Separation and End-Effects Regime in a Thrust-Optimized Contour Rocket Nozzle. *Flow Turbul. Combust.*, 71(1-4) :161–181, 2003.
- [129] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid - scale stress tensor modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow Turbul. Combust.*, 62(3) :183–200, 1999.
- [130] C. Nottin, R. Knikker, M. Boger, and D. Veynante. Large Eddy Simulations of an acoustically excited turbulent premixed flame. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :67–73, 2000.
- [131] Onera. Manuel utilisateur CEDRE 3.2. Technical report, Onera, 2008.

- [132] G. Ordonneau, P. Grenard, and A. Leguen. ATAC-Simulation numérique bidimensionnelle de l'écoulement surdétendu de gaz réactifs dans une tuyère décollée. Technical Report RT 1/09645, Onera DAFE/DEFA, 2005.
- [133] G. Ordonneau, P. Hervat, F. Grisch, L. Vingert, and P. Reijasse. PLIF Investigation of Reactive Flows in the Separation Region of an Over-expanded Two-Dimensional Nozzle. In *AIAA Paper*, number 2006-5209, 2006.
- [134] M. Pamies, P. E. Weiss, E. Garnier, S. Deck, and P. Sagaut. Generation of synthetic turbulent inflow data for large eddy simulation of spatially evolving wall-bounded flows. *Phys. Fluids*, 21(4), 2009.
- [135] D. Papamoschou, A. Zill, and A. Johnson. Supersonic flow separation in planar nozzles. *Shock waves*, 19 :171–183, 2009.
- [136] Y. Perrot and A. Hadjadj. Computational Study of Nozzle Flow Separation with Film Injection. In *AIAA Paper*, number 2006-3029, 2006.
- [137] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *Proceedings of the 21st International Symposium on Combustion*, volume 21, pages 1231–1250, 1986.
- [138] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *J. Fluid Mech.*, 384(01) :107–132, 1999.
- [139] N. Peters and F. A. Williams. The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames. *Combust. Flame*, 67 :185–208, 1987.
- [140] U. Piomelli. Wall-layer models for Large-Eddy simulations. *Prog. Aerosp. Sci.*, 44 :437–446, 2008.
- [141] U. Piomelli and E. Balaras. Wall-layer models for Large-Eddy simulations. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 34 :349–374, 2002.
- [142] U. Piomelli, K. Squires, D. Laurence, E. Balaras, R. Verzicco, and C. Higgins. Large Eddy Simulation and Related Techniques. In *VKI Lecture Series 2008*, 2008.
- [143] U. Piomelli, Y. Yu, and R. J. Adrian. Subgrid-scale energy transfer and near-wall turbulence structure. *Phys. Fluids*, 8(1) :215–224, 1996.
- [144] H. Pitsch. Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 38 :453–482, 2006.
- [145] H. Pitsch and L. Duchamp de Lageneste. Large eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level set approach. *Proc. Combust. Inst.*, 29 :2001–2008, 2002.
- [146] R. W. Pitz and J. W. Daily. Combustion in a Turbulent Mixing Layer Formed at a Rearward-Facing Step. *AIAA J.*, 21(11) :1565–1570, 1983.
- [147] T. Poinso. Using Direct Numerical Simulation to understand turbulent premixed combustion. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, volume 26, pages 219–232, 1996.
- [148] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101(1) :104–129, 1992.
- [149] T. Poinso, A. Trounev, D. Veynante, S. Candel, and E. Esposito. Vortex-driven acoustically coupled combustion instabilities. *J. Fluid Mech.*, 177 :265–292, 1987.
- [150] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical Numerical Combustion*. Edwards, 2001.
- [151] T. Poinso, D. Veynante, and S. Candel. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *J. Fluid Mech.*, 228 :561–606, 1991.

