

# THÈSE

Pour l'obtention du Grade de  
DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE  
MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE  
( Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006 )

Ecole Doctorale : SI MMEA, Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et  
Aéronautique

Secteur de Recherche : Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par:

**João Marcelo VEDOVOTO**

\*\*\*\*\*

## **Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using a hybrid LES / PDF methodology**

\*\*\*\*\*

Directeurs de Thèse : **Arnaud MURA** et **Aristeu da SILVEIRA NETO**

\*\*\*\*\*

Soutenue le 18 Novembre 2011 devant la commission d'examen

\*\*\*\*\*

### **- Jury -**

M. P. HALDENWANG,  
M. D.A. RADE,  
M. J. REVEILLON,  
M. F.J. SOUZA,  
M. L.F. FIGUEIRA DA SILVA,  
M. A. DA SILVEIRA NETO,  
M. A. MURA,

Professeur Université de Provence Marseille, Rapporteur  
Professeur UFU Uberlandia, Rapporteur  
Professeur Université de Rouen, President  
Professeur UFU Uberlandia, Examineur  
Professeur PUC-Rio, Rio de Janeiro, Examineur  
Professeur UFU, Uberlandia, Examineur  
Chargé de Recherche au CNRS, Institut P', Poitiers, Examineur

## Résumé

Ce travail de Thèse est consacré au développement d'une approche numérique permettant de conduire des simulations "low Mach number" d'écoulements réactifs. L'algorithme d'intégration retenu pour procéder à la résolution des équations de transport repose sur une méthode implicite de prédiction-corrrection (méthode de projection). Une contrainte physique est retenue pour garantir que le champ de vitesse est résolu correctement. Le code de calcul est soumis à plusieurs séries de vérifications préliminaires basées sur l'emploi de la méthode solution manufacturées pour des conditions incompressibles d'abord puis à masse volumique variable qui permettent de statuer quant à la bonne implémentation des schémas numériques retenus. Les performances de l'outil numérique en terme de stabilité et de robustesse sont elles-aussi analysées dans des situations simples: couche de mélange à densité variable en développement spatial et temporel. Le modèle numérique final repose sur l'emploi d'une méthode hybride LES / PDF. Pour ce qui concerne la représentation de la turbulence, deux fermetures sont implémentées pour représenter l'effet des fluctuations de vitesse non résolues. Il s'agit du modèle de Smagorinsky dans sa version dynamique ou non. La spécification de conditions aux limites turbulentes réalistes est elle-aussi analysée en détail et trois approches différentes sont considérées. Pour ce qui concerne la combustion, l'influence des fluctuations de composition aux échelles non résolues est pris en compte par le biais d'une résolution de la PDF scalaire de sous maille. Le modèle de PDF correspondant repose sur l'emploi d'une méthode de Monte Carlo. Des équations différentielles stochastiques, équivalentes aux équations de Fokker-Planck, sont résolues pour la variable de progrès de la réaction chimique. L'objectif final est aussi de pouvoir procéder, à moyen terme, à des simulations LES en géométries complexes et l'emploi du calcul distribué est essentiel. De ce point de vue, la méthode de décomposition de domaine retenue dans ce travail montre des niveau de performances relativement satisfaisants. Les capacités du modèle numérique résultant de ces développements sont illustrées sur deux configurations expérimentales. La première géométrie correspond à un écoulement très fortement turbulent de réactifs pré-mélangés dans un canal bidimensionnel. La seconde correspond à un jet rapide et non confiné de réactifs pré-mélangés.

*Mots-Clés: Combustion turbulente Prémélangée, Simulation des Grandes Échelles, Ecoulements à basse nombre de Mach avec densité variable.*

## Abstract

The present work is devoted to the development and implementation of a computational framework to perform numerical simulations of low Mach number turbulent reactive flows. The numerical algorithm designed for solving the transport equations relies on a fully implicit predictor-corrector integration scheme. A physically consistent constraint is retained to ensure that the velocity field is solved correctly, and the numerical solver is extensively verified using the Method of Manufactured Solutions (MMS) in both incompressible and variable-density situations. The final computational model relies on a hybrid Large Eddy Simulation / transported Probability Density Function (LES-PDF) framework. Two different turbulence closures are implemented to represent the residual stresses: the classical and the dynamic Smagorinsky models. The specification of realistic turbulent inflow boundary conditions is also addressed in details, and three distinct methodologies are implemented. The crucial importance of this issue with respect to both inert and reactive high fidelity numerical simulations is unambiguously assessed. The influence of residual sub-grid scale scalar fluctuations on the filtered chemical reaction rate is taken into account within the Lagrangian PDF framework. The corresponding PDF model makes use of a Monte Carlo technique: Stochastic Differential Equations (SDE) equivalent to the Fokker-Planck equations are solved for the progress variable of chemical reactions. With the objective of performing LES of turbulent reactive flows in complex geometries, the use of distributed computing is mandatory, and the retained domain decomposition algorithm displays very satisfactory levels of speed-up and efficiency. Finally, the capabilities of the resulting computational model are illustrated on two distinct experimental test cases: the first is a two-dimensional highly turbulent premixed flame established between two streams of fresh reactants and hot burnt gases which is stabilized in a square cross section channel flow. The second is an unconfined high velocity turbulent jet of premixed reactants stabilized by a large co-flowing stream of burned products.

*Keywords: Turbulent Premixed Combustion, Large Eddy Simulation, Low-Mach Number Variable Density Flows.*