- [152] T. J. Poinso, D. C. Haworth, and G. Bruneaux. Direct Simulation and Modelling of Flame-Wall Interaction for Premixed Turbulent Combustion. *Combust. Flame*, 95(1-2) :118–132, 1993.
- [153] S. B. Pope. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New J. Phys.*, 35, 2004.
- [154] S.B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [155] T. H. Pulliam. Time accuracy and the Use of Implicit Methods. In *AIAA Paper*, number 1993-3360, 1993.
- [156] S. Reichstadt. *Etude du mélange et de la combustion monophasique dans un statoréacteur de recherche*. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l’Adour, France, 2007.
- [157] P.-H. Renard, D. Thevenin, J.-C. Rolon, and S. Candel. Dynamics of flame/vortex interactions. *Prog. Ener. Comb. Sci.*, 26 :225–282, 2000.
- [158] G. Ribert, M. Champion, O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Veynante. Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry. *Combust. Flame*, 141 :271–280, 2005.
- [159] J. Riou, E. Garnier, and C. Basdevant. Compressibility effects on the vortical flow over a 65° sweep delta wing. *Phys. Fluids*, 22(3), 2010.
- [160] J. Riou, E. Garnier, S. Deck, and C. Basdevant. Improvement of Delayed Detached Eddy Simulation Applied to Separated Flow Over Missile Fin. *AIAA J.*, 47(2) :345–360, 2009.
- [161] V. Robin, N. Guilbert, A. Mura, and M. Champion. Modélisation de la combustion turbulente des mélanges hétérogènes en richesse. Application au calcul d’une flamme stabilisée par l’élargissement brusque d’un canal bidimensionnel. *C. R. Mec.*, 338 :40–47, 2010.
- [162] A. Roux, L.Y.M. Gicquel, Y. Sommerer, and T. Poinso. Large eddy simulation of mean and oscillating flow in side-dump ramjet combustor. *Combust. Flame*, 152(1-2) :154–176, 2008.
- [163] A. Roux, S. Reichstadt, N. Bertier, L. Gicquel, F. Vuillot, and T. Poinso. Comparison of numerical methods and combustion models for les of a ramjet. *C. R. Mec.*, 337(6-7) :352–361, 2009.
- [164] O. Rouzaud, L. Tesse, T. Soubrie, A. Soufiani, P. Riviere, and D. Zeitoun. Influence of Radiative Heating on a Martian Orbiter. *J. Thermophys. Heat Transfer*, 22(1) :10–19, 2008.
- [165] V. Sabel’nikov and F. Grisch. Instabilities and Structure of turbulent Premixed Flame in a Lean Stepped Combustor. In *ISABE*, number 2005-1059, 2005.
- [166] P. Sagaut. *Large-eddy simulation for incompressible flows - An introduction, third edition*. Springer-Verlag, Scientific Computation series, 2005.
- [167] P. Sagaut and S. Deck. Large eddy simulation for aerodynamic : status and perspectives. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 367 :2849–2860, 2009.
- [168] P. Sagaut, S. Deck, and M. Terracol. *Multiscale and Multiresolution Approaches in Turbulence*. Imperial College Press, 2006.
- [169] B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. Delayed Detached Eddy Simulation of a Premixed Methane - Air Flame behind a Backward-Facing Step. In *AIAA Paper*, number 2008-5134, 2008.
- [170] B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. On the use of DES methods for reactive flows. In *2nd Workshop INCA*, Rouen, France, october 2008.

- [171] B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. A DES method applied to a Backward Facing Step reactive flow. *C. R. Mec.*, 337(6-7) :340–351, 2009.
- [172] B. Sainte-Rose, N. Bertier, S. Deck, and F. Dupoirieux. DES of a Premixed Methane-Air Flame using a DTF approach. In *4th European Combustion Meeting*, Vienna, Austria, April 2009. Combustion Institute.
- [173] B. Sainte-Rose, N. Bertier, and F. Dupoirieux. Numerical Simulation of a Reactive Flow in an Overexpanded Nozzle. In *6th Aerothermodynamics of Space Vehicles*. ESA, November 2008.
- [174] M. V. Salvetti, B. Koobus, S. Camarri, and A. Dervieux. Simulation of bluff-body flows through a hybrid RANS/VMS-LES model. In *Proceedings of the IUTAM Symposium on Unsteady Separated Flows and their control*, Corfu, Greece, 2007.
- [175] J. Savre. *Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2010.
- [176] J. Savre, N. Bertier, Y. D’ Angelo, and D. Gaffié. A chemical time scale approach for FPI modeling. *C. R. Mec.*, 336(11-12) :807–812, 2008.
- [177] R. Schiestel. *Les écoulements turbulents : modélisation et simulation*. Hermes, 1998.
- [178] 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.*, 570 :17–46, 2007.
- [179] T. Schmitt, L. Selle, B. Cuenot, and T. Poinsot. Large-Eddy Simulation of transcritical flows. *C. R. Mec.*, 337 :528–538, 2009.
- [180] M. Shur, P. Spalart, M. Strelets, and A. Travin. A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 29 :1638–1649, 2008.
- [181] F. Simon, S. Deck, P. Guillen, R. Cayzac, and A. Merlen. Zonal Detached Eddy Simulation of Projectiles in the Subsonic and Transonic Regimes. *AIAA J.*, 45(7) :1606–1619, 2007.
- [182] F. Simon, S. Deck, P. Guillen, P. Sagaut, and A. Merlen. Numerical simulation of the compressible mixing layer past an axisymmetric trailing edge. *J. Fluid Mech.*, 591 :215–253, 2007.
- [183] G. Singla, P. Scoufflaire, C. Rolon, and S. Candel. Planar Laser-induced fluorescence of *OH* in high pressure cryogenic *LOx/GH₂* jet flames. *Combust. Flame*, 144(1-2) :151–169, 2006.
- [184] A. Sjunneson, S. Olovsson, and B. Sjöblom. Validation Rig – A Tool for Flame Studies. Technical Report 9370-308, Volvo Aero AB, S-461 81, Trollhättan, Sweden, 1991.
- [185] J. Smagorinsky. General Circulation Experiments with the primitive equations. *Mon. Weather Rev.*, 91(3) :99–165, 1963.
- [186] A. Smirnov, S. Shi, and I. Celik. Random flow generation techniques for Large Eddy Simulation and Particle-Dynamics Modeling. *J. Fluids Eng.*, 123(2) :359–371, 2001.
- [187] P. Spalart. Young-Person’s guide to Detached-Eddy Simulation Grids. Technical report, NASA, 2001.
- [188] P. R. Spalart. Detached Eddy Simulation. *Ann. Rev. Fluid. Mech.*, 41 :181–202, 2009.
- [189] P.R Spalart and S.R. Allmaras. A one equation turbulence model for aerodynamic flows. *La Recherche Aérospatiale*, 1 :5–21, 1992.

- [190] P.R. Spalart, S. Deck, M.L. Shur, K.D. Squires, M. Kh. Strelets, and A. Travin. A new version of detached-eddy simulation, resistant to ambiguous grid densities. *Theoretical Computational Fluid Dynamics*, 20 :181–195, 2006.
- [191] P.R. Spalart, W.-H. Jou, M. Strelets, and S.R. Allmaras. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach. In *1st AFOSR international conference on DNS/LES*, pages 137–147, Ruston, LO, USA, 1997.
- [192] C. G. Speziale. Turbulence Modeling for Time-Dependent RANS and VLES : A review. *AIAA J.*, 36(2) :173–184, 1998.
- [193] M. Strelets. Detached-Eddy Simulation of Massively Separated Flows. In *AIAA Paper*, number 2001-0879, 2001.
- [194] C. K. W. Tam. Discrete tones of isolated airfoils. *J. Acoust. Soc. Am.*, 55(6) :1173–1177, 1974.
- [195] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A first course in turbulence*. MIT press, 1st edition, 1972.
- [196] D. Thibaut and S. Candel. Numerical Study of Unsteady Turbulent Premixed Combustion. *Combust. Flame*, 113 :53–65, 1998.
- [197] T. Tomita, M. Takahashi, M. Sasaki, H. Sakamoto, M. Takahashi, and H. Tamura. Experimental evaluation of side loads-loads in LE-7A prototype engine nozzle. *Shock Waves*, 19 :213–228, 2009.
- [198] S. Trapier, S. Deck, and P. Duveau. Delayed Detached-Eddy Simulation and Analysis of Supersonic Inlet Buzz. *AIAA J.*, 46(1) :118–131, 2008.
- [199] A. Travin, M. Shur, M. Strelets, and P. Spalart. Detached-eddy simulations past a circular cylinder. *Flow Turbul. Combust.*, 63(293-313), 2000.
- [200] L. Vervisch and D. Veynante. Interlinks between approaches for modeling turbulent flames. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :175–183, 2000.
- [201] D. Veynante and R. Knikker. Comparison between LES results and experimental data in reacting flows. *J. Turbul.*, 7 :1–20, 2006.
- [202] D. Veynante, J. Piana, J. M. Duclos, and C. Martel. Experimental analysis of flame surface density models for premixed turbulent combustion. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, pages 413–420, 1996.
- [203] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modelling. *Prog. Ener. Comb. Sci.*, 28 :193–266, 2002.
- [204] A. W. Vreman. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : algebraic theory and application. *Phys. Fluids*, 16 :3670–3681, 2004.
- [205] T.-S. Wang. Transient three-dimensionnal startup side load analysis of a regeneratively cooled nozzle. *Shock Waves*, 19 :10.1007/s00193–009–0201–2, 2009.
- [206] P. E. Weiss, S. Deck, J.-C. Robinet, and P. Sagaut. On the dynamics of axisymmetric turbulent separating/reattaching flows. *Phys. Fluids*, 21-075103, 2009.
- [207] P. D. Welch. The use of fast fourier transform for the estimation of power spectra : A method based on time averaging over short modified periodograms. *IEEE Trans. Audio. Electroacoustic*, AU-15(2) :70–73, June 1967.
- [208] H.G. Weller, G. Tabor, A.D. Gosman, and C. Fureby. Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer. *Proc. Combust. Inst.*, 27 :899–907, 1998.

- [209] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. Prediction of laminar flame properties of methanol-air mixtures. *Combust. Flame*, 37 :171–192, 1980.
- [210] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon. *Comb. Sci. Technol.*, 2 :31–43, 1981.
- [211] D. C. Wilcox. Reassessment of the Scale-determining Equation for Advanced Turbulence Models. *AIAA J.*, 26(11) :1299–1310, 1988.
- [212] F. A. Williams. *Combustion theory*. Westview Press, 2nd edition, 1994.
- [213] Q. Xiao, H. M. Tsai, and D. Papamoschou. Numerical investigation of Supersonic Nozzle Flow Separation. *AIAA J.*, 45(3) :532–541, 2007.
- [214] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 26 :27–34, 1996.
- [215] E. E. Zukoski. *Flame stabilization on bluff bodies at low and intermediate Reynolds numbers*. PhD thesis, California Institute of Technology, 1954